



HAL
open science

Description globale de la radioactivité nucléaire et des états clusters dans le cadre des approches relativistes de l'énergie fonctionnelle de la densité

Florian Mercier

► **To cite this version:**

Florian Mercier. Description globale de la radioactivité nucléaire et des états clusters dans le cadre des approches relativistes de l'énergie fonctionnelle de la densité. Physique Nucléaire Théorique [nucl-th]. Université Paris-Saclay, 2022. Français. NNT : 2022UPASP057 . tel-03771332

HAL Id: tel-03771332

<https://theses.hal.science/tel-03771332>

Submitted on 7 Sep 2022

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.

Description globale de la radioactivité
nucléaire et des états clusters dans le
cadre des approches relativistes de
l'énergie fonctionnelle de la densité.
*Global description of nuclear radioactivity and cluster
states using relativistic energy density functional
approaches.*

Thèse de doctorat de l'université Paris-Saclay

École doctorale n° 576, Particules, Hadrons, Énergie et Noyau :
Instrumentation, Imagerie, Cosmos et Simulation (PHENIICS)
Spécialité de doctorat : Structure et Réactions Nucléaires
Graduate School : Physique, Référent : Faculté des sciences d'Orsay

Thèse préparée dans l'unité de recherche IJCLab (Université Paris-Saclay,
CNRS), sous la direction d'Elias KHAN, professeur et le co-encadrement de
Jean-Paul EBRAN, ingénieur de recherche.

Thèse soutenue à Paris-Saclay, le 28 Juin 2022, par

Florian MERCIER

Composition du jury

Marcella GRASSO Directeur de recherche, Université Paris-Saclay GS Physique, IJCLab	Présidente
Luis ROBLEDO Professeur, Universidad Autonoma de Madrid	Rapporteur & Examineur
Jerome MARGUERON Directeur de recherche, IP2I Lyon	Rapporteur & Examineur
Jerome GIOVINAZZO Directeur de recherche, LP2I Bordeaux	Examineur
Elias KHAN Professeur, Université Paris-Saclay GS Physique, IJCLab	Directeur de thèse

Titre : Description globale de la radioactivité nucléaire et des états clusters dans le cadre des approches relativistes de l'énergie fonctionnelle de la densité.

Mots clés : structure nucléaire, radioactivité, cluster, problème à N-corps quantique, théorie effective des champs, physique théorique

Résumé : Les systèmes nucléaires exhibent de nombreuses propriétés individuelles et collectives héritées de deux caractéristiques principales : les noyaux sont des systèmes auto-liés par l'interaction nucléaire forte et ils sont composés d'un nombre important de particules. La première de ces spécificités empêche la dérivation simple d'un potentiel nucléon-nucléon. La seconde fait des systèmes nucléaires des problèmes à N-corps quantiques, problème intrinsèquement complexe à résoudre.

De cette complexité émerge aussi toute la richesse des systèmes nucléaires. La distribution des nucléons au sein du noyau en est un parfait exemple. D'une structure parfaitement homogène décrite par un liquide de Fermi à la présence d'inhomogénéités importantes appelées clusters, les nucléons s'arrangent dans le noyau de façon complexe. Ces différentes propriétés peuvent être étudiées à l'aide du formalisme de l'énergie fonctionnelle de la densité covariant (cEDF) au niveau champ moyen (RMF) ou bien en incluant les corrélations particule-particule (RHB). Cette approche permet d'obtenir une description satisfaisante des propriétés générales du noyau (énergie, rayon, spectre, ...), et en particulier de rendre compte de l'apparition de structures en clusters au sein du noyau.

Les EDF sont construites à partir de Lagrangiens phénoménologiques dont les différents paramètres doivent être ajustés pour reproduire les résultats expérimentaux. Cet ajustement peut s'avérer particulièrement complexe et coûteux numériquement si l'on souhaite obtenir une interaction capable de décrire l'entière de la carte des noyaux avec une bonne précision. Une méthode combinant approche Monte-Carlo et minimisation simplex est présentée ici afin d'ajuster différentes fonctionnelles relativistes. Ces nouvelles fonctionnelles sont ensuite testées sur environ 1000 noyaux

dont l'énergie, le rayon, les gaps, la déformation et d'autres propriétés sont confrontées aux données expérimentales disponibles.

L'approximation du champ moyen permet de reproduire un grand nombre de propriétés avec un bon accord théorie-expérience dans un cadre aujourd'hui peu coûteux numériquement. Cependant, cette approximation néglige un grand nombre de corrélations dont la prise en compte peut s'avérer nécessaire pour obtenir une description de certains phénomènes. Plusieurs méthodes existent pour aller au-delà du champ moyen statique et nous nous intéressons particulièrement ici au formalisme QRPA (quasiparticle random phase approximation) dont une reformulation récente, la QFAM (quasiparticle finite amplitude method), permet des calculs à grande échelle. Les fonctions de réponses calculées dans ce formalisme montrent que l'étude des structures en clusters mentionnées précédemment s'avère particulièrement importante dans la compréhension des excitations de basse énergie dans les systèmes nucléaires. D'autres mécanismes d'apparition de résonances sont étudiés comme l'excès de neutrons ou l'appariement.

Ces structures en clusters possèdent aussi une grande importance dans la description du phénomène de radioactivité. En effet, une compréhension profonde de la préformation et de l'émission de ces clusters permet d'approcher le phénomène de radioactivité d'un point de vue microscopique. En particulier, le phénomène d'émission spontanée de particules α ne disposait pas, jusqu'à présent, d'une description entièrement microscopique en termes de nucléons seulement. La puissance du formalisme utilisé ici a de plus permis d'identifier un nouveau mode de désintégration théorique où deux particules α sont simultanément émises dos à dos.

Title : Global description of nuclear radioactivity and cluster states using relativistic energy density functional approaches.

Keywords : nuclear structure, radioactivity, cluster, quantum many body problem, effective field theory, theoretical physics

Abstract :

Nuclear systems exhibit many individual and collective properties inherited from two main characteristics : nuclei are self-bonded systems through the strong nuclear interaction, and they are composed of a large number of particles. The first of these features prevents the simple derivation of a nucleon-nucleon potential. The second makes nuclear systems quantum many body problems, which are intrinsically complex to solve.

From this complexity also emerges the richness of nuclear systems. The distribution of nucleons within the nucleus is a perfect example. From a perfectly homogeneous structure described by a Fermi liquid to the presence of important inhomogeneities called clusters, nucleons arrange themselves in the nucleus in a complex way. These different properties can be studied using the covariant density functional energy (cEDF) formalism at the mean-field level (RMF) or including particle-particle correlations (RHB). This approach allows to obtain a satisfactory description of the general properties of the nucleus (energy, radius, spectrum, ...), and in particular to account for the appearance of cluster structures in the nucleus.

The EDFs are constructed from phenomenological Lagrangians whose various parameters must be adjusted to reproduce the experimental results. This adjustment can be particularly complex and numerically expensive if one wishes to obtain an interaction capable of describing the entire nuclear chart with good accuracy. A method combining Monte-Carlo approach and simplex minimisation is presented here in order to fit different rela-

tivistic functionals. These new functionals are then tested on about 1000 nuclei whose energy, radius, gaps, deformation and other properties are compared with available experimental data.

The mean field approximation allows to reproduce a large number of properties with a good theory-experiment agreement in a numerically inexpensive framework. However, this approximation neglects many correlations which may be necessary to obtain a description of certain phenomena. Several methods exist to go beyond the static mean field, and we are particularly interested here in the QRPA (quasiparticle random phase approximation) formalism, of which a recent reformulation, the QFAM (quasiparticle finite amplitude method), allows large-scale calculations. The response functions calculated in this formalism show that the study of the above-mentioned cluster structures is particularly important in understanding low-energy excitations in nuclear systems. Other mechanisms for the appearance of resonances are studied, such as neutron excess or pairing.

These cluster structures are also of great importance in the description of the radioactivity phenomenon. Indeed, a deep understanding of the preformation and emission of these clusters allows to approach the radioactivity phenomenon from a microscopic point of view. In particular, the phenomenon of spontaneous α particle emission did not have, until now, a fully microscopic description in terms of nucleons only. The power of the formalism used here has furthermore allowed the identification of a new theoretical decay mode where two α particles are simultaneously emitted back to back.

Titre : Description globale de la radioactivité nucléaire et des états clusters dans des approches relativistes de l'énergie fonctionnelle de la densité.

Mots clés : structure nucléaire, radioactivité, cluster, problème à N-corps quantique, théorie effective des champs, physique théorique

Résumé : Le noyau atomique est un système quantique composé de nombreuses particules que sont les protons et neutrons. Ces particules interagissent de manière complexe au travers de l'interaction nucléaire forte, interaction pour laquelle il est encore aujourd'hui particulièrement compliquée d'obtenir une description mathématiquement rigoureuse. Cette difficulté, ajoutée à la complexité inhérente liée à la description d'un système composé de multiples particules, nous force à faire usage d'approximations.

Obtenir une description cohérente et satisfaisante du noyau reste cependant important (applications médicales, énergétique, astrophysique, ...). L'obtention des propriétés de l'état fondamental qui représente l'état le plus stable d'un système

quantique permet d'étudier de nombreuses propriétés comme l'énergie ou la répartition spatiale du noyau. Cependant, cet état fondamental ne reflète pas toute la complexité d'un noyau.

Un phénomène important et intéressant prenant place au sein des noyaux est celui de la radioactivité. Expérimentalement découvert il y a plus d'un siècle avec la radioactivité α , ce phénomène reste cependant complexe à décrire lorsque l'on souhaite traiter le noyau comme une collection de protons et neutrons. Le travail réalisé dans cette thèse a en particulier permis de mieux comprendre le mécanisme à l'origine de ce phénomène et en a même proposé un nouveau type où deux particules α sont émises simultanément dos à dos.

Title : Global description of nuclear radioactivity and cluster states using relativistic energy density functional approaches.

Keywords : nuclear structure, radioactivity, cluster, quantum many body problem, effective field theory, theoretical physics

Abstract : The atomic nucleus is a quantum system composed of numerous particles, namely protons and neutrons. These particles interact in a complex way through the strong nuclear interaction, an interaction for which it is still particularly complicated to obtain a mathematically rigorous description. This difficulty, added to the inherent complexity of describing a system composed of many particles, forces us to make use of approximations.

However, obtaining a coherent and satisfactory description of the nucleus remains important (medical applications, energy, astrophysics, etc.). Calculation of the ground state properties, which represents the most stable state of a quantum sys-

tem, allows us to study many properties such as the energy or the spatial distribution of the nucleus. However, this ground state does not include the full complexity of a nucleus.

An important and interesting phenomenon that takes place within nuclei is radioactivity. Experimentally discovered more than a century ago with the α decay, this phenomenon remains however complex to describe when one wishes to treat the nucleus as a collection of protons and neutrons. The work carried out in this thesis has in particular allowed for a better understanding of the mechanism at the origin of this phenomenon and has even proposed a new type of decay where two α particles are emitted simultaneously back to back.

Remerciements

Les remerciements, passage étrange au début d'une thèse, très personnel, mais finalement lu par de nombreuses personnes. À celles et ceux qui s'arrêteraient sur ces lignes, emprunts de curiosité, bienvenue !

Les trois années que constituent une thèse ne se ressemblent en rien, surtout quand le Covid a décidé d'en ruiner une partie moins d'un an après son début. L'appropriation de son sujet de thèse est certainement la tâche la plus longue et la plus ardue. Elle ne se termine d'ailleurs pas vraiment une fois le manuscrit achevé où même une fois le grade de docteur obtenu. Elle évolue juste, petit à petit, au fil des travaux. Ainsi, ma thèse en a vu de toutes les couleurs et s'est parfois étirée dans des directions douteuses, jusqu'à ce qu'une idée permette de la ramener dans le droit chemin, ou de la recadrer.

Mais au-delà de l'aspect purement scientifique dont les 200 et quelques pages qui suivent permettent de prendre la pleine mesure, la thèse est remplie de nombreuses autres expériences. En particulier pour moi, cette thèse fut aussi une incroyable opportunité de découvrir l'enseignement au niveau académique. Avec la confiance de KV, rien de mauvais ne pouvait m'arriver de ce côté-là et ce fut avec un immense plaisir que j'ai enseigné avec toi. Au passage, je réitère mes remerciements concernant ta confiance et de façon générale, pour tout ce que tu as pu faire pour moi ces sept (7!) dernières années. Une autre expérience incroyable d'enseignement fut celle du FPT. Retour au bercail deux ans après, passant du statut d'étudiant à celui d'encadrant. Quelle aventure encore une fois. Sûrement moins stressante que quelques années auparavant, mais quand même, il faut savoir les remuer un peu ces étudiants ! Cette expérience a en particulier été une franche réussite grâce à Claire et Fred que je remercie. Et puis bien sûr aussi grâce aux étudiants des années que j'ai pu encadrer (je ne prendrai pas le risque de les citer), merci à vous aussi.

Malgré le covid, cette thèse a aussi été pour moi ma première "vraie" expérience professionnelle. Un bureau à soit où on peut s'étaler (jusqu'à déborder sur le bureau des autres). Des collègues avec qui les pauses s'enchaînent, les tableaux se noircissent de blagues douteuses, avec qui on vit, tout simplement. Scientifiquement parlant, on

néglige sûrement un peu, en tant que thésard (en tout cas, c'est sûrement mon cas), l'importance des discussions avec des personnes qui font d'autres choses (parce que oui, le monde ne gravite pas autour de notre thèse!). Et l'équipe PhyNet est pleine de personnes qui font des travaux variés, ce qui m'a permis pendant ces trois ans de voir plus loin et de continuer à attiser ma curiosité pour la physique en général. Donc un grand merci à toute l'équipe de physique nucléaire théorique d'IJCLab pour cette bonne ambiance permanente malgré des temps difficiles. Merci aux permanents, aux thésards, post-docs, stagiaires et toutes les autres personnes que j'ai pu côtoyer pendant ces trois années.

J'ai eu cette chance, je crois, de voir différents projets de thèse se conclurent six mois avant la fin de ma thèse. Cela m'a permis de commencer la rédaction de ce manuscrit très tôt et de soutenir avant les vacances d'été (royal ...). Au moment où j'écris ces lignes, j'ai en tête une photo d'un certain thésard à 0h15, le jeudi 14 juillet, dans son bureau. Aie. Heureusement pour ma santé mentale, je n'ai pas connu ces moments de rush intense. C'est un peu l'histoire de ma thèse. Il y a des très beaux moments, des questionnements (beaucoup!), des moments vachement moins drôles, mais finalement assez peu de moments de rush. Et ça, j'en suis encore une fois très reconnaissant à Elias qui a forcément joué un rôle important dans la construction d'une thèse qui me correspondait. Ça me semble donc être le bon endroit pour te remercier encore une fois, Elias, pour ta disponibilité malgré tes responsabilités au département, pour ta bonne humeur générale, à toute heure! Mais aussi bien sûr pour le côté scientifique que tu as pu m'apporter. Tu m'as montré ce que c'était que de faire de la recherche et je n'aurai pas pu imaginer de meilleur guide. Merci encore. Et j'espère de tout cœur qu'on aura l'occasion de se recroiser de temps en temps.

Bien sûr, je ne pourrai écrire ces remerciements sans mentionner mon jury de thèse. Merci à tous d'avoir accepté d'en faire partie. Merci d'avoir pris le temps de lire ces pages. Et merci pour les discussions très intéressantes que l'on a pu avoir pendant la soutenance, et même après.

Le volet encore plus personnel commence ici où je commencerai par remercier ma famille qui en a un peu vu de toutes les couleurs avec mes revirements douteux pendant ma scolarité. Puis encore plus ces derniers mois ou cette dernière année où je me torture l'esprit, et le leur avec, pour savoir vers quoi me diriger après la thèse. Merci pour votre patience, vos encouragements et votre amour!

Ça fera redite pour les personnes concernées, mais au moins, ce sera écrit quelque part. Je veux remercier encore une fois profondément deux personnes incroyables qui sont entrées dans ma vie à deux ans d'intervalle. La première, Alice, plus de 8 ans que l'on partage notre vie maintenant! Cette thèse, ce fut aussi l'opportunité d'obtenir une première indépendance financière et d'emménager ensemble : un nouveau départ! Alors merci d'avoir relu ce manuscrit pour y corriger les nombreuses fautes d'orthographe même si ton moment favoris, j'en suis sûr, restera la lecture du concept de configurations trou-trou. Et merci pour toutes ces années passées et à venir! La deuxième personne, les gens qui me connaissent le savent, c'est Sullivan. Tu es peut-être la personne avec qui j'ai passé le plus de temps ces 7 dernières années, et surtout ces trois dernières. On s'est rencontré en L2 et je crois qu'on s'est jamais vraiment lâché même si, comme dans

tous les couples, il y a eu des hauts et des bas. Quand on y repense, je me dis que c'était pas anodin quand tu m'as orienté vers la thèse que proposait Elias, dans le même labo où tu comptais en faite une aussi ... Donc, je te dois cette thèse et les trois superbes années passées à quelques dizaines de mètres l'un de l'autre avec les (trop) nombreuses pauses à se torturer sur notre avenir. Donc merci encore et j'ai hâte de découvrir nos évolutions respectives dans les années à venir !

Peu de noms cités, de peur d'en oublier. Mais merci de tout cœur à tous ceux qui ont pu participer, de près ou de loin, à mon parcours ces dernières années. Le chemin de la recherche s'arrête peut-être là pour moi, mais quelle plaisante aventure ce fut.

Table des matières

Remerciements	V
Table des figures	XV
Liste des tableaux	XXIII
Liste des acronymes	XXV
Introduction	1
Références	4
1 Interaction nucléaire	5
1.1 Interaction forte	6
1.1.1 Lagrangien de QCD	6
1.1.2 Symétries de QCD	7
1.1.3 Fonction β de QCD	8
1.2 Théorie effective	9
1.2.1 Théorie chirale	9
1.2.2 Extensions	11
1.2.3 Résumé	13
1.3 Approche phénoménologique	14
1.3.1 Approximation OBE	14
1.3.2 Contraintes expérimentales	15
1.3.3 Interaction par échange de mésons	15
1.3.4 Interaction de portée nulle	17
1.3.5 Introduction aux approches de champ moyen généralisé	18
1.4 Interaction forte dans le milieu	19
1.4.1 Condensat chirale à densité finie	21
1.4.2 Dépendance en densité phénoménologique	21

1.5	Conclusion	23
	Références	24
2	Méthode de l'énergie fonctionnelle de la densité	29
2.1	Théorie de la fonctionnelle en densité	30
2.1.1	Matrice densité	31
2.1.2	Théorème d'existence	32
2.1.3	Lien avec les EDF	34
2.2	Théorie Hartree-Fock	35
2.3	Théorie Hartree-Fock-Bogoliubov	37
2.3.1	Motivations	37
2.3.2	Théorie BCS pour les systèmes nucléaires	39
2.3.3	Formalisme de Bogoliubov	41
2.3.4	Équations HFB	42
2.4	Équations du mouvement	43
2.4.1	Partie fermionique	43
2.4.2	Partie mésonique	43
2.5	Hamiltonien du système	44
2.5.1	Partie fermionique	44
2.5.2	Partie mésonique	45
2.5.3	Partie interaction	45
2.5.4	Hamiltonien final	45
2.5.5	Quantification	46
2.6	Équations RMF et RHB	47
2.6.1	Approximation Hartree	47
2.6.2	Autres approximations	48
2.6.3	Équations RMF	49
2.6.4	Équations RHB	50
2.7	Aspects numériques	51
2.7.1	Résolution des équations RHB	51
2.7.2	Calculs contraints	51
2.8	Conclusion	53
	Références	54
3	Agrégation nucléaire et transition de phase	57
3.1	Phénomène d'agrégation nucléaire	58
3.1.1	Approche qualitative	59
3.1.2	Fonction de localisation	60
3.2	Formalisme RHB à température finie	64
3.2.1	Grand potentiel, matrice densité et facteur d'occupation	65
3.2.2	Équations RHB à température finie	66
3.2.3	Prise en compte des fluctuations statistiques	67
3.3	Évolution de la déformation avec la température : approche statistique	68
3.3.1	Approche statistique : génération aléatoire	68
3.3.2	Approche statistique : théorie de Landau	71
3.4	Évolution de la déformation avec la température : résultats FT-RHB	72
3.4.1	Systématique	73

3.4.2	Impact des fluctuations thermiques	75
3.5	Évolution de l'agrégation avec la température	77
3.6	Conclusion	78
	Références	79
4	Procédure d'ajustement des fonctionnelles et effet d'un terme tenseur au niveau RHB	83
4.1	Terme tenseur au niveau RMF	85
4.1.1	Équation du mouvement	86
4.2	Procédure d'ajustement	87
4.2.1	Paramétrisation des fonctionnelles	87
4.2.2	Données expérimentales	88
4.2.3	Protocole d'optimisation	89
4.2.4	Résultats	92
4.3	Analyse de l'échantillonnage	95
4.3.1	Les paramètres	95
4.3.2	Corrélations	97
4.4	Applications et discussion	100
4.4.1	Matière nucléaire infinie	100
4.4.2	Énergie de liaison et rayons	101
4.4.3	Impact de la déformation	103
4.4.4	Gaps	104
4.4.5	Densité	105
4.5	Conclusion	107
	Références	108
5	Étude des excitations isoscalaires monopolaires de basse énergie	111
5.1	Introduction	112
5.1.1	Au-delà du champ moyen	112
5.1.2	Excitations	114
5.2	Méthode des amplitudes finies	116
5.2.1	Méthode Hartree-Fock dépendant du temps	117
5.2.2	QRPA	118
5.2.3	QFAM	120
5.2.4	Fonction de réponse et lien avec la QRPA	122
5.2.5	Aspects numériques	124
5.3	Modes propres avec la FAM	125
5.3.1	Obtenir les probabilités de transition	126
5.3.2	Obtenir les amplitudes propres	127
5.3.3	Obtenir tous les pôles de la fonction de réponse	127
5.3.4	Procédure numérique	128
5.4	Excitations cluster	133
5.4.1	Exemple du ^{20}Ne	134
5.4.2	Fonction de réponse à déformation contrainte	137
5.4.3	Études d'autres noyaux $N = Z$	138
5.5	Excitations de neutrons	140
5.5.1	Chaînes isotopiques du Calcium et du Nickel	141

5.5.2	Généralisation	147
5.5.3	Impact de la déformation	148
5.6	Excitation de paires	152
5.6.1	Cas sphérique	154
5.6.2	Impact de la déformation	155
5.7	Conclusion	157
	Références	158
6	Étude de la radioactivité d'un point de vue microscopique	167
6.1	Aperçu des formalismes	169
6.1.1	Dynamique collective de grandes amplitudes	169
6.1.2	Description microscopique du phénomène de radioactivité	170
6.1.3	Aspects numériques	172
6.2	Masses inertielles avec ATDHFB	173
6.2.1	ATDHFB	173
6.2.2	Masse collective inertielle	175
6.2.3	Approximation crankée perturbatif	175
6.2.4	Calcul du chemin	176
6.3	Masses inertielles avec ASCC et QFAM	178
6.3.1	Formalisme ASCC	179
6.3.2	Application	180
6.4	Radioactivité α dans les noyaux de masses intermédiaires : cas de la chaîne $^{108}\text{Xe} \rightarrow ^{104}\text{Te} \rightarrow ^{100}\text{Sn}$	181
6.4.1	Cas du ^{108}Xe	182
6.4.2	Cas du ^{104}Te	183
6.5	Radioactivité α , cluster et 2α dans les noyaux lourds	184
6.5.1	Difficulté et approche géométrique	185
6.5.2	Radioactivité α dans le ^{212}Po	188
6.5.3	Radioactivité α et cluster dans le ^{224}Ra	189
6.5.4	Radioactivité 2α	191
6.5.5	Discussion sur la présence d'une barrière de potentiel	195
6.6	Conclusion	197
	Références	199
	Conclusion	205
	Références	207
	Appendices	209
A	Détails sur les paramétrisations utilisées	211
A.1	Interaction par échange de mésons	211
A.2	Interaction de contact	212
	Références	213
B	Éléments de matrice de l'Hamiltonien à un corps	215
B.1	Base d'oscillateur harmonique sphérique	215
B.1.1	Spineur sphérique et partie radiale	215

B.1.2	Base sphérique	217
B.1.3	Éléments de matrice	217
B.2	Base d'oscillateur harmonique axial	219
B.2.1	Spineur axial	219
B.2.2	Base axiale	220
B.2.3	Éléments de matrice	223
C	Équation d'états de la matière nucléaire infinie	227
C.1	Densité Lagrangienne, équations du mouvement et densités	227
C.2	Énergie et pression	228
C.3	Incompressibilité	229
C.3.1	Partie mésonique	229
C.3.2	Partie cinétique	230
C.4	Énergie de symétrie	230
	Références	231
D	Quelques détails concernant la QRPA	233
D.1	Propriétés utiles de la fonction de réponse	233
D.2	Modes de Nambu-Goldstone	234
D.3	Représentation PQ	236
	Références	237
E	Éléments de matrice pour le calcul des masses inertielles	239
E.1	Méthode de calcul	239
E.2	Moment quadrupolaire	240
E.3	Moment octupolaire	241
E.4	Moment hexadecapolaire	241

Table des figures

1.1	Schéma représentant les différentes brisures de symétries des groupes de QCD. La figure représentant la fonction β est prise de [CT15]. Les détails sont donnés dans la Sec.1.2	13
1.2	Représentation de l'interaction entre nucléons dans l'approximation OBE.	15
1.3	Représentation des différentes contributions mésoniques au potentiel central de l'interaction nucléon-nucléon (traits pointillés). Le potentiel nucléon-nucléon final est présenté en trait plein.	16
2.1	Schéma générique de résolution du problème à N-corps dans l'implémentation de Kohn-Sham de la DFT.	34
3.1	Densités fondamentales du ^{20}Ne calculées dans des approches RHB avec (à gauche) la paramétrisation DD-ME2 et (à droite) au niveau HFB avec la paramétrisation SLy4. Figure tirée de [Ebr+12].	59
3.2	Évolution du paramètre α_{OH} avec le nombre de particules A pour différentes valeurs de potentiels V et nombre quantique principal n . Les points noirs représentant le résultat de calculs RHB avec la fonctionnelle DD-ME2 sont tirés de [Ebr+13].	61
3.3	Densité et localisation du ^{20}Ne dans son état fondamental obtenues au niveau RHB avec la fonctionnelle DD-ME2.	63
3.4	Sur chaque graphe sont tracées la densité de neutrons à gauche et, dans l'ordre à droite de chaque graphe, la localisation $C_{n\sigma}$, la densité cinétique $\tau_{n\sigma}\rho_n$ et la dérivée spatiale de la densité au carré $\frac{1}{4}(\nabla\rho_n)^2$	64
3.5	$\langle b \rangle_n$ défini dans Eq.(3.33) en fonction de la température T pour 100 trajectoires générées aléatoirement avec $N = 1000$ et un gap $\Delta = 0$. La déformation initiale est fixée à $b_0 = 0$ pour toutes les générations. La densité totale définie par l'Eq.(3.35) est tracée pour quelques valeurs de températures avec $a = 3$ (unité arbitraire).	69
3.6	Évolution schématique de l'énergie libre avec la température. Les températures T_1 , T_2 et T_3 sont définies dans le texte.	71

3.7	Évolution de la température critique T_C en fonction du nombre de neutrons N et protons Z	73
3.8	Évolution de la température critique T_C en fonction du nombre de nucléons A et de la déformation initiale $\beta_2 (T = 0)$	74
3.9	Évolution de la température critique T_C en fonction de la déformation initiale $\beta_2 (T = 0)$ dans certaines chaînes isotopiques. Le meilleur ajustement linéaire est tracé en pointillés pour chaque chaîne.	75
3.10	À gauche sont présentées les évolutions de la déformation quadrupolaire avec la température dans le cas du ^{20}Ne (courbe bleue) et du ^{164}Er (courbe orange). Les courbes en pointillés correspondent aux résultats FT-RHB sans prise en compte des fluctuations thermiques. Les courbes en trait plein représentent les résultats prenant en compte les fluctuations thermiques. À droite sont tracées l'entropie par nucléons en trait plein et la capacité calorifique $C_V = T \frac{\partial S}{\partial T}$ par nucléons en fonction de la température.	76
3.11	Évolution de l'énergie libre (en bleu) avec la déformation tracée à différentes températures. Les probabilités associées à chaque configuration déformée sont tracées en rouge. Les températures sont données en MeV.	77
3.12	Évolution de la densité et de la localisation dans le ^{20}Ne avec la température. La première ligne correspond aux quantités non moyennées et la seconde aux quantités moyennées.	78
4.1	Vue schématique des différentes étapes de la minimisation. Voir le texte pour plus de détails.	93
4.2	Valeurs de χ^2 en fonction du nombre d'itérations pour 7 marcheurs différents (sélectionnés aléatoirement sur les 200) représentés par des couleurs différentes.	94
4.3	RMS sur les énergies de liaison en fonction du χ^2 . Les points représentent les résultats MCMC et les triangles les résultats de la minimisation simple. La légende en couleur montre la valeur moyenne de $E_{exp} - E_{th}$. Le point entouré d'un carré représente la paramétrisation choisie pour les applications présentées ci-après.	95
4.4	Valeurs des paramètres des 100 calculs MCMC les plus convergés pour DD-MEV (bleu) et DD-MEVT (orange). Les points noirs représentent la paramétrisation qui est utilisée dans les sections suivantes pour les applications (voir le texte pour plus de détails). Les deux derniers graphiques montrent les constantes de couplage tensoriel, expliquant les valeurs constantes 0 de la paramétrisation DD-MEV pour ces paramètres.	97
4.5	Matrice de corrélation obtenue dans les calculs MCMC pour l'interaction DD-MEV (à gauche) et DD-MEVT (à droite).	98
4.6	Évolution des constantes de couplage dépendantes de la densité Γ_σ , Γ_ω and Γ_ρ en fonction de la densité ρ . Trois paramétrisations sont affichées : DD-ME2, DD-MEV and DD-MEVT. Les zones colorées correspondent aux déviations standards calculées dans l'approche MCMC (voir le texte pour plus de détails).	99

4.7	Évolution de $B_{\text{exp}} - B_{\text{th}}$ avec le nombre de neutrons. Les lignes rouges horizontales représentent le RMS des énergies de liaisons.	101
4.8	Évolution de l'énergie tenseur par nucléon E_{ω}^T/A avec le nombre de neutrons et protons.	102
4.9	PES 1D (en haut) pour le ^{20}Ne , ^{120}Sn et ^{238}U avec les paramétrisations DD-ME2, DD-MEV et DD-MEVT . Le rapport entre énergie tenseur et énergie totale est présenté dans le graphe du bas dans le cas de DD-MEVT.	104
4.10	Densités (en haut) totale (à gauche), de proton (au milieu) et de neutron (à droite) et différences de densités entre DVV et DD-MEVT (en bas) dans le cas du ^{20}Ne	106
4.11	Identique à Fig.4.10 mais pour le ^{34}Si	106
5.1	Représentation schématique des différents modes de résonance géante. Les couleurs orange, rouge et bleue représentent respectivement un ensemble de protons + neutrons, protons seuls et neutrons seuls. Les flèches fines représentent un mouvement collectif. Les flèches pleines représentent les spins des particules impliquées dans le mouvement. Voir le texte pour plus de détails. Figure inspirée de [RS80].	115
5.2	Comparaison des réponses isoscalaires monopolaires dans le ^{20}Ne pour différent nombre de couches d'oscillateurs N_{sh} . Figure tirée de [Mer+21].	126
5.3	Résultats de l'intégration numérique sur des contours circulaire et rectangulaire pour une fonction test $f(z) = \frac{1}{z-\omega}$ où ω représente le pôle à trouver. L'écart à la valeur attendue pour l'intégrale est présenté à gauche. L'écart à la valeur attendue pour le ratio des moments est présentée à droite. Les résultats sont présentés ici pour un rayon $r = 1$ et un pôle $\omega = 1$	130
5.4	Illustration de la procédure de recherche de pôles par dichotomie. Les étapes se déroulent de gauche à droite puis de haut en bas. Les points rouges représentent les pôles à trouver par l'algorithme. Les cercles représentent les contours calculés et leur couleur dépend du nombre de pôles présents à l'intérieur : plusieurs pôles (bleu), un pôle (vert) et aucun pôle (rouge).	132
5.5	Identique à Fig.5.4. Sont indiqués en plus sur les deux premières étapes (haut gauche et haut droite), les points utilisés pour le calcul du contour. Les points en noir sur ces deux figures représentent les points qui ne pourront être utiles qu'une seule fois. Ceux en vert représentent ceux qui pourront être utilisés plusieurs fois.	133
5.6	Densité à l'équilibre du ^{20}Ne (à gauche) et fonction de localisation $C_{\tau\sigma}$ (à droite) obtenues dans un modèle RHB avec la fonctionnelle DD-PC1.	134
5.7	Fonctions de réponses isoscalaires pour le ^{20}Ne pour les différentes multipolarités $J = 0, 1, 2, 3$. Les projections K sont présentées pour chaque multipolarité en pointillés. La réponse totale à un J fixé est présentée en traits pleins.	135

5.8	Évolution de la densité et de la fonction de localisation dans le temps à une énergie $\hbar\omega = 6.75\text{MeV}$. Le temps évolue de haut en bas puis de gauche à droite et une période entière est montrée. Les lignes noires horizontales représentent la position du centre de masse des clusters dans l'état fondamental. Figure tirée de [Mer+21].	136
5.9	Illustration schématique des contributions 2-qp les plus importantes à l'excitation ISM à $\hbar\omega = 6.7\text{ MeV}$ dans le ^{20}Ne (à gauche pour les neutrons, à droite pour les protons). Les cercles et nombres associés représentent la fraction totale $ X ^2 - Y ^2$ (voir Eq.5.83) emportée par l'excitation. Les densités partielles sont affichées pour chaque configuration ainsi que la configuration fondamentale en l'arrière-plan (que l'on retrouve aussi Fig.5.6). Le niveau de Fermi est représenté par un trait noir continu.	137
5.10	Fonction de réponse ISM pour le ^{20}Ne à différentes déformations contraintes (à gauche). La surface d'énergie potentielle est tracée sur la figure de droite. Les points représentent les déformations pour lesquelles les fonctions de réponse sont affichées sur la figure de gauche.	138
5.11	Contribution dominante dans la décomposition 2-qp (partie supérieure) pour différentes valeurs de déformations dans le ^{20}Ne pour une excitation monopolaire. Spectre sp canonique et nombres d'occupations de certains niveaux canoniques à certaines déformations (partie inférieure). Les lignes noires verticales représentent les contributions principales pour quelques déformations. La ligne noire horizontale représente le niveau de Fermi.	139
5.12	Évolution de la fonction de réponse ISM pour différents noyaux $N = Z$ (^{12}C jusqu'au ^{36}Ar) en fonction de la déformation. Le trait rouge horizontal représente la déformation d'équilibre.	140
5.13	Fonction de réponse ISM dans la chaîne isotopique du Calcium. La fonction de réponse totale (trait plein) est séparée en ses contributions de neutrons (en tiret) et de protons (en pointillé). Figure tirée de [MEK22].	141
5.14	Spectre canonique dans la chaîne isotopique du Calcium. L'énergie de Fermi neutron (proton) est représentée par une ligne noire solide (en trait). Les orbitales vides (pleines) sont représentées par des petits (grands) symboles. Les nombres indiquent l'énergie de la résonance associée au remplissage de la couche.	142
5.15	Densités de transition neutron (noir) et proton (rouge) pour les noyaux $^{40,50,60,62}\text{Ca}$. Les énergies d'excitation ω sont données en MeV. Les lignes bleues verticales représentent les rayons r.m.s. des noyaux dans leur état fondamental respectifs.	143
5.16	Identique à Fig.5.13 mais pour les isotopes du Nickel.	144
5.17	Identique à Fig.5.14 mais pour les isotopes du Nickel.	145
5.18	Réponse monopolaire des $^{56,58,68,79,80,86}\text{Ni}$. La contribution 2-qp dominante est indiquée pour chaque mode de basse énergie.	146

5.19	Évolution du ratio (5.84), avec le nombre de neutrons N pour différentes chaînes isotopique. L'intégration sur les modes de basse énergie est faite jusqu'à $\omega_{\text{sm}} \sim 14 - 18$ MeV suivant la position de la GMR pour chacun des noyaux pris en compte.	147
5.20	Évolution de la réponse monopolaire dans les isotopes du Magnésium à déformations contraintes. Les lignes rouges représentent les déformations correspondantes aux déformations de l'état d'équilibre pour chaque noyau.	149
5.21	Évolution de la réponse monopolaire totale (courbes pleines) dans le ^{32}Mg avec la déformation séparée en contribution de neutrons (traits pleins) et protons (pointillés). L'encart en bas à droite représente l'évolution de l'énergie du ^{32}Mg avec le paramètre de déformation β_2	150
5.22	Énergies canoniques (gauche) de certains niveaux de neutrons du ^{32}Mg et facteur d'occupation correspondant (droite) en fonction du paramètre de déformation β_2 . La ligne noire montre l'énergie de Fermi neutron.	151
5.23	Densités de transition neutron (à gauche sur chaque encart) et proton (à droite) associées à différentes résonances aux énergies ω (en MeV) du ^{32}Mg contraint aux déformations β_2 . Les lignes en noir représentent le contour de la densité totale non perturbée (i.e. la densité statique au niveau RHB) autour de laquelle le noyau oscille sous la perturbation monopolaire.	152
5.24	Orbitales canoniques de neutrons impliquées dans les transitions monopolaires contribuant aux modes d'excitation d'énergie ω (en MeV) dans ^{32}Mg à déformation contrainte β_2 . Le pourcentage de contribution à la réponse totale est indiquée par les nombres et cercles au-dessus de chaque niveau. La couleur de ces cercles renvoie au facteur d'occupation de l'orbitale. Les nombres entre parenthèses montrent le nombre quantique principal de chaque niveau. Finalement, les densités partielles de chaque orbitale sont aussi tracées avec, en fond, la densité totale des nucléons.	153
5.25	Évolution de la réponse monopolaire du ^{54}Ca avec l'énergie d'appariement. La ligne rouge horizontale représente l'énergie d'appariement de l'état fondamental du ^{54}Ca	154
5.26	Évolution de la réponse ISM du ^{34}Mg avec l'énergie d'appariement. La déformation est fixée à $\beta_2 = 0.31$ qui correspond à la déformation de l'état fondamental du noyau. La ligne rouge horizontale représente l'énergie d'appariement de l'état fondamental du ^{34}Mg	155
5.27	Densités de transition du ^{24}Mg dans le canal ISM. Les énergies d'excitation sont données en MeV. La densité de transition en haut à gauche correspond à une excitation d'appariement, celle en haut à droite à une résonance cluster. En bas à gauche il s'agit d'une résonance de neutrons et en bas à droite d'une résonance géante. La déformation est indiquée en bas à droite de chaque graphique. La densité des neutrons est indiquée à gauche de chaque graphique, et celle des protons à droite. Les lignes noires pointillées représentent le rayon RMS pour l'état fondamental neutron et proton.	156

5.28	Vue schématique de la fonction de réponse ISM pour les noyaux de faible masse ($N < 120$). Voir le texte pour plus de détails.	158
6.1	Valeurs des Q de réaction pour l'émission d'une particule α . Les noyaux $Q_\alpha > 0$ sont représentés en couleurs et les noyaux $Q_\alpha < 0$ en gris. Données tirées de [NND]	169
6.2	Schématisation des déformations quadrupolaire (à gauche), octupolaire (au milieu) et hexadecapolaire (à droite).	171
6.3	Comparaison des masses effectives \mathcal{M} dans le cas du ^{256}Fm en fonction du moment quadrupolaire Q_{20} . Tous les calculs sont faits avec l'approximation ATDHFB Les triangles bleus représentent les résultats obtenus avec l'approximation crankée. Les carrés rouges dans la première figure ceux obtenus avec l'approximation crankée perturbatif, et les cercles verts avec l'approximation crankée perturbatif canonique. Dans les deux figures suivantes, les carrés rouges représentent l'approximation crankée canonique et l'approximation du recouvrement Gaussien. Voir [Bar+11] pour des détails sur cette approximation. Figure tirée de [Bar+11]	177
6.4	Comparaison des masses effectives \mathcal{M} dans le cas du ^{240}Pu en fonction de la déformation β_2 . La courbe pleine bleue représente les résultats obtenus avec l'interaction DD-PC1 en utilisant la méthode LQRPA. La courbe rouge en pointillés représente les résultats obtenus par [WHN21] avec une interaction de Skyrme en utilisant la méthode LQRPA. La courbe verte en pontillés représente les résultats obtenus par [WHN21] avec une interaction de Skyrme en utilisant une approximation crankée perturbative.	181
6.5	Surface d'énergie potentielle (à gauche), masses inertielles (milieu) et la racine du produit des deux (à droite) pour le ^{108}Xe . Le trait pointillé noir représente le chemin de moindre action défini par l'Eq.(6.1).	182
6.6	Densité et fonction de localisation du ^{108}Xe au point de scission α . Figure tirée de [Mer+20].	183
6.7	Identique à Fig.6.5 pour le ^{104}Te	184
6.8	Propriétés liées au paramètre hexadecapolaire.	185
6.9	(À gauche) PES 2D du ^{224}Ra en fonction des paramètres de déformation $\beta_2 - \beta_3$. (À droite) Valeur du paramètre de déformation hexadecapolaire β_4 dans la PES de gauche.	186
6.10	Évolution des déformations β_i en fonction de la distance d dans le cadre du modèle géométrique. Les pentes sont dénotées a et sont données pour chacune des courbes. Des inserts montrant certaines densités sont aussi affichés avec les déformations correspondantes.	187
6.11	PES dans le plan (β_2, β_3) pour certaines valeurs de β_4 pour le ^{212}Po . Les points rouges représentent le chemin de moindre action dynamique. Les inserts représentent les densités à certaines déformations le long du chemin de moindre action. Figure tirée de [Mer+21].	189
6.12	PES dans le plan (β_2, β_3) pour certaines valeurs de β_4 pour le ^{224}Ra	190

6.13	PES dans le plan (β_2, β_3) . Le trait pointillé rouge représente le chemin de moindre action dynamique pour l'émission d'un cluster de ^{14}C . Celui en gris représente le chemin de moindre action statique (i.e. qui minimise l'énergie).	191
6.14	Densité d'un état RHB où deux particules α sont émises dans le ^{224}Ra .	192
6.15	Noyaux $N > 50$ et $Z > 50$ avec $Q_{2\alpha} > 0$, calculés à partir des masses expérimentales [WAT03]. Les noyaux $Q_{2\alpha} < 0$ sont représentés en gris. .	193
6.16	PES 2D (à gauche) dans l'espace $\beta_2 - \beta_4$ du ^{224}Ra . Les masses inertielles et le produit entre la PES et les masses inertielles sont données respectivement au centre et à droite. Le trait en pointillé représente le chemin dynamique amenant à l'émission de deux particules α dos à dos.	194
6.17	PES dans l'espace des coordonnées collectives β_2 et β_4 . Chaque PES a été calculée à des valeurs de $\hbar\omega$ différentes, allant de 5.6 (en haut à gauche) à 6.7 (en bas à droite). Une échelle de couleurs identiques est utilisée pour toutes les PES. Les traits noirs représentent les points où les clusters sont bien composés de 4 nucléons.	197
6.18	Évolution de l'énergie avant (bleu) et après la scission (orange). La distance des clusters au noyau fils est affichée en rouge.	198

Liste des tableaux

4.1	Contraintes sur la matière nucléaire infinie considérée dans l’ajustement (première ligne), et leurs incertitudes associées (seconde ligne). Ces contraintes ont été choisies empiriquement à partir des résultats d’autres paramétrisations (DD-ME2 et DD-PC1) et en utilisant les résultats de [MHG18]	89
4.2	Données expérimentales utilisées pour contraindre l’ajustement sur certains noyaux. Données tirées de [NND]	90
4.3	Les paramètres des nouvelles fonctionnelles sont donnés en gras à chaque entrée du tableau. En dessous sont répertoriés les valeurs moyennes et écart-types (entre parenthèses) obtenus dans l’échantillonnage MCMC.	96
4.4	Propriété de la matière nucléaire infinie à densité de saturation (en gras). En dessous sont répertoriés les valeurs moyennes et écart-types (entre parenthèses) obtenus dans l’échantillonnage MCMC. Les données empiriques proviennent de [MHG18].	100
4.5	Valeurs moyennes et RMS des écarts aux énergies de liaison (lignes 1 et 2) et RMS des rayons (ligne 3) pour différentes paramétrisations.	102
4.6	Valeurs RMS des séparations SO et gaps pour différentes interactions. Les écarts-types sont indiqués entre parenthèses.	105
5.1	Propriétés des modes ISM dans les isotopes du Calcium aux énergies d’excitation ω . La décomposition 2-qp (colonne transition $\alpha \rightarrow \beta$) contribue à la réponse totale à hauteur de $ X_{\alpha\beta} ^2 - Y_{\alpha\beta} ^2$ et avec une énergie $E_\beta + E_\alpha$ où E_μ représente l’énergie de la quasi-particule μ . Les transitions contribuant pour moins de 5% de la réponse ISM ne sont pas affichées.	144
5.2	Identique à Tab. 5.1 mais pour les isotopes du Nickel.	146

6.1	Résultats des calculs de temps de vie dans les noyaux de ^{212}Po et $^{220,222,224}\text{Ra}$. Les $Q_{2\alpha}$ sont donnés en MeV. S_1 représente la contribution à l'action entre le GS et le point de scission et S_2 représente la contribution Coulombienne (i.e. du point de scission jusqu'à l'émission). Les temps de vie expérimentaux sont affichés entre parenthèses dans la colonne 4 pour la radioactivité α . La dernière colonne, $\log(R)$, représente le logarithme du ratio des temps de vie.	195
A.1	Valeur des paramètres des interactions DD-ME2, DD-MEV et DD-MEVT. Les masses des protons et neutrons sont supposés identiques $m_N = 939$ MeV. Les masses des mésons ω et ρ sont prises comme leur valeur mesurée dans le vide, i.e. $m_\omega = 783$ MeV et $m_\rho = 763$ MeV.	212
A.2	Valeur des paramètres de l'interaction DD-PC1. La masse des nucléons est fixe et prise comme $M_N = 939$ MeV.	213
A.3	Valeur des paramètres de l'interaction PC-PK1. La masse des nucléons est fixe et prise comme $M_N = 939$ MeV.	214

Liste des acronymes

(c)EDF : (Covariant) Energy Density Functional

DFT : Density functional Theory

HF(B) : Hartree-Fock(-Bogoliubov)

BCS : Bardeen–Cooper–Schrieffer

RMF : Relativistic Mean Field

RHB : Relativistic Hartree-Bogoliubov

FT-RHB : Finite Temperature RHB

KG : Klein-Gordon

KS : Kohn-Sham

SR-EDF : Single Reference EDF

MR-EDF : Multi Reference EDF

sp : single particle

qp : quasi particle

QCD : Quantum ChromoDynamics

QED : Quantum ElectroDynamics

HLS : Hidden Local Symmetry

OBE : One Boson Expansion

SRG : Similarity Renormalization Group

DBHF : Dirac-Brueckner-Hartree-Fock

MCMC : Markov Chain Monte Carlo

NM : Nelder-Mead
SO : Spin Orbit
BE : Binding Energy
RMS : Root Mean Square
PES : Potentiel Energy Surface
DD-ME(V)(T) : Density Dependant Meson Exchange (Vector) (Tensor)
DD-PC : Density Dependant Point Coupling
GCM : Generator Coordinate Method
(Q)RPA : (Quasi particle) Random Phase Approximation
(Q)FAM : (Quasi particle) Finite Amplitude Method
GR : Giant Resonance
GMR, GDR, GQR : Giant Monopole-Dipole-Quadrupole Resonance
IS / IV : isoscalaire / isovecteur
AMD : Anti-symmetrized Molecular Dynamics
(A)TDHF(B) : (Adiabatic) Time Dependent HF(B)
(A)SCC : (Adiabatic) Self-consistent Collective Coordinates
WKB : Wentzel-Kramers-Brillouin

Introduction

Le noyau atomique est un système quantique unique, d'autant par sa complexité que sa richesse. En sera témoin le siècle passé où la découverte du noyau par Rutherford en 1911 fut le premier pas vers une compréhension plus profonde de ce système. De nombreuses avancées ont vu le jour depuis avec la découverte de ses constituants, les neutrons et protons, des propriétés de magie, de la structure en couches sous-jacente, de l'impact des propriétés collectives émergentes comme la superfluidité ou encore la déformation et bien d'autres phénomènes. Cette complexité, le noyau l'hérite de deux particularités. Tout d'abord, le noyau atomique possède toutes les caractéristiques - et les attraits - d'un problème à N-corps quantique. Ensuite, l'interaction liant les nucléons entre eux, ne possède, jusqu'à présent, aucune dérivation à partir de l'interaction sous-jacente en termes de quarks et gluon décrite par la théorie de la Chromodynamique Quantique (QCD). Ces deux aspects rendent la description des systèmes nucléaires particulièrement complexe d'un point de vue théorique, mais font du noyau un système si intéressant à étudier.

La connaissance et la compréhension des systèmes nucléaires restent cependant primordiales pour nombre d'applications. Par exemple, la structure des étoiles à neutrons nécessite de comprendre en détail l'équation d'état de la matière nucléaire. L'état de Hoyle [Hoy54], excitation particulière du ^{12}C , possède des implications importantes quant à l'abondance de certains éléments dans notre univers. En plus de ces applications astrophysiques, la compréhension du noyau atomique permet de nombreuses applications médicales particulièrement importantes aujourd'hui (radiologie, radiothérapie, IRM, ...). Des études récentes ont montré que les états clusters pouvaient s'avérer particulièrement utiles dans la production de particules α utilisées à des fins de radiothérapie. Finalement, le domaine de l'énergie jouit aussi des connaissances accumulées en physique nucléaire via les centrales nucléaires à fission et possiblement à fusion dans les décennies à venir.

La première modélisation universelle des systèmes nucléaires fut certainement l'approche de la goutte liquide [GR30] et la célèbre formule de Bethe-Weizsäcker [Wei35]

qui permet de calculer l'énergie de liaison d'un noyau en fonction de sa charge Z et son nombre total de nucléons A . Guidées par la nécessité d'obtenir des résultats plus précis et d'étudier des propriétés supplémentaires, les approches microscopiques voient rapidement le jour. Les nucléons sont alors traités comme des particules quantiques évoluant dans un certain potentiel dont la dynamique est dictée par l'équation de Schrödinger. Ce potentiel nucléaire a capté l'attention de nombreux théoriciens et expérimentateurs pendant des décennies et continue encore de le faire aujourd'hui. La difficulté principale liée à l'établissement d'un potentiel nucléaire réside dans l'aspect non perturbatif de l'interaction sous-jacente, l'interaction nucléaire forte, qui lie les quarks entre eux sous forme de nucléons. À la différence des systèmes soumis uniquement à l'interaction électromagnétique pour lesquels il est possible d'établir un lien direct avec la théorie de jauge sous-jacente, l'électrodynamique quantique (QED), il reste aujourd'hui impossible de procéder de la sorte avec la théorie de QCD. Différentes techniques théoriques ont été mises en place progressivement afin de décrire le plus précisément possible l'interaction nucléaire. Tout d'abord phénoménologique avec le potentiel de Yukawa, l'interaction nucléaire est ensuite décrite à l'aide du formalisme des théories effectives permettant d'obtenir une interaction plus profondément ancrée dans QCD. Ces méthodes dites *ab-initio* restent cependant complexes et numériquement coûteuses. La méthode plus phénoménologique de l'énergie fonctionnelle de la densité (EDF) propose de prendre une interaction nucléon-nucléon phénoménologique ajustée sur des données expérimentales. C'est aujourd'hui cette méthode qui permet de décrire le plus grand nombre de noyaux.

Comme discuté précédemment, dériver une interaction cohérente ne constitue pas la seule difficulté pour obtenir une description complète des systèmes nucléaires. Le problème à N -corps quantique, inhérent au noyau, en constitue un second obstacle. L'application de la théorie du champ moyen auto-cohérent propose d'adopter une vision de particules indépendantes évoluant dans un champ moyen commun à tous les nucléons du système. Le potentiel moyen est typiquement construit à partir de l'interaction nucléon-nucléon et peut prendre des formes plus ou moins complexes. Le problème à N -corps devient alors un problème plus facile d'accès où les nucléons sont indépendants les uns des autres. L'auto-cohérence de ces approches, c'est-à-dire le fait que les nucléons impactent la forme du champ moyen qui impacte à son tour les nucléons, permet d'obtenir une description bien plus satisfaisante par rapport à un champ moyen fixe (qui revient alors à résoudre des équations de Schrödinger indépendantes). Cette approche est généralement entreprise via la théorie Hartree-Fock (HF) qui permet de construire le "meilleur" champ moyen, d'un point de vue variationnel, qui prendra le maximum de corrélations en compte. Cette méthode est celle utilisée dans les travaux présentés ici.

La description des systèmes nucléaires en termes de particules indépendantes évoluant dans un champ moyen est une approximation très prédictive qui permet d'obtenir un accord théorie-expérience satisfaisant pour les noyaux magiques. Cependant, la nécessité d'aller au-delà de cette représentation de particules indépendantes s'avère nécessaire afin de décrire la totalité de la carte des noyaux. En particulier, le comportement superfluide des noyaux n'apparaît qu'en prenant en compte des corrélations au-delà de la vision de particules indépendantes. Cette propriété nécessite la prise en

compte de corrélations supplémentaires qu'il est possible d'obtenir en brisant des symétries. Formellement, l'approximation BCS et la théorie Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB) permettent de prendre en compte ces corrélations supplémentaires. Il en est de même pour rendre compte de la déformation des noyaux expérimentalement observée. Cette propriété particulière peut s'obtenir au prix de la brisure de la symétrie de rotation. La plupart des travaux présentés dans cette thèse feront usage de la théorie HFB dans des systèmes à symétrie axiale avec, possiblement, une brisure supplémentaire de la parité du système.

Dans cette thèse, un cadre covariant est utilisé afin de traiter le problème nucléaire. Imposer la covariance des équations décrivant ce système permet de prendre en compte naturellement des phénomènes supplémentaires comme le couplage spin-orbite. Dans les interactions non-relativistes, ce couplage doit être ajouté à la main et les constantes de couplage associées doivent être ajustées. Dans un formalisme covariant, l'apparition de potentiels scalaire et vecteur permet de créer des combinaisons différentes de potentiels qui sont à l'origine du potentiel central et du potentiel spin-orbite. Nous verrons de plus que la formulation covariante permet d'obtenir des structures plus localisées dans le noyau.

Le présent manuscrit s'articule en deux parties distinctes. La première partie, composée des deux premiers chapitres, propose un rapide état de l'art concernant les méthodes utilisées ici. En particulier, le chapitre 1 traite le problème d'obtenir une interaction nucléon-nucléon cohérente. La théorie de QCD χ est brièvement présentée et les étapes clés de la dérivation d'une interaction chirale χ sont décrites. La présentation d'interactions phénoménologiques et l'importance de la dépendance en densité de ces interactions est aussi discutée. Le chapitre 2 présente une méthode du traitement du problème quantique à N-corps. Les points communs et différences entre les méthodes de théorie fonctionnelle de la densité et celle de l'énergie fonctionnelle de la densité sont discutés. La dérivation des équations HF relativistes et HFB relativistes sont ensuite présentées.

La seconde partie de ce manuscrit comporte 4 chapitres proposant des applications différentes du formalisme EDF covariant composant le travail de thèse réalisé ici. Le [troisième chapitre](#) propose en particulier de s'intéresser aux transitions de phase présentes dans le noyau. Ainsi, le phénomène d'agrégation nucléaire présent dans les noyaux légers est introduit et discuté. Les transitions de phase avec la température sont aussi étudiées dans ce chapitre où une attention particulière est portée à l'impact de la température sur la déformation des noyaux.

Le [quatrième chapitre](#) porte sur la procédure d'ajustement des fonctionnelles où une méthode mêlant analyse Markov-Chain-Monte-Carlo (MCMC) et minimisation simplex est présentée. L'obtention d'incertitudes théoriques liées à la méthode d'ajustement est discutée et de nouvelles interactions par échange de mésons sont introduites. En particulier, l'ajout d'un terme tenseur au niveau Hartree-Bogoliubov relativiste (RHB) est discuté en détail.

Le [cinquième chapitre](#) propose d'aller au-delà du champ moyen en utilisant le formalisme de l'approximation de la phase aléatoire (QRPA) et en particulier l'implémentation de la méthode des amplitudes finies (QFAM). Les propriétés d'excitations monopolaires des noyaux légers à basse énergie sont discutées en détail, avec une étude

précise de l'impact de la déformation dans l'émergence de résonances à basses énergies.

Finalement, le [sixième et dernier chapitre](#) couvre la description du phénomène de radioactivité α qui ne disposait pas jusqu'alors d'une description entièrement microscopique. Les équations Hartree-Fock dépendantes du temps sont introduites et une approximation adiabatique est utilisée afin de calculer les masses inertielles nécessaires au calcul de temps de vie.

Références

- [GR30] G. GAMOW et Ernest RUTHERFORD. « Mass defect curve and nuclear constitution ». In : *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character* 126.803 (3 mars 1930), p. 632-644. DOI : [10.1098/rspa.1930.0032](https://doi.org/10.1098/rspa.1930.0032) (cf. p. 1).
- [Hoy54] F. HOYLE. « On Nuclear Reactions Occuring in Very Hot STARS.I. the Synthesis of Elements from Carbon to Nickel. » In : *The Astrophysical Journal Supplement Series* 1 (1^{er} sept. 1954), p. 121. ISSN : 0067-0049. DOI : [10.1086/190005](https://doi.org/10.1086/190005) (cf. p. 1).
- [Wei35] C. F. v. WEIZSÄCKER. « Zur Theorie der Kernmassen ». In : *Zeitschrift für Physik* 96.7 (1^{er} juill. 1935), p. 431-458. ISSN : 0044-3328. DOI : [10.1007/BF01337700](https://doi.org/10.1007/BF01337700) (cf. p. 1).

CHAPITRE 1

Interaction nucléaire

Sommaire

1.1 Interaction forte	6
1.1.1 Lagrangien de QCD	6
1.1.2 Symétries de QCD	7
1.1.3 Fonction β de QCD	8
1.2 Théorie effective	9
1.2.1 Théorie chirale	9
1.2.2 Extensions	11
1.2.3 Résumé	13
1.3 Approche phénoménologique	14
1.3.1 Approximation OBE	14
1.3.2 Contraintes expérimentales	15
1.3.3 Interaction par échange de mésons	15
1.3.4 Interaction de portée nulle	17
1.3.5 Introduction aux approches de champ moyen généralisé	18
1.4 Interaction forte dans le milieu	19
1.4.1 Condensat chirale à densité finie	21
1.4.2 Dépendance en densité phénoménologique	21
1.5 Conclusion	23
Références	24

La structure en nucléons des noyaux atomiques leur confère une complexité et une richesse singulière. Les nucléons, composés de quarks et gluons, sont des structures liées par interaction forte à des échelles d'énergies typiques de l'ordre du GeV où l'interaction forte est une théorie faiblement couplée. Une propriété singulière de cette interaction est d'être aussi responsable des interactions entre nucléons à des échelles d'énergies bien

plus basses où l'interaction forte devient une théorie fortement couplée qui échappe aux traitements perturbatifs habituels. Cette propriété particulière de l'interaction forte de décrire des physiques à des échelles de distance et d'énergie bien différentes où les régimes de couplages changent énormément, complexifie nettement la dérivation d'un potentiel nucléon-nucléon nécessaire à l'étude des propriétés du noyau.

L'interaction forte est aujourd'hui la mieux comprise à travers la théorie de la Chromodynamique Quantique (QCD) dans le formalisme des théories de jauge non-abélienne. Cette théorie est brièvement présentée dans la section 1.1 où le caractère non-perturbatif de QCD à basse énergie est mis en avant à l'aide de la fonction β qui permet de comprendre l'évolution de la constante de couplage avec l'énergie. Le cadre des théories effectives, présenté en section 1.2, permet d'élaborer un cadre théorique adapté à la description des effets de basses énergies de QCD et ainsi d'obtenir des résultats qualitatifs et quantitatifs pour des systèmes de basse énergie. Guidé par ces résultats, il est alors possible de décrire l'interaction nucléon-nucléon de manière plus phénoménologique (et à moindre coût) comme présenté dans la section 1.3.

La structure composite des nucléons engendre l'apparition d'interactions à 3-corps et plus. Dans le milieu, ces interactions, bien que non dominantes aux premiers ordres, impactent fortement le comportement des nucléons. Cependant, inclure ces interactions à N-corps dans les calculs reste encore aujourd'hui extrêmement complexe d'un point de vue numérique et formel. Ainsi, la prise en compte des effets du milieu sur l'interaction à deux corps est une stratégie efficace pour capturer la physique des échanges à plus de deux corps. En particulier, la section 1.4 traite de l'apparition et la prise en compte d'une dépendance en densité dans les paramètres d'une interaction à deux corps.

1.1 Interaction forte

Dans le formalisme de la théorie quantique des champs, l'interaction forte peut être décrite à l'aide de la théorie de la Chromodynamique Quantique (QCD) qui est une théorie de jauge non-abélienne basée sur le groupe de symétrie $SU(N_c)$ où N_c représente le nombre de charges de la théorie. L'expérience a d'ores-et-déjà permis de déterminer que $N_c = 3$ (voir par exemple [AK11]).

1.1.1 Lagrangien de QCD

La densité Lagrangienne de QCD prend la forme usuelle d'une théorie de Yang-Mills ¹

$$\mathcal{L} = \bar{\psi}_i (i\gamma^\mu D_\mu - m_i) \psi_i - \frac{1}{4} G_{\mu\nu}^a G_a^{\mu\nu} \quad (1.1)$$

avec ψ_i les champs de quarks ($i = 1, \dots, N_f$ avec N_f le nombre de saveurs) et m_i leurs masses respectives. La structure covariante est indiquée par les matrices de Dirac γ^μ et la dérivée covariante associée à $SU(N_c)$ est quant à elle définie comme

$$D_\mu = \partial_\mu - igA_\mu^a t_a \quad (1.2)$$

1. La convention de sommation d'Einstein est utilisée dans tout ce manuscrit. La sommation sur les indices de couleurs et de saveurs est implicite sauf mention contraire. Les indices spinoriels ne sont généralement pas explicités.

avec t_a les générateurs du groupe associé et A_μ^a les champs de gluons. La constante de couplage g est d'un intérêt particulier puisqu'elle permettra de déterminer le caractère perturbatif ou non de la théorie à différentes échelles d'énergies (voir Sec.1.1.3).

Le tenseur gluonique $G_{\mu\nu}^a$ déterminant la partie cinétique des champs de gluons est défini de façon usuelle par la relation

$$[D_\mu, D_\nu] = -igt_a G_{\mu\nu}^a \quad (1.3)$$

qui permet d'écrire

$$G_{\mu\nu}^a = \partial_\mu A_\nu^a - \partial_\nu A_\mu^a + gf^{abc} A_\mu^b A_\nu^c \quad (1.4)$$

avec f^{abc} les constantes de structure du groupe de jauge.

1.1.2 Symétries de QCD

Du Lagrangien précédent Eq.(1.1), il est possible d'extraire les différentes symétries de QCD au niveau classique (nous verrons que des anomalies² viennent briser certaines de ces symétries).

Symétrie de jauge La première, présente par construction, est la symétrie de jauge associée au groupe $SU(3)_{\text{couleurs}}$. Cette symétrie peut posséder des anomalies qui s'annulent toutes entre elles pour assurer la cohérence de la théorie. Cette symétrie de jauge n'est de plus pas spontanément brisée.

Symétrie chirale Une seconde symétrie particulièrement importante pour la construction d'une interaction nucléon-nucléon est la symétrie chirale. En réécrivant le Lagrangien sous une forme chirale i.e. en décomposant les spineurs dans leur base d'hélicité, et en omettant la masse pour le moment, la partie fermionique devient

$$\mathcal{L}_f = \bar{\psi}_{+,i} i\sigma^\mu D_\mu \psi_{+,i} + \bar{\psi}_{-,i} i\sigma^\mu D_\mu \psi_{-,i} \quad (1.5)$$

où les σ représentent les matrices de Pauli. Sous cette forme, il est facile d'identifier l'invariance du système sous les transformations suivantes

$$\psi_{-,i} \rightarrow L_{ij} \psi_{-,j} \quad (1.6)$$

$$\psi_{+,i} \rightarrow R_{ij} \psi_{+,j} \quad (1.7)$$

avec $L \in U(N_f)_L$ et $R \in U(N_f)_R$ où N_f représente le nombre de saveurs de la théorie. Ainsi la théorie est invariante sous le groupe chirale

$$G_{\text{chiral}} = U(N_f)_L \times U(N_f)_R \quad (1.8)$$

Il est ensuite possible de décomposer le groupe chirale précédent en sous-groupes $U(N_f)_L \times U(N_f)_R \sim SU(N_f)_L \times U(1)_L \times SU(N_f)_R \times U(1)_R$. Un réarrangement de

2. On rappelle qu'une anomalie est une symétrie présente à l'échelle classique (avant quantification de la théorie), mais pas à l'échelle quantique.

ces sous-groupes peut être réalisé pour faire apparaître une partie symétrique sous les transformations de parité et une partie asymétrique. On note alors généralement

$$U(N_f)_L \times U(N_f)_R \sim SU(N_f)_V \times U(1)_V \times SU(N_f)_A \times U(1)_A \quad (1.9)$$

Nous verrons dans la section suivante que cette symétrie est brisée spontanément et seule la partie vectorielle (diagonale) du groupe survit. La brisure de la partie axiale $SU(N_f)_A$ donne naissance à des bosons de Goldstone représentant des degrés de libertés mésoniques. Il est aussi important de noter que la partie axiale $U(1)_A$ possède une anomalie (symétrie non respectée au niveau quantique). Concernant le sous groupe $U(1)_V$, il est responsable de la conservation du nombre baryonique.

La symétrie chirale présentée précédemment n'est exacte que dans le cas où la masse des quarks est prise nulle. Or, il est expérimentalement connu que ces masses sont faibles mais non nulles. La symétrie chirale est alors brisée explicitement dans le secteur $N_f = 2$ ce qui permet de donner une masse aux modes de Goldstone.

Symétrie d'échelle Une dernière symétrie de QCD est connue sous le nom de symétrie conforme (ou symétrie d'échelle). Elle correspond à l'invariance de la théorie par transformation conforme $x^\mu \rightarrow x'^\mu = \lambda^{-1}x^\mu$ avec $\lambda \in \mathbb{R}$. Sous cette transformation, les champs se réécrivent $\phi(x) \rightarrow \lambda^\Delta \phi(\lambda^{-1}x)$ avec Δ un exposant qui dépend de la nature du champ. Nous verrons par la suite que cette symétrie possède aussi une anomalie.

1.1.3 Fonction β de QCD

Le caractère non-perturbatif de QCD à basse énergie peut être facilement appréhendé à l'aide de l'étude de sa fonction β qui permet de comprendre l'évolution de la constante de couplage g avec l'énergie. La fonction β est généralement calculée dans le cadre d'une théorie des perturbations où les corrections à 1-boucle, 2-boucles, ... aux propagateurs et vertex sont calculées. Cette fonction peut être écrite au premier ordre (pour une théorie de jauge non-abélienne $SU(N_c)$ quelconque avec N_f saveurs)[Pol73 ; GW73]

$$\beta(g) = k \frac{\partial g}{\partial k} = - \left(\frac{11N_c}{3} - \frac{2N_f}{3} \right) \frac{g^3}{2\pi} \quad (1.10)$$

avec k une échelle typique d'énergie, N_c le nombre de couleurs et N_f le nombre de saveurs. On voit facilement que $\beta > 0$ signifie que la constante de couplage augmentera avec l'énergie. Inversement, $\beta < 0$ signifie qu'elle diminuera. Ici, il est donc possible de voir que si $N_f \leq \frac{11N_c}{2}$, $\beta < 0$ et g diminuera quand l'énergie augmentera. De même, g augmentera quand l'énergie diminuera i.e. à basse énergie la théorie devient non-perturbative. Étant donné qu'expérimentalement $N_c = 3$, pour $N_f \leq 16$ la théorie ne peut être décrite dans le cadre d'une théorie des perturbations à faible énergie. Or il est connu qu'à très haute énergie ($E \sim 200$ GeV) $N_f = 6$ et ce nombre de saveurs décroît jusqu'à $N_f = 2 - 3$ aux énergies typiques de la physique nucléaire. Ainsi, pour des énergies de l'ordre du GeV, QCD est une théorie faiblement couplée où un traitement perturbatif reste possible. À l'inverse, pour des énergies inférieures au GeV (une distance de l'ordre du fermi), QCD est une théorie fortement couplée et non-perturbative. Ce

fort couplage permet l'émergence de nombreuses structures (baryons et mésons). Ces nouvelles structures apparaissent naturellement dans le cadre de la brisure de la symétrie chirale, décrite dans la section suivante.

1.2 Théorie effective

Comme il a été présenté dans la section précédente, le caractère non-perturbatif de QCD aux énergies typiques de la physique nucléaire empêche l'utilisation d'une interaction provenant directement des degrés de liberté quarkonique et gluonique. De plus, une telle description manquerait de cohérence aux vues des ordres de grandeur en énergie qui séparent la physique des quarks de celle du noyau. Afin d'obtenir une description correcte et cohérente de l'interaction entre nucléons, il est alors nécessaire d'utiliser le cadre des théories effectives des champs. Le principe repose sur la détermination des degrés de libertés pertinents au problème à une certaine énergie donnée.

Dans l'étude de la structure nucléaire, l'énergie typique se trouvant autour du MeV, les informations sur la physique des quarks (supérieur au GeV) ne semblent, par exemple, pas pertinentes. En revanche, les degrés de liberté mésonique et baryonique (tous deux composés de quarks) semblent être de bons candidats étant donné qu'ils sont expérimentalement observés dans les gammes d'énergies de la physique nucléaire.

Afin de construire une théorie effective, les degrés de libertés choisis ne peuvent être introduits de façon aléatoire et doivent respecter des contraintes bien précises. Dans notre cas, on imposera aux degrés de liberté de respecter une structure de Lorentz en imposant la covariance de la théorie. Certaines symétries devront aussi être respectées, la plupart du temps en imposant les symétries de la théorie à haute énergie sous-jacente (ici QCD). La section suivante se propose de détailler succinctement la dérivation d'une théorie des perturbations chirales.

1.2.1 Théorie chirale

Comme précédemment introduit, la théorie effective que l'on souhaite bâtir se doit de respecter les symétries de la théorie à haute énergie. Ainsi, le point de départ de notre théorie effective sera le groupe chirale (Eq.(1.8))

$$G_{\text{chiral}} = SU(N_f)_V \times U(1)_V \times SU(N_f)_A \times U(1)_A \quad (1.11)$$

La partie axiale $U(1)_A$ de ce groupe possède une anomalie brisant la symétrie chirale vers le nouveau groupe

$$G_{\text{chiral}} \rightarrow SU(N_F)_L \times SU(N_F)_R \times U(1)_V \quad (1.12)$$

La partie vectorielle (diagonale) $U(1)_V$ de ce groupe est responsable, quant à elle, de la conservation du nombre baryonique et sera discutée plus loin.

Cependant, un autre argument provenant à la fois de l'expérience et de considérations théoriques donne une valeur moyenne non nulle au condensat de quark i.e.

$$\langle \bar{\psi}_{-,i} \psi_{+,j} \rangle = -\sigma \delta_{ij} \quad (1.13)$$

avec σ une constante quelconque. Or si l'on applique à présent les transformations du groupe chirale Eq.(1.12) (voir Eq.(1.6-1.7)) on obtient

$$\langle \bar{\psi}_{-,i} \psi_{+,j} \rangle \rightarrow -\sigma (L^\dagger R)_{ij} \neq -\sigma \delta_{ij} \quad (1.14)$$

et ce groupe est donc spontanément brisé. En effet l'état fondamental n'est pas invariant sous les symétries du Lagrangien sauf si $(L^\dagger R)_{ij} = 1$ et donc $L = R$ i.e. la partie diagonale (vectorielle) du groupe $SU(N_F)_L \times SU(N_F)_R$. Nous pouvons donc écrire

$$SU(N_F)_L \times SU(N_F)_R \rightarrow SU(N_f)_V \quad (1.15)$$

qui correspond à la brisure de symétrie chirale dans le langage de la théorie des groupes. On peut montrer que, dans le vide, ce condensat chirale (1.13) prend une valeur de $\langle \bar{q}q \rangle \approx (225 \pm 25 \text{MeV})^3$ [GL84] dans le cas où seuls les quarks up et down sont considérés et où $\bar{q}q = \frac{1}{2}(\bar{u}u + \bar{d}d)$.

En résumé, la brisure spontanée de la symétrie chirale entraîne l'apparition de $N_f^2 - 1$ modes de Goldstone³. Ces modes, censément de masses nulles, acquièrent de fait une masse à cause de la brisure explicite de la symétrie chirale liée aux masses non nulles des quarks. De plus, les masses des quarks étant différentes, les bosons de Goldstone posséderont des masses différentes.

L'étape suivante consiste à paramétrer les modes de Goldstone correspondant à cette brisure de symétrie, souvent noté

$$U(x) = \exp\left(\frac{2i}{f_\pi} \pi(x)\right) \quad (1.16)$$

avec $\pi(x) = \pi^a(x) T^a$ un champ bosonique nommé champ de pions. À partir de ces observations, il est alors possible de construire un Lagrangien chirale à partir duquel une théorie des perturbations peut être dérivée. Ce Lagrangien prend la forme générique

$$\mathcal{L}_{\chi EFT} = \mathcal{L}_N + \mathcal{L}_\pi + \mathcal{L}_{N\pi} \quad (1.17)$$

où le premier terme décrit l'évolution des quantités fermioniques, le second celles des quantités mésoniques (ici le π) et finalement le dernier terme décrit le couplage entre nos degrés de libertés mésoniques et fermioniques. Ce dernier est introduit en couplant directement les fermions au courant pionique. Au second ordre, il est possible d'écrire [Wei68]

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{\chi EFT} = \bar{\psi} (i\gamma^\mu \partial_\mu - M) \psi + \frac{f_\pi^2}{4} \left[\frac{1}{2} \partial_\mu U \partial^\mu U + (U + U^\dagger) m_\pi^2 \right] \\ + \bar{\psi} \left[i\gamma^\mu D_\mu - M_N + \frac{g_A}{2} \gamma^\mu \gamma_5 u_\mu \right] \psi \end{aligned} \quad (1.18)$$

3. Pour $N_f = 2$ (quarks up et down seulement) les trois modes de Goldstone sont associés aux pions $\{\pi^0, \pi^\pm\}$. Pour $N_f = 3$, les kaons K (qui possèdent une charge étrange $s \neq 1$) ainsi que le méson η sont introduits et expérimentalement observés. Pour $N_f > 3$, des mésons charmés et bottom font aussi leur apparition. Seuls les mésons possédant une charge top n'ont pas été observés et n'existent peut-être pas à cause du temps de vie court du quark top [Fab98].

où $U = u^2 = \exp\left(\frac{2i}{f_\pi}\pi(x)\right)$ et le courant axial prend la forme $u_\mu = i(u^\dagger\partial_\mu u - u\partial_\mu u^\dagger)$. La dérivée covariante s'écrit

$$D_\mu\psi = \partial_\mu\psi + [\Gamma_\mu, \psi] \quad (1.19)$$

$$\Gamma_\mu = \frac{1}{2}(u^\dagger\partial_\mu u + u\partial_\mu u^\dagger) \quad (1.20)$$

Différentes constantes de couplages (f_π la constante de désintégration du pion et g_A la constante de couplage axiale-vecteur) ont été introduites ainsi qu'une masse pour les pions (m_π) et les fermions (M_N). Ces constantes peuvent être déduites des expériences ou bien réajustées suivant les besoins du modèle.

L'interaction entre nucléons peut alors être comprise en termes d'échanges d'un ou plusieurs pions. Il est possible de montrer que le diagramme correspondant à l'échange d'un pion unique est en grande partie responsable de l'interaction longue portée entre les nucléons ($d \gtrsim 2$ fm). Les échanges de deux pions encodent quant à eux la partie moyenne portée, et les échanges de trois pions et plus permettent de comprendre l'interaction très courte portée (le cœur dur). Nous reviendrons sur ces considérations dans les sections suivantes, en particulier en introduisant l'approximation OBE (one boson exchange).

1.2.2 Extensions

Nous venons de voir que la théorie des perturbations chirales était construite sur le résultat de la brisure spontanée du groupe chiral. Il est alors possible d'aller plus loin en utilisant l'idée, courante en physique, de briser des symétries pour intégrer de nouveaux degrés de libertés mésonique au problème.

Anomalie d'échelle

L'idée a été introduite par [Ell70; Cre70], et remise au goût du jour plus récemment [CT15], de considérer la symétrie d'échelle (symétrie conforme) et sa brisure comme un moyen d'introduire un nouveau mode de Goldstone. Il s'avère que cette symétrie conforme souffre aussi d'une anomalie (elle est aussi explicitement brisée en présence de quarks massifs). Un moyen simple de comprendre cette brisure de symétrie revient à écrire la trace du tenseur-énergie impulsion (où l'on omet la partie dépendante de la masse des quarks)

$$\theta_\mu^\mu = \frac{\beta(\alpha_s)}{4\alpha_s} G_{\mu\nu}^a G^{a\mu\nu} \quad (1.21)$$

qui est non nulle. Ainsi, la symétrie conforme est explicitement brisée par cette anomalie. Mais une brisure explicite ne permet pas d'expliquer la présence d'un nouveau mode de Goldstone. Il faut donc commencer par essayer de restaurer cette symétrie conforme en cherchant les points fixes de la théorie où la fonction β s'annule. Il est possible de supposer l'existence d'un point fixe à basse énergie, α_{IR} tel que $\beta(\alpha_{IR}) = 0$. La théorie basse énergie irait donc naturellement vers ce point fixe et la symétrie conforme serait restaurée. Cependant, à cause du condensat de quarks qui se crée dans le vide $\langle\bar{q}q\rangle_{\text{vac}} \neq 0$ (à basse énergie), la symétrie conforme est spontanément brisée (création d'une échelle typique d'énergie au niveau quantique). Cette brisure spontanée entraîne

l'apparition d'un nouveau mode de Goldstone : le méson σ . Expérimentalement, ce méson pourrait être interprété comme la résonance $f_0(500)$ [CCL06 ; AAS18] de masse $m_{f_0} \sim 500$ MeV mais possédant une largeur particulièrement grande $\Gamma \approx 400 - 700$ MeV. Dans ce cadre théorique, le méson σ obtient sa masse grâce à la brisure explicite de la symétrie conforme liée à la masse finie des quarks.

L'avantage de ce point de vue est qu'avec le seul condensat de quarks $\langle \bar{q}q \rangle_{\text{vac}}$ il est possible d'expliquer à la fois la brisure spontanée de la symétrie chirale et la brisure spontanée de la symétrie conforme. Il est alors possible de construire une théorie cohérente prenant en compte les degrés pseudo-scalaires (π) et le degré scalaire (σ). Pour plus de détails sur la construction du Lagrangien associé, des modifications à apporter à la théorie des perturbations chirale, etc. (voir par exemple [CT15 ; LPR15]).

Symétrie locale cachée

La brisure de la symétrie chirale ainsi que la brisure de la symétrie conforme permettent d'obtenir des bosons de Goldstone (qui sont donc scalaire ou pseudo-scalaire). Or, dans la suite, il sera nécessaire de faire appel à des bosons vecteurs qui ne peuvent être introduits à l'aide d'un mécanisme de brisure spontanée de symétrie.

L'introduction de bosons vecteurs peut aussi se justifier afin d'expliquer la forme de l'amplitude de l'onde P lors d'une diffusion $\pi\pi$. Alors que les contributions en arbre et à une boucle permettent de bien reproduire les résultats expérimentaux, ces derniers diffèrent largement de la théorie au-delà d'une centaine de MeV [HY03]. Cette différence peut bien sûr être comprise en supposant que la physique à haute énergie est dominée par les boucles d'ordres supérieurs qui deviennent très compliquées à calculer. Nous verrons par la suite que c'est exactement pour cette raison que l'on souhaite introduire des mésons vecteurs dans notre théorie, c'est-à-dire pour éviter à avoir à calculer des ordres élevés dans la théorie des perturbations chirales.

Pour essayer d'introduire ces degrés de libertés vectoriels, une approche appelée HLS (pour Hidden Local Symmetry) a vu le jour [Ban+85 ; Fuj+85 ; BKY88]. L'idée de cette approche est d'introduire des bosons vecteurs comme champ de jauge (de la même façon que les bosons de jauge sont introduits), c'est-à-dire de jauger une symétrie. Dans notre cas précis, le groupe de symétrie de notre théorie est choisi comme étant

$$G_{\text{global}} \times H_{\text{local}} = [U(N_F)_L \times SU(N_F)_R]_{\text{global}} \times [SU(N_f)_V]_{\text{local}} \quad (1.22)$$

où H_{local} représente le groupe local caché. Ce groupe est alors spontanément brisé vers le groupe local.

Pour comprendre comment le groupe de jauge local apparaît, nous pouvons écrire notre champ chirale comme le produit d'une composante droite et gauche

$$U(x) = \xi_L^\dagger(x) \xi_R(x) \quad (1.23)$$

Cependant, ces champs étant locaux, la définition de notre champ chirale U est ambiguë (il existe une redondance dans cette définition). Pour lever cette ambiguïté, il est suffisant de demander aux champs de se transformer comme

$$\xi_{L,R}(x) \rightarrow \xi'_{L,R}(x) = h(x) \xi_{L,R}(x) g_{L,R}^\dagger \quad (1.24)$$

avec $h \in H_{\text{local}}$ et $g \in G_{\text{global}}$. Il suffit alors d'imposer l'invariance de jauge (i.e. de considérer la redondance comme une symétrie de jauge) sous le groupe local. Ainsi, on obtient les bosons vecteurs de jauge V_μ , appelés, dans ce contexte, les bosons de jauge de la symétrie cachée locale. Ces mésons peuvent être associés aux résonances expérimentales ω, ρ, \dots

Des détails sur cette approche peuvent être trouvés dans le papier de revue [HY03]. Cette approche est très souvent couplée à la brisure de l'invariance d'échelle présentée dans la section précédente donnant lieu à une théorie dite bsHLS où les baryons (b) sont introduits comme des excitations solitoniques (des skyrmions).

1.2.3 Résumé

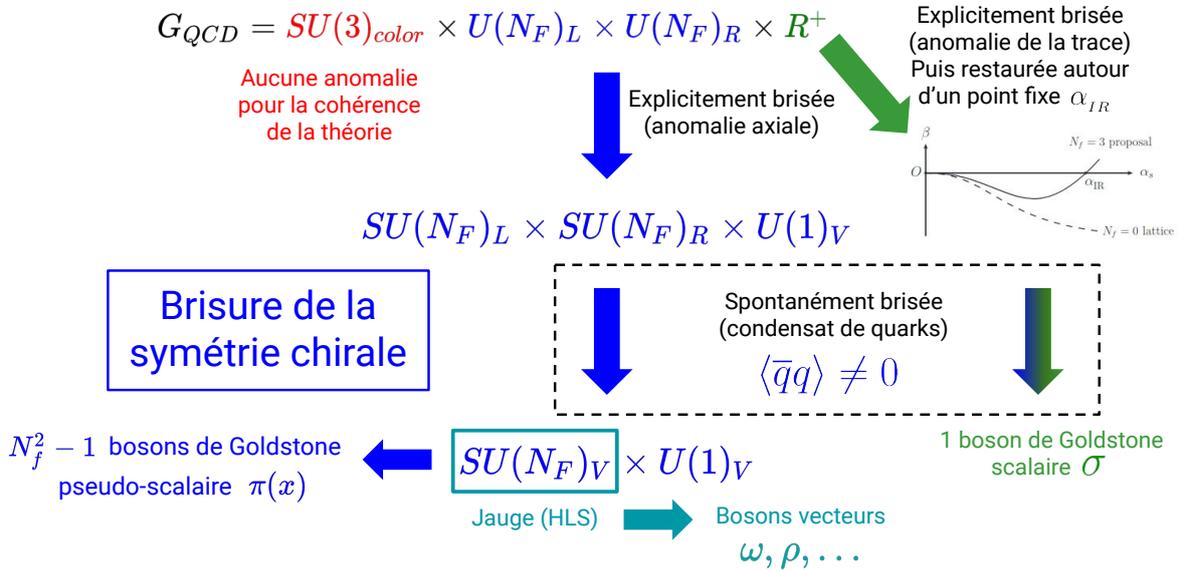


FIGURE 1.1 – Schéma représentant les différentes brisures de symétries des groupes de QCD. La figure représentant la fonction β est prise de [CT15]. Les détails sont donnés dans la Sec.1.2

Pour résumer, la Fig.1.1 représente les différents groupes de symétries, leurs brisures et les degrés de liberté associés. Il est intéressant de remarquer que la brisure de la symétrie chirale est responsable de l'apparition de deux degrés de liberté, comme mentionné précédemment : les champs pseudo-scalaires de pions et le champ scalaire σ . Les degrés de liberté mésoniques vectoriels peuvent quant à eux être introduits en utilisant les symétries locales cachées qui jaugent (en partie) la symétrie chirale.

Finalement, les degrés de liberté baryoniques sont plus complexes à faire apparaître. Il a été mentionné ci-dessus que le sous-groupe $U(1)_V$ était responsable de la conservation du nombre baryonique. Il est important de noter que les mésons sont neutres sous ce groupe $U(1)_V$ ⁴. Cependant, il est possible de créer des quantités qui possèdent une

4. En effet, par construction les mésons sont des condensats de quarks de la forme $\bar{\psi}\psi$ qui ne

charge sous ce groupe comme

$$\epsilon_{c_1 c_2 \dots c_{N_c}} \psi^{c_1} \psi^{c_2} \dots \psi^{c_{N_c}}. \quad (1.25)$$

qui représente une quantité baryonique. Les baryons sont donc des fermions portant une charge N_c sous le groupe $U(1)_V$ ⁵. Ainsi, des degrés de liberté baryoniques peuvent être introduits par de purs arguments de symétrie. Cependant, leur description rigoureuse requiert une étude bien plus approfondie allant au-delà du cadre de cette thèse. Il a été montré que les baryons peuvent être décrits comme des excitations de solitons (appelés skyrmions) du vide de QCD [Sky62; ZB86].

La description des différents degrés de liberté mésoniques et baryoniques peut aussi être entreprise à l'aide de l'approche non perturbative de QCD sur réseau. Cette méthode de discrétisation de l'espace-temps introduit naturellement une énergie seuil (correspondant à l'inverse de la taille d'une maille du réseau) permettant de régulariser la théorie à basse énergie. La QCD sur réseau a permis de décrire de façon satisfaisante les structures mésoniques et baryoniques mais reste extrêmement coûteuse à utiliser pour des calculs plus complexes. Voir par exemple [Bea+11] pour une revue des applications en physique nucléaire.

1.3 Approche phénoménologique

Il a été montré précédemment que l'interaction entre nucléons peut être interprétée en termes d'échanges de pions. Cependant, cette façon de procéder, bien qu'ayant menée à de très bons résultats [Nav+07; Hag+08; Sam+15; HK17], reste difficile à mettre en œuvre et nécessite la prise en compte de plus en plus d'échanges de pions pour décrire la partie à courte portée. Ainsi, le formalisme s'en trouve rapidement complexifié et des difficultés numériques apparaissent lors du calcul des ordres élevés.

Afin de palier ce problème, nous avons vu précédemment qu'il était possible d'introduire de nouveaux degrés de liberté en brisant la symétrie conforme ou en jaugeant une partie de la symétrie chirale. De nombreuses études (voir par exemple [HY03] pour un aperçu des travaux) s'intéressent aujourd'hui à ces approches, mais des applications concrètes en physique nucléaire sont encore manquantes⁶. Néanmoins, le cadre de la théorie bsHLS semble donner des résultats encourageants quant à la justification de l'introduction des degrés de libertés mésonique. Dans la suite de cette section, on se propose donc d'utiliser l'approximation OBE (One Boson Exchange) qui permet de simplifier le problème.

1.3.1 Approximation OBE

Une manière plus effective de décrire l'interaction nucléaire revient à introduire ces nouveaux degrés de liberté mésoniques de façon ad hoc afin de "mimer" le comporte-

possèdent donc pas de charge sous ce groupe

5. Cette charge est généralement renormalisée à 1 en prenant des charges fractionnaires pour les quarks.

6. Certaines études commencent à montrer des résultats encourageant comme [Pae+17] pour la description de la saturation nucléaire dans le formalisme bsHLS.

ment des échanges de plusieurs pions en un échange d'un autre boson (effectif). Cette approximation porte souvent le nom d'OBE (One Boson Exchange), dont une représentation graphique est donnée dans la Fig.1.2. Cette méthode permet de simplifier

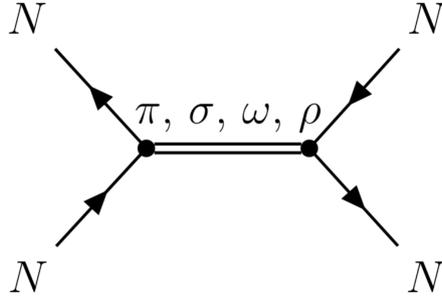


FIGURE 1.2 – Représentation de l'interaction entre nucléons dans l'approximation OBE.

considérablement le Lagrangien chiral en supprimant les couplages non linéaires liés à l'échange de plusieurs pions. En contre-partie, il est nécessaire d'ajouter au Lagrangien des termes mésoniques supplémentaires ainsi que des couplages de ces mésons avec les nucléons qui devront être ajustés aux données expérimentales.

1.3.2 Contraintes expérimentales

L'approximation OBE peut être mise en place de différentes façons suivant le système que l'on souhaite étudier. Pour les systèmes nucléaires, le choix des degrés de liberté effectifs peut être guidé par l'expérience qui amène plusieurs contraintes. Au premier ordre, les propriétés de l'interaction nucléon-nucléon que l'on souhaite retrouver sont les suivantes

- une interaction répulsive de courte portée (cœur dur)
- une interaction attractive de longue portée
- une interaction qui dépend de la nature du nucléon
- une interaction répulsive entre protons (interaction électromagnétique)

Ces propriétés de l'interaction nucléaire permettent de choisir au mieux les degrés de liberté les plus à même de décrire de façon satisfaisante cette interaction. Par exemple, dans le cas d'une interaction par échange de mésons, le caractère répulsif ou attractif est directement lié à la nature des mésons (scalaire, vecteur, isoscalaire, ...). La portée est quant à elle principalement reliée à la masse des degrés de liberté. Il est alors possible de repenser le potentiel nucléon-nucléon comme décrit sur la figure 1.3.

1.3.3 Interaction par échange de mésons

Dans le formalisme relativiste, la structure de Lorentz impose un nombre restreint (< 10 dans le cas $N_f = 2$) de degrés de liberté mésonique possible⁷. Ces mésons peuvent être des scalaires ou des vecteurs de Lorentz, posséder ou non une dépendance en isospin et posséder ou non une structure chirale particulière. Afin d'introduire les interactions

⁷. Cependant il est toujours possible d'ajouter de nouveaux termes au Lagrangien en prenant en compte des dérivées d'ordre supérieur, voir par exemple le Chapitre 4

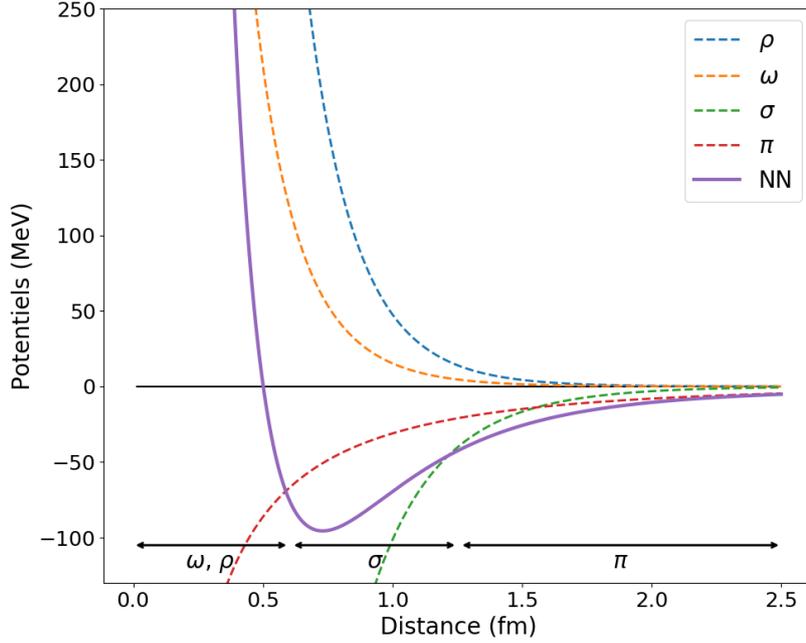


FIGURE 1.3 – Représentation des différentes contributions mésoniques au potentiel central de l’interaction nucléon-nucléon (traits pointillés). Le potentiel nucléon-nucléon final est présenté en trait plein.

de ces degrés de liberté mésoniques avec les nucléons, il suffit de construire les différentes formes bilinéaires préservant la structure de Lorentz

$$\bar{\psi}\Gamma\mathcal{O}_\tau\psi \quad (1.26)$$

où $\Gamma \in \{1, \gamma_\mu, \gamma_5, \gamma_\mu\gamma_5, \sigma_{\mu\nu}\}$ respectivement scalaire, vecteur, pseudoscalaire, pseudovecteur et tenseur. De même $\mathcal{O}_\tau \in \{1, \tau_3\}$ correspondant à des degrés de liberté isoscalaires ou isovecteurs.

Afin de choisir ces degrés de libertés, il est possible d’associer à chacun de ces types un comportement attractif ou répulsif de l’interaction engendrée. Par exemple, un degré de liberté scalaire-isoscalaire est attractif, un vecteur-isoscalaire est répulsif, etc. En analysant les différents degrés de liberté, il est possible de trouver un set de mésons adéquat permettant une description simple des propriétés de l’interaction nucléaire. Ces degrés de liberté sont (en utilisant la notation (J^π, T)) :

- scalaire-isoscalaire $(0^+, 0)$, σ
- pseudoscalaire-isoscalaire $(0^-, 1)$, π
- vecteur-isoscalaire $(1^-, 0)$, ω^μ
- vecteur-isovecteur $(1^-, 1)$, $\vec{\rho}^\mu$
- potentiel électromagnétique, A^μ

Les contributions de ces différents degrés de liberté au potentiel nucléon-nucléon final sont représentées sur la Fig.1.3. Le caractère répulsif ou attractif provient directement de la nature du méson (de ces nombres quantiques (J^π, T)) alors que la portée est principalement fonction de la masse des mésons. Dans la suite de ce travail de thèse, les contributions du méson π ne seront pas prises en compte, i.e. ce méson ne sera pas

présent dans notre théorie. En effet, la plupart des résultats présentés dans cette thèse (voir chapitres 4 et 5) traitent des systèmes où la parité n'est pas brisée. Or, dans les schémas d'approximation mis en place dans le chapitre suivant (voir Chap.2), le pion brise la parité. Ainsi, dans la suite, nous considérons que les effets du méson π seront majoritairement (et implicitement) pris en compte lors du processus d'ajustement.

À partir de ces éléments, il est alors possible de construire un Lagrangien phénoménologique de la forme

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_N + \mathcal{L}_{\text{mes}} + \mathcal{L}_{\text{int}} \quad (1.27)$$

avec \mathcal{L}_N et \mathcal{L}_{mes} les parties propagations des nucléons et mésons respectivement et \mathcal{L}_{int} la partie interaction. Dans notre cas précis où les mésons σ , ω et ρ sont pris en compte, ainsi que le champ électromagnétique A , la densité Lagrangienne prend la forme

$$\begin{aligned} \mathcal{L} = & \bar{\psi} \left[i\gamma^\mu \partial_\mu - M - g_\sigma \sigma - g_\omega \gamma^\mu \omega_\mu - g_\rho \gamma^\mu \vec{\rho}_\mu \cdot \vec{\tau} - e\gamma_\mu A^\mu \frac{1 - \tau_3}{2} \right] \psi \\ & + \frac{1}{2} (\partial_\mu \sigma \partial^\mu \sigma - m_\sigma^2 \sigma^2) - \frac{1}{4} (\Omega_{\mu\nu} \Omega^{\mu\nu} - 2m_\omega^2 \omega_\mu \omega^\mu) - \frac{1}{4} (\vec{\mathcal{R}}_{\mu\nu} \cdot \vec{\mathcal{R}}^{\mu\nu} - 2m_\rho^2 \vec{\rho}_\mu \cdot \vec{\rho}^\mu) \\ & - \frac{1}{4} \mathcal{F}_{\mu\nu} \mathcal{F}^{\mu\nu} \end{aligned} \quad (1.28)$$

où la première ligne décrit la partie de propagation fermionique ainsi que les interactions et les deux suivantes la partie propagation des mésons. Plus précisément, les tenseurs mésoniques et électromagnétiques associés aux différents champs s'écrivent

$$\mathcal{F}_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu \quad (1.29)$$

$$\Omega_{\mu\nu} = \partial_\mu \omega_\nu - \partial_\nu \omega_\mu \quad (1.30)$$

$$\vec{\mathcal{R}}_{\mu\nu} = \partial_\mu \vec{\rho}_\nu - \partial_\nu \vec{\rho}_\mu \quad (1.31)$$

Ainsi écrit, ce Lagrangien sert de point de départ pour dériver les différentes équations du mouvement associées aux degrés de liberté fermionique et mésonique. Ces équations, ainsi que les différentes approximations mises en œuvre, sont présentées dans le chapitre 2 suivant. Nous verrons dans le chapitre 4 qu'il est possible d'ajouter des termes supplémentaires faisant intervenir des dérivées des champs mésoniques ($\sigma^{\mu\nu} \partial_\mu \omega_\nu$ par exemple).

1.3.4 Interaction de portée nulle

Il est aussi possible de décrire l'interaction nucléaire à l'aide d'une interaction de portée nulle au lieu d'échanges de mésons. Dans ce cas, les termes apparaissant dans le Lagrangien seront juste des termes de la forme $(\bar{\psi} \Gamma \mathcal{O}_\tau \psi)^2$. En considérant les mêmes degrés de liberté que précédemment, la partie interaction du Lagrangien d'une théorie avec une interaction de portée nulle s'écrit

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{\text{int}} = & -\frac{1}{2} \alpha_S (\bar{\psi} \psi) (\bar{\psi} \psi) - \frac{1}{2} \alpha_V (\bar{\psi} \gamma_\mu \psi) (\bar{\psi} \gamma^\mu \psi) \\ & - \frac{1}{2} \alpha_{TV} (\bar{\psi} \gamma_\mu \vec{\tau} \psi) (\bar{\psi} \gamma^\mu \vec{\tau} \psi) - e \bar{\psi} \gamma_\mu A^\mu \frac{1 - \tau_3}{2} \psi. \end{aligned} \quad (1.32)$$

Un dernier terme d'interaction contenant une dérivée est généralement ajouté et prend la forme[NVR08]

$$\mathcal{L}_{\text{int}}^{\partial} = -\frac{1}{2}\delta_S (\partial_{\mu}\bar{\psi}\psi) (\partial^{\mu}\bar{\psi}\psi). \quad (1.33)$$

Ce terme permet de tenir compte des effets principaux des interactions à portée finie qui sont cruciales pour une description quantitative de la distribution de la densité nucléaire. L'inclusion de termes dérivatifs dans d'autres canaux est possible mais ne permet généralement pas d'améliorer l'accord théorie-expérience (voir par exemple [NVR08] pour une discussion détaillée).

L'avantage certain de cette formulation est de ne plus faire appel à des degrés de liberté mésoniques dont les propagateurs doivent être recalculés à chaque itération. Ainsi, les fonctionnelles de portée nulle permettent de réduire légèrement les temps de calcul (de l'ordre d'une dizaine de pourcents).

1.3.5 Introduction aux approches de champ moyen généralisé

Jusqu'à présent, seuls des degrés de liberté nucléoniques et mésoniques ont été considérés. Cependant, il est possible d'introduire des degrés de liberté supplémentaires correspondant directement à des noyaux (Deuteron, Helium, ...). En effet, nous verrons par la suite que le phénomène de clusterisation (cf Chap.3) est un phénomène important et naturel dans les systèmes nucléaires. Il peut donc être particulièrement pertinent de considérer ces clusters (souvent de faible taille) comme des degrés de liberté à part entière.

Le traitement de ces degrés de liberté ne diffère que très légèrement du traitement effectué précédemment dans le cadre d'une théorie par échange de mésons. Dans la suite, on suit la méthode introduite par Typel et al.[Typ+10]. Au lieu de ne traiter que les degrés nucléoniques et mésoniques, on introduit explicitement des champs représentant différents types de cluster. Leur nature (fermionique/bosonique et scalaire/vectorel) sera directement liée à leur structure. Les clusters interagiront de façon identique avec les mésons σ , ω et ρ avec une constante de couplage ne dépendant que du nombre de nucléons (et leur nature) présent dans le cluster. Cependant, afin de traiter les interactions entre ces degrés de liberté de cluster avec le milieu, une dépendance est introduite dans leurs masses effectives M_i . Pour un cluster possédant N_i neutrons et Z_i protons, la masse dans le vide des clusters prend alors la forme suivante

$$m_i = N_i m_N + Z_i m_P - B_i^0 \quad (1.34)$$

avec B_i^0 l'énergie de liaison du cluster dans le vide. Pour tenir compte de l'évolution de cette énergie de liaison dans le milieu, une correction

$$B_i = B_i^0 + \Delta B_i \quad (1.35)$$

appelée décalage de l'énergie de liaison est introduite⁸. Le calcul de ces décalages peut être effectué dans le cadre d'une théorie des perturbations ou bien être choisi empiriquement [Typ+10]. Écrit sous cette forme (Eq.(1.35)), il est alors possible que $B_i < 0$ auquel cas le cluster se dissout et sa densité devient nulle.

8. De nombreuses corrections peuvent être ajoutées ici, voir[Typ+10] pour plus d'informations.

Ainsi, la contribution d'un cluster fermionique (f) possédant Z_f protons et N_f neutrons et de masse m_f prendra la forme d'un Lagrangien de Dirac (on ne considère ici que des fermions de spin 1/2)

$$\mathcal{L}_f^{1/2} = \bar{\psi}_f (\gamma_\mu i D_f^\mu - M_f) \psi_f \quad (1.36)$$

Ces clusters fermioniques représentent typiquement des clusters de tritium (^3H) ou bien d'hélium (^3He). Un cluster de nature bosonique (b) pourra quant à lui être soit de spin 0 comme dans le cas d'un cluster α (^4He) ou bien de spin 1 comme dans le cas du deutéron (^2H). Leurs contributions prendront alors la forme suivante

$$\mathcal{L}_b^0 = \frac{1}{2} (i D_b^\mu \varphi_b)^\star (i D_{b,\mu} \varphi_b) - \frac{1}{2} \varphi_b^\star M_b^\star \varphi_b \quad (1.37)$$

$$\mathcal{L}_b^1 = \frac{1}{4} \left(i D_b^{[\mu} \varphi_b^{\nu]} \right)^\star (i D_{b,[\mu} \varphi_{b,\nu]}) - \frac{1}{2} \varphi_b^{\mu\star} M_b^\star \varphi_{b,\mu} \quad (1.38)$$

où $i D_b^{[\mu} \varphi_b^{\nu]} = i D_b^\mu \varphi_b^\nu - i D_b^\nu \varphi_b^\mu$ représente l'anti-symétrisation par rapport aux indices entre crochets. Les dérivées covariantes dans les cas fermioniques et bosoniques sont données par

$$i D_i^\mu = i \partial^\mu - g_\omega A_i \omega^\mu - g_\rho |N_i - Z_i| \vec{\rho}^\mu \cdot \vec{\tau} \quad (1.39)$$

où g_ω et g_ρ représentent les constantes de couplage. Les masses effectives M_i font intervenir le méson σ ainsi que les décalages ΔB_i

$$M_i = m_i - g_\sigma A_i \sigma - \Delta B_i \quad (1.40)$$

où m_i est définie dans Eq.(1.40). Les résultats de ce type d'approche sont discutés dans les chapitres suivants.

Finalement, il est intéressant de questionner la nécessité de l'introduction de ces degrés de liberté supplémentaires : sont-ils nécessaires à la description de nouveaux phénomènes physiques inaccessibles avec les nucléons comme seuls degrés de libertés ? Augmentent-ils le caractère phénoménologique de cette description ? Une réponse à la première question semble extrêmement prématurée et nécessitera de nombreuses nouvelles études pour pouvoir statuer. La seconde question en revanche reste très subjective quant à la définition du caractère phénoménologique d'une théorie. Nous avons vu précédemment que la première étape d'une théorie effective revenait à correctement identifier les degrés de liberté pertinents au problème. Il semble donc tout à fait pertinent d'introduire directement des degrés de liberté de cluster si ces derniers permettent de mieux comprendre et décrire certaines propriétés du noyau atomique ou certains phénomènes y prenant place.

1.4 Interaction forte dans le milieu

À ce stade, il est important de rappeler que l'on cherche à développer une interaction entre nucléons afin de décrire un système qui en comporte plus de deux : le noyau (ou la matière nucléaire). Or, dans un tel système, l'ensemble des nucléons présents forment ainsi un problème à N-corps quantique. Ce problème s'avère extrêmement complexe à résoudre exactement (voire totalement hors d'atteinte) pour plusieurs raisons :

- le caractère composite des nucléons en termes de quarks et gluons entraîne l’apparition d’interaction à plus de deux corps. Or la description des interactions entre tous les degrés de liberté du système (interaction à 2, 3, ..., N corps) reste irréalisable aux vues du coût numérique (et de stockage) exponentiel des interactions à plus de deux corps⁹. Une stratégie possible revient alors à comprendre les effets du milieu sur l’interaction nucléon-nucléon nue afin de les prendre en compte de manière plus ou moins effective (en particulier en négligeant les interactions à plus de deux corps).
- même dans le cas où seulement des interactions à 1 et 2-corps sont présentes, la résolution du problème à N-corps (qu’il soit quantique ou non) reste excessivement complexe numériquement à partir du moment où le nombre de constituants du système devient élevé. Certaines stratégies sont décrites dans le prochain chapitre, Chap.2.
- l’interaction nue à deux corps n’est généralement pas suffisante pour décrire la physique du noyau. Pire, elle conduit très souvent à des incohérences des modèles liées au cœur dur de l’interaction qui introduit une composante très répulsive à courte distance.

Concernant le premier point cité ci-dessus, il est cependant intéressant de remarquer qu’une certaine hiérarchie existe entre les contributions des potentiels à N-corps¹⁰. En particulier, pour n’importe quelle observable \mathcal{O} , il est possible d’écrire que, pour chaque contribution à i-corps, $\langle O_{i\text{-corps}} \rangle \gg \langle O_{i+1\text{-corps}} \rangle$. Ce résultat permet généralement de négliger les interactions à 4-corps et plus. Les interactions à trois corps restent cependant très souvent non négligeables ($\sim 10\%$ de l’interaction) et des techniques doivent être mises en place pour les traiter (voir par exemple [Her20] pour une discussion détaillée).

Le troisième point énoncé ci-dessus peut être traité de différentes façons en renormalisant directement l’interaction à deux corps. Différentes approches ont été développées (théorie de Brueckner, SRG, ...) afin d’adoucir le cœur dur de l’interaction pour rendre le traitement du problème à N-corps possible à partir d’une interaction nucléon-nucléon nue. Cette approche n’est cependant pas celle qui a été suivie dans les travaux présentés ici.

Le traitement des différents problèmes énoncés ci-dessus requiert généralement une puissance de calcul importante, empêchant très souvent le développement de calculs systématiques. Afin de prendre en compte les effets du milieu, on se propose dans la suite de décrire succinctement comment la dépendance en densité de nos observables apparaît naturellement en étudiant l’évolution du condensat chirale à densité finie. Il est important de rappeler qu’introduire une dépendance en densité permet, à moindre coût, de prendre en compte les différentes corrélations discutées précédemment. Il s’agit d’une méthode effective parmi d’autres. Cette approche est discutée à la fin de cette section.

9. Un calcul grossier montre que le coût de stockage d’un potentiel à A corps serait de $\sim N^{2A}$ où N représente le nombre d’états de base. Dans les bases typiquement utilisées dans les travaux présentés ici, $N \sim 500 - 1000$ où on comprend que les termes à plus de deux corps ne peuvent pas être pris en compte. La prise en compte d’interaction à trois corps reste entreprenable dans le cas de petites bases.

10. Une telle hiérarchie n’est cependant pas présente dans toutes les théories. Un couplage faible de la théorie est généralement nécessaire ce qui permet d’effectuer une théorie des perturbations où les termes à N-corps apparaissent progressivement avec les ordres de perturbations.

1.4.1 Condensat chirale à densité finie

Nous avons vu au début de ce chapitre que certains mésons peuvent être compris en termes de condensats chiraux de la forme $\langle \bar{q}q \rangle$ qui prennent des valeurs non nulles pour des énergies faibles ($\lesssim 1$ GeV), c'est-à-dire ces condensats chiraux sont interprétés comme le paramètre d'ordre de la brisure de symétrie chirale. Il est alors possible de montrer qu'à densité finie (et/ou température finie) [PF08], la valeur de ce condensat diminue, menant à une restauration partielle de la symétrie chirale. Or, c'est bien la brisure de la symétrie chirale qui donne une masse aux différents degrés de liberté de notre modèle. Ainsi, à densité finie, une diminution des masses des différents degrés de liberté devrait être observée.

Formellement, il est possible d'utiliser le théorème d'Hellman-Feynman [Güt32; Hel37; Fey39] pour écrire [CFG92; Fuc04; PF08]

$$\langle \bar{q}q \rangle_\rho = \langle \bar{q}q \rangle_0 + \frac{1}{2} \sum_h \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial h} \frac{\partial m_h}{\partial m_q} \quad (1.41)$$

avec \mathcal{E} la densité d'énergie de la matière nucléaire et h les différents degrés de liberté hadroniques de masses m_q . On peut alors réécrire [PF08] (des hypothèses concernant la dépendance en masse des paramètres du modèle sont introduites à cette étape)

$$\frac{\langle \bar{q}q \rangle_\rho}{\langle \bar{q}q \rangle_0} = 1 - \frac{\rho}{\rho^\chi} \left[1 + \frac{\partial (E/A)}{\partial M} + \frac{\partial (E/A)}{m_\pi} \frac{m_\pi}{2\sigma_M} \right] \quad (1.42)$$

avec ρ^χ et σ_M deux constantes positives et M la masse des degrés de liberté baryoniques. Ces quantités peuvent alors être calculées dans le cadre de certaines approximations (Hartree-Fock, Brueckner-Hartree-Fock, ...) et montrent une décroissance de la valeur du condensat chirale avec la densité baryonique ρ ¹¹.

La dépendance du condensat chirale avec la densité, bien que majoritairement qualitative, est une information importante qui nous permet de comprendre l'importance de la densité ρ dans le développement d'une interaction. Des méthodes ont été développées afin de prendre en compte les effets du milieu de manière quantitative. Dans la suite, on se propose de se concentrer sur la méthode qui a été utilisée dans les travaux de cette thèse.

1.4.2 Dépendance en densité phénoménologique

Nous venons de voir que l'interaction nucléon-nucléon est rendu bien plus complexe en présence d'un milieu. En particulier, nous avons vu que la présence d'un milieu modifie le condensat chirale qui modifie à son tour les propriétés des mésons et baryons de notre système. Les méthodes permettant de prendre explicitement ces corrections en compte restent cependant très coûteuses et une simplification est souvent nécessaire. Les résultats concernant les condensats de quarks dans des modèles d'échange de mésons (type OBE) semblent montrer l'importance de la densité dans les constantes de couplage

11. Une incertitude importante persiste dans ce type de calculs à cause de la dépendance en masse des paramètres du modèle qui reste mal connue [PF08]. En conclusion, QCD peut permettre de contraindre ces dépendances, mais un lien direct entre QCD et la partie hadronique à densité finie reste à faire.

et dans les masses du système. Ainsi, afin de prendre en compte facilement ces résultats, une dépendance phénoménologique en densité est introduite dans toutes les constantes de couplage de notre modèle.

Deux exemples sont donnés dans les sections suivantes, mais de nombreuses autres possibilités existent. Voir par exemple [Dut+14] pour une revue des différentes paramétrisations relativistes et la description des propriétés de la matière nucléaire.

Interaction par échange de méson

La partie interaction du Lagrangien décrivant l'interaction nucléon-nucléon par échange de méson précédemment dérivé (Eq.(1.28)) se réécrit alors

$$\mathcal{L}_{\text{int}} = \bar{\psi} \left[-g_{\sigma}(\rho_V) \sigma - g_{\omega}(\rho_V) \gamma^{\mu} \omega_{\mu} - g_{\rho}(\rho_V) \gamma^{\mu} \vec{\rho}_{\mu} \cdot \vec{\tau} - e \gamma_{\mu} A^{\mu} \frac{1 - \tau_3}{2} \right] \psi, \quad (1.43)$$

où la densité fermionique est définie comme $\rho_V = \sqrt{j_{\mu} j^{\mu}}$ avec le 4-courant fermionique $j_{\mu} = \bar{\psi} \gamma_{\mu} \psi$. Le choix a été fait de considérer une dépendance dans la densité vectorielle et non scalaire $\rho_s = \bar{\psi} \psi$ bien que cette dernière soit possible[TA20].

La paramétrisation de ces constantes de couplage reste totalement libre aux vues du caractère phénoménologique de leur inclusion. Un argument de simplicité est donc utilisé ici et un ajustement sur les données des modèles DBHF[HM87 ; BM90] permet de contraindre drastiquement la forme de ces dépendances. Dans la suite, la forme de ces dépendances sera prise comme dans [TW99] i.e.

$$g_{\phi}(\rho_V) = \Gamma_{\phi} \times f_{\phi}(\rho_V/\rho_{\text{sat}}), \quad (1.44)$$

où $\phi \in \{\sigma, \omega, \rho\}$ et ρ_{sat} représente la densité de saturation nucléaire. Les constantes de couplage à densité de saturation $\Gamma_{\phi} = g_{\phi}(\rho_{\text{sat}})$ sont aussi des paramètres libres à fixer. Les fonctions f_i sont définies différemment pour les composantes isoscalaire (IS) et isovecteur (IV)

$$f_i^{IS}(x) = a_i \frac{1 + b_i(x + d_i)}{1 + c_i(x + d_i)}, \quad i \in \{\sigma, \omega\}, \quad (1.45)$$

$$f_i^{IV}(x) = \exp[-a_i(x - 1)], \quad i \in \{\rho\}, \quad (1.46)$$

où on a utilisé $x = \rho_V/\rho_{\text{sat}}$.

Le nombre de paramètres dans le canal isoscalaire peut alors être réduit en utilisant la relation triviale $f_i^{IS}(1) = 1$. Il est aussi courant d'imposer l'annulation de la dérivée seconde des fonctions f_i à densité nulle, i.e. $(f_i^{IS})''(0) = 0$. Cette contrainte permet, comme nous le verrons dans le chapitre suivant, d'éviter la divergence du terme de réarrangement qui comporte des termes proportionnels aux dérivées secondes des constantes de couplage. Prises toutes ensemble, ces contraintes permettent de réduire à 4 le nombre de paramètres libres par degrés de liberté isoscalaire et à 3 pour les degrés de liberté isovecteur. Écrit tel quel, ce Lagrangien possède donc 13 paramètres libres (dans le cas

où la densité de saturation n'est pas fixée)

$$\begin{aligned}
& m_\sigma, \Gamma_\sigma, b_\sigma, d_\sigma, \\
& m_\omega, \Gamma_\omega, b_\omega, d_\omega, \\
& m_\rho, \Gamma_\rho, a_\rho, \\
& \rho_{\text{sat}}.
\end{aligned} \tag{1.47}$$

Il est cependant courant de réduire encore légèrement ce nombre de paramètres en fixant les masses des mésons lourds i.e. le ω et le ρ à leurs valeurs dans le vide

$$m_\omega = 783.0 \text{ MeV} \tag{1.48}$$

$$m_\rho = 768.0 \text{ MeV}. \tag{1.49}$$

La justification de cette contrainte supplémentaire peut s'expliquer par la réduction du nombre de degrés de liberté de la théorie et donc par la réduction de la dimensionnalité de l'espace des paramètres à étudier pour obtenir une fonctionnelle propre à décrire les systèmes nucléaire. La masse du méson σ n'est pas fixée car elle possède un impact particulièrement important sur la partie scalaire du potentiel nucléon-nucléon et donc sur un grand nombre de propriétés des systèmes nucléaires, cf. Chap.4.

Interaction de portée nulle

Dans le cas du Lagrangien de portée nulle (Eq.(1.32)), les paramétrisations sont choisies différemment. Principalement guidées par les dépendances en densité des self-énergies[HM87 ; BM90], les dépendances suivent l'évolution

$$\alpha_i(x) = a_i + (b_i + c_i x) e^{-d_i x} \tag{1.50}$$

où $\alpha_i \in \{\alpha_S, \alpha_V, \alpha_{TV}\}$ et $x = \rho_V/\rho_{\text{sat}}$. La constante de couplage du terme dérivatif n'est pas prise comme dépendante de la densité. En effet, certains résultats de théorie des perturbations chirales[FKW05] ont montré que la variation de cette constante de couplage reste faible sur les plages de densités qui sont pertinentes pour l'étude de la structure nucléaire.

Les différentes paramétrisations adoptées dans ce travail de thèse sont décrites dans l'annexe A et le Chap.4 traite plus précisément la procédure d'ajustement des paramètres. Il reste cependant important de remarquer que le nombre de paramètres mis en jeu ici (pour l'interaction par échange de mésons ou de portée nulle) est de l'ordre de la dizaine. Combiné aux approches de traitement à N-corps présentés dans le chapitre suivant, ce faible nombre de paramètres permet de décrire de façon correcte les propriétés des ~ 3000 noyaux connus dans leur état fondamental et permet de prédire les propriétés de ~ 4000 noyaux supplémentaires.

1.5 Conclusion

Les développements concernant l'interaction nucléon-nucléon restent, encore aujourd'hui, des axes de recherche privilégiés pour améliorer notre compréhension des systèmes nucléaires. Nous avons vu dans ce chapitre que la description des interactions

entre nucléons prend son origine dans la théorie de l'interaction forte. Cette dernière, non-perturbative aux énergies de la physique nucléaire, ne permet pas la dérivation d'un potentiel nucléaire de façon simple. Le formalisme des théories effectives des champs et en particulier celui de la théorie des perturbations chirales a été introduit permettant d'obtenir un Lagrangien capable de décrire cette physique de basse énergie. Nous avons vu qu'une façon effective (et approximative) de traiter l'interaction revenait à considérer l'échange de mésons dans le cadre de l'approximation OBE. De cette façon, il est possible de s'affranchir des difficultés liées au calcul des échanges de nombreux pions nécessaire à l'élaboration de la partie courte portée de l'interaction nucléaire. De plus, nous avons vu qu'il était possible, dans une certaine mesure, de justifier la présence de ces degrés mésoniques à l'aide d'extensions de la théorie chirale (symétrie conforme et HLS).

Finalement, la prise en compte du milieu dans l'interaction nucléaire est une tâche particulièrement complexe qui nécessite de nombreuses étapes en partant d'une théorie chirale. Le coût numérique lié aux méthodes permettant de prendre explicitement en compte les interactions du milieu restent, pour le moment, assez élevé et ne permet pas de procéder à des analyses systématiques. Aux vues des difficultés importantes mentionnées ci-dessus, dans les travaux présentés dans les sections suivantes, l'influence du milieu est prise en compte de manière phénoménologique en incluant une dépendance explicite en densité dans les constantes de couplage de notre modèle.

L'interaction nucléon-nucléon avec une dépendance en densité présentée dans ce chapitre constitue le point de départ pour le traitement du problème à N-corps quantique présenté dans le chapitre suivant.

Références

- [AAS18] S. S. AGAEV, K. AZIZI et H. SUNDU. « The strong decays of the light scalar mesons $f_0(500)$ and $f_0(980)$ ». In : *Physics Letters B* 784 (10 sept. 2018), p. 266-270. ISSN : 0370-2693. DOI : [10.1016/j.physletb.2018.07.042](https://doi.org/10.1016/j.physletb.2018.07.042) (cf. p. 12).
- [AK11] Ahmed ALI et Gustav KRAMER. « Jets and QCD : A Historical Review of the Discovery of the Quark and Gluon Jets and its Impact on QCD ». In : *The European Physical Journal H* 36.2 (sept. 2011), p. 245-326. ISSN : 2102-6459, 2102-6467. DOI : [10.1140/epjh/e2011-10047-1](https://doi.org/10.1140/epjh/e2011-10047-1). arXiv : [1012.2288](https://arxiv.org/abs/1012.2288) (cf. p. 6).
- [Ban+85] M. BANDO et al. « Is the ρ Meson a Dynamical Gauge Boson of Hidden Local Symmetry? » In : *Physical Review Letters* 54.12 (25 mars 1985), p. 1215-1218. DOI : [10.1103/PhysRevLett.54.1215](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.54.1215) (cf. p. 12).
- [Bea+11] S. R. BEANE et al. « Nuclear physics from lattice QCD ». In : *Progress in Particle and Nuclear Physics* 66.1 (1^{er} jan. 2011), p. 1-40. ISSN : 0146-6410. DOI : [10.1016/j.pnpnp.2010.08.002](https://doi.org/10.1016/j.pnpnp.2010.08.002) (cf. p. 14).

- [BKY88] Masako BANDO, Taichiro KUGO et Koichi YAMAWAKI. « Nonlinear realization and hidden local symmetries ». In : *Physics Reports* 164.4 (1^{er} juill. 1988), p. 217-314. ISSN : 0370-1573. DOI : [10.1016/0370-1573\(88\)90019-1](https://doi.org/10.1016/0370-1573(88)90019-1) (cf. p. 12).
- [BM90] R. BROCKMANN et R. MACHLEIDT. « Relativistic nuclear structure. I. Nuclear matter ». In : *Physical Review C* 42.5 (1^{er} nov. 1990), p. 1965-1980. DOI : [10.1103/PhysRevC.42.1965](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.42.1965) (cf. p. 22, 23).
- [CCL06] I. CAPRINI, G. COLANGELO et H. LEUTWYLER. « Mass and Width of the Lowest Resonance in QCD ». In : *Physical Review Letters* 96.13 (5 avr. 2006), p. 132001. DOI : [10.1103/PhysRevLett.96.132001](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.96.132001) (cf. p. 12).
- [CFG92] Thomas D. COHEN, R. J. FURNSTAHL et David K. GRIEGEL. « Quark and gluon condensates in nuclear matter ». In : *Physical Review C* 45.4 (1^{er} avr. 1992), p. 1881-1893. DOI : [10.1103/PhysRevC.45.1881](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.45.1881) (cf. p. 21).
- [Cre70] R. J. CREWTHER. « Broken scale invariance and the width of a single dilaton ». In : *Physics Letters B* 33.4 (26 oct. 1970), p. 305-308. ISSN : 0370-2693. DOI : [10.1016/0370-2693\(70\)90277-7](https://doi.org/10.1016/0370-2693(70)90277-7) (cf. p. 11).
- [CT15] R. J. CREWTHER et Lewis C. TUNSTALL. « $\Delta I = 1/2$ rule for kaon decays derived from QCD infrared fixed point ». In : *Physical Review D* 91.3 (17 fév. 2015), p. 034016. DOI : [10.1103/PhysRevD.91.034016](https://doi.org/10.1103/PhysRevD.91.034016) (cf. p. 11-13).
- [Dut+14] M. DUTRA et al. « Relativistic mean-field hadronic models under nuclear matter constraints ». In : *Physical Review C* 90.5 (10 nov. 2014), p. 055203. DOI : [10.1103/PhysRevC.90.055203](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.90.055203) (cf. p. 22).
- [Ell70] John ELLIS. « Aspects of conformal symmetry and chirality ». In : *Nuclear Physics B* 22.2 (15 sept. 1970), p. 478-492. ISSN : 0550-3213. DOI : [10.1016/0550-3213\(70\)90422-0](https://doi.org/10.1016/0550-3213(70)90422-0) (cf. p. 11).
- [Fab98] N. FABIANO. « Top mesons ». In : *The European Physical Journal C - Particles and Fields* 2.2 (1^{er} avr. 1998), p. 345-350. ISSN : 1434-6052. DOI : [10.1007/s100520050144](https://doi.org/10.1007/s100520050144) (cf. p. 10).
- [Fey39] R. P. FEYNMAN. « Forces in Molecules ». In : *Physical Review* 56.4 (15 août 1939), p. 340-343. DOI : [10.1103/PhysRev.56.340](https://doi.org/10.1103/PhysRev.56.340) (cf. p. 21).
- [FKW05] S. FRITSCH, N. KAISER et W. WEISE. « Chiral approach to nuclear matter : role of two-pion exchange with virtual delta-isobar excitation ». In : *Nuclear Physics A* 750.2 (4 avr. 2005), p. 259-293. ISSN : 0375-9474. DOI : [10.1016/j.nuclphysa.2004.12.042](https://doi.org/10.1016/j.nuclphysa.2004.12.042) (cf. p. 23).
- [Fuc04] Christian FUCHS. « 4 The Relativistic Dirac-Brueckner Approach to Nuclear Matter ». In : *Extended Density Functionals in Nuclear Structure Physics*. Sous la dir. de Georgios A. LALAZISSIS, Peter RING et Dario VRETENAR. Lecture Notes in Physics. Berlin, Heidelberg : Springer, 2004, p. 119-146. ISBN : 978-3-540-39911-7. DOI : [10.1007/978-3-540-39911-7_4](https://doi.org/10.1007/978-3-540-39911-7_4) (cf. p. 21).

- [Fuj+85] Takanori FUJIWARA et al. « Non-Abelian Anomaly and Vector Mesons as Dynamical Gauge Bosons of Hidden Local Symmetries ». In : *Progress of Theoretical Physics* 73.4 (1^{er} avr. 1985), p. 926-941. ISSN : 0033-068X. DOI : [10.1143/PTP.73.926](https://doi.org/10.1143/PTP.73.926) (cf. p. 12).
- [GL84] J GASSER et H LEUTWYLER. « Chiral perturbation theory to one loop ». In : *Annals of Physics* 158.1 (1^{er} nov. 1984), p. 142-210. ISSN : 0003-4916. DOI : [10.1016/0003-4916\(84\)90242-2](https://doi.org/10.1016/0003-4916(84)90242-2) (cf. p. 10).
- [Güt32] P. GÜTTINGER. « Das Verhalten von Atomen im magnetischen Drehfeld ». In : *Zeitschrift für Physik* 73.3 (1^{er} mars 1932), p. 169-184. ISSN : 1434-601X. DOI : [10.1007/BF01351211](https://doi.org/10.1007/BF01351211) (cf. p. 21).
- [GW73] David J. GROSS et Frank WILCZEK. « Asymptotically Free Gauge Theories. I ». In : *Physical Review D* 8.10 (15 nov. 1973), p. 3633-3652. DOI : [10.1103/PhysRevD.8.3633](https://doi.org/10.1103/PhysRevD.8.3633) (cf. p. 8).
- [Hag+08] G. HAGEN et al. « Medium-Mass Nuclei from Chiral Nucleon-Nucleon Interactions ». In : *Physical Review Letters* 101.9 (29 août 2008), p. 092502. DOI : [10.1103/PhysRevLett.101.092502](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.101.092502) (cf. p. 14).
- [Hel37] Hans HELLMANN. *Einführung in die quantenchemie*. Leipzig und Wien : F. Deuticke, 1937. 4 p. (cf. p. 21).
- [Her20] Heiko HERGERT. « A Guided Tour of ab initio Nuclear Many-Body Theory ». In : *Frontiers in Physics* 8 (2020). ISSN : 2296-424X (cf. p. 20).
- [HK17] J. W. HOLT et N. KAISER. « Equation of state of nuclear and neutron matter at third-order in perturbation theory from chiral effective field theory ». In : *Physical Review C* 95.3 (29 mars 2017), p. 034326. DOI : [10.1103/PhysRevC.95.034326](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.95.034326) (cf. p. 14).
- [HM87] B. Ter HAAR et R. MALFLIET. « Relativistic aspects of the nuclear mean field in high-energy nucleus-nucleus collisions ». In : *Physics Letters B* 196.4 (15 oct. 1987), p. 414-418. ISSN : 0370-2693. DOI : [10.1016/0370-2693\(87\)90792-1](https://doi.org/10.1016/0370-2693(87)90792-1) (cf. p. 22, 23).
- [HY03] Masayasu HARADA et Koichi YAMAWAKI. « Hidden Local Symmetry at Loop – A New Perspective of Composite Gauge Boson and Chiral Phase Transition – ». In : *Physics Reports* 381.1 (juill. 2003), p. 1-233. ISSN : 03701573. DOI : [10.1016/S0370-1573\(03\)00139-X](https://doi.org/10.1016/S0370-1573(03)00139-X). arXiv : [hep-ph/0302103](https://arxiv.org/abs/hep-ph/0302103) (cf. p. 12-14).
- [LPR15] Hyun Kyu LEE, Won-Gi PAENG et Mannque RHO. « Scalar Pseudo-Nambu-Goldstone Boson in Nuclei and Dense Nuclear Matter ». In : *Physical Review D* 92.12 (29 déc. 2015), p. 125033. ISSN : 1550-7998, 1550-2368. DOI : [10.1103/PhysRevD.92.125033](https://doi.org/10.1103/PhysRevD.92.125033). arXiv : [1504.00908](https://arxiv.org/abs/1504.00908) (cf. p. 12).
- [Nav+07] P. NAVRÁTIL et al. « Structure of $A = 10 - 13$ Nuclei with Two- Plus Three-Nucleon Interactions from Chiral Effective Field Theory ». In : *Physical Review Letters* 99.4 (25 juill. 2007), p. 042501. DOI : [10.1103/PhysRevLett.99.042501](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.99.042501) (cf. p. 14).

- [NVR08] T. NIKŠIĆ, D. VRETENAR et P. RING. « Relativistic nuclear energy density functionals : Adjusting parameters to binding energies ». In : *Physical Review C* 78.3 (25 sept. 2008), p. 034318. DOI : [10.1103/PhysRevC.78.034318](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.78.034318) (cf. p. 18).
- [Pae+17] Won-Gi PAENG et al. « Scale-invariant hidden local symmetry, topology change, and dense baryonic matter. II. » In : *Physical Review D* 96.1 (31 juill. 2017), p. 014031. DOI : [10.1103/PhysRevD.96.014031](https://doi.org/10.1103/PhysRevD.96.014031) (cf. p. 14).
- [PF08] O. PLOHL et C. FUCHS. « Nuclear matter in the chiral limit and the in-medium chiral condensate ». In : *Nuclear Physics A* 798.3 (15 jan. 2008), p. 75-95. ISSN : 0375-9474. DOI : [10.1016/j.nuclphysa.2007.10.009](https://doi.org/10.1016/j.nuclphysa.2007.10.009) (cf. p. 21).
- [Pol73] H. David POLITZER. « Reliable Perturbative Results for Strong Interactions? » In : *Physical Review Letters* 30.26 (25 juin 1973), p. 1346-1349. DOI : [10.1103/PhysRevLett.30.1346](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.30.1346) (cf. p. 8).
- [Sam+15] F. SAMMARRUCA et al. « Toward order-by-order calculations of the nuclear and neutron matter equations of state in chiral effective field theory ». In : *Physical Review C* 91.5 (12 mai 2015), p. 054311. DOI : [10.1103/PhysRevC.91.054311](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.91.054311) (cf. p. 14).
- [Sky62] T. H. R. SKYRME. « A unified field theory of mesons and baryons ». In : *Nuclear Physics* 31 (1^{er} mars 1962), p. 556-569. ISSN : 0029-5582. DOI : [10.1016/0029-5582\(62\)90775-7](https://doi.org/10.1016/0029-5582(62)90775-7) (cf. p. 14).
- [TA20] Stefan TYPEL et Diana ALVEAR TERRERO. « Parametrisations of relativistic energy density functionals with tensor couplings ». In : *The European Physical Journal A* 56.6 (4 juin 2020), p. 160. ISSN : 1434-601X. DOI : [10.1140/epja/s10050-020-00172-2](https://doi.org/10.1140/epja/s10050-020-00172-2) (cf. p. 22).
- [TW99] S. TYPEL et H. H. WOLTER. « Relativistic mean field calculations with density-dependent meson-nucleon coupling ». In : *Nuclear Physics A* 656.3 (6 sept. 1999), p. 331-364. ISSN : 0375-9474. DOI : [10.1016/S0375-9474\(99\)00310-3](https://doi.org/10.1016/S0375-9474(99)00310-3) (cf. p. 22).
- [Typ+10] S. TYPEL et al. « Composition and thermodynamics of nuclear matter with light clusters ». In : *Physical Review C* 81.1 (13 jan. 2010), p. 015803. DOI : [10.1103/PhysRevC.81.015803](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.81.015803) (cf. p. 18).
- [Wei68] Steven WEINBERG. « Nonlinear Realizations of Chiral Symmetry ». In : *Physical Review* 166.5 (25 fév. 1968), p. 1568-1577. DOI : [10.1103/PhysRev.166.1568](https://doi.org/10.1103/PhysRev.166.1568) (cf. p. 10).
- [ZB86] I. ZAHED et G. E. BROWN. « The Skyrme model ». In : *Physics Reports* 142.1 (1^{er} sept. 1986), p. 1-102. ISSN : 0370-1573. DOI : [10.1016/0370-1573\(86\)90142-0](https://doi.org/10.1016/0370-1573(86)90142-0) (cf. p. 14).

Méthode de l'énergie fonctionnelle de la densité

Sommaire

2.1	Théorie de la fonctionnelle en densité	30
2.1.1	Matrice densité	31
2.1.2	Théorème d'existence	32
2.1.3	Lien avec les EDF	34
2.2	Théorie Hartree-Fock	35
2.3	Théorie Hartree-Fock-Bogoliubov	37
2.3.1	Motivations	37
2.3.2	Théorie BCS pour les systèmes nucléaires	39
2.3.3	Formalisme de Bogoliubov	41
2.3.4	Équations HFB	42
2.4	Équations du mouvement	43
2.4.1	Partie fermionique	43
2.4.2	Partie mésonique	43
2.5	Hamiltonien du système	44
2.5.1	Partie fermionique	44
2.5.2	Partie mésonique	45
2.5.3	Partie interaction	45
2.5.4	Hamiltonien final	45
2.5.5	Quantification	46
2.6	Équations RMF et RHB	47
2.6.1	Approximation Hartree	47
2.6.2	Autres approximations	48
2.6.3	Équations RMF	49
2.6.4	Équations RHB	50

2.7 Aspects numériques	51
2.7.1 Résolution des équations RHB	51
2.7.2 Calculs contraints	51
2.8 Conclusion	53
Références	54

Dans le chapitre précédent ont été discutés différents aspects de l'interaction nucléon-nucléon. Une fois cette interaction fixée, il est alors nécessaire de s'atteler à la résolution du problème à N-corps quantique que constitue le noyau atomique. Du fait de la complexité de l'interaction forte, et de l'interaction nucléon-nucléon, les systèmes nucléaires font partie des systèmes quantiques à N-corps les plus difficiles à décrire. De cette complexité émerge alors naturellement une diversité de phénomènes : appariement, déformation, excitations collectives, ... dont certains seront étudiés dans les chapitres suivants.

La résolution de ce problème à N-corps quantique ne peut être effectuée de façon exacte aux vues du nombre important de degrés de liberté du système. Ainsi, un schéma d'approximations doit être mis en place. Le cadre théorique qui a été utilisé lors de cette thèse est celui des théories de l'énergie fonctionnelle de la densité (EDF). Les résultats concernant la théorie fonctionnelle de la densité (DFT) qui possède de nombreuses ressemblances avec les méthodes EDF sont présentés dans la première section 2.1. Les méthodes EDF sont, encore aujourd'hui, les seules permettant de décrire de façon cohérente l'ensemble de la carte des noyaux.

L'élaboration des EDF requière l'utilisation d'un schéma d'approximation permettant de traiter le problème à N-corps. Ces méthodes sont présentées en section 2.2 pour l'approximation Hartree-Fock (HF) et 2.3 pour l'approximation Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB). Les sections 2.4 à 2.6 présentent la dérivation des équations RMF et RHB. Finalement, des détails sur l'implémentation numérique et la résolution des équations Hartree-Bogoliubov relativistes (RHB) sont donnés dans la section 2.7.

2.1 Théorie de la fonctionnelle en densité

On se propose ici de donner les résultats fondamentaux concernant les théories de la fonctionnelle en densité. On considère donc un système à N-corps quantique soumis à un potentiel externe V_{ext} dont l'Hamiltonien interne peut être écrit comme

$$H_i = \sum_{i=1}^N t_i + \sum_{i<j} V_{ij} + \sum_{i<j<k} V_{ijk} + \dots \quad (2.1)$$

où on inclut un terme cinétique (t_i) et des termes d'interaction à deux, trois, ..., N particules. Les potentiels à N-corps dépendent des positions respectives des particules ($V_{ij} = V_{ij}(\vec{r}_i, \vec{r}_j)$, $V_{ijk} = V_{ijk}(\vec{r}_i, \vec{r}_j, \vec{r}_k)$, ...). L'Hamiltonien complet du système prend alors la forme $H = H_i + \sum_i v_{\text{ext}}(i)$ où v_{ext} rend compte de l'énergie liée au potentiel externe V_{ext} . Cet Hamiltonien est donc le point de départ de nombreuses théories faisant intervenir un problème à N-corps, la présence du potentiel externe n'est cependant pas

présente dans beaucoup de ces problèmes. Dans le cas où de nombreuses¹ particules sont présentes ou lorsque les potentiels prennent des formes complexes, l'espace des phases associé au système peut rapidement devenir important, empêchant alors une diagonalisation directe de cet Hamiltonien. Un schéma d'approximation doit ainsi être mis en place.

Dans la suite, nous discutons de l'approche de la fonctionnelle en densité (DFT), originellement appliquée aux systèmes électroniques. Le lien avec la description des systèmes nucléaires sera ensuite discuté en mettant en avant les ressemblances et différences avec le cadre des théories EDF.

2.1.1 Matrice densité

La densité à un corps joue un rôle particulièrement crucial dans le formalisme des DFT. Cependant, il n'est pas trivial que cette densité à un corps encode toute l'information du système. Le choix particulier de se restreindre à une densité à un corps est principalement motivé par deux aspects : i) la résolution exacte du problème à N-corps est bien trop complexe, et ii) la plupart des observables expérimentales d'intérêt sont des observables à un corps où seul la matrice densité à un corps est nécessaire (rayon, déformation, ...).

De manière très générale, il est possible d'écrire n'importe quelle observable à M corps comme

$$\hat{O}^{(M)} = \sum_{i_1 \dots i_{2M}} O_{i_1 \dots i_{2M}} a_{i_1}^\dagger \dots a_{i_M}^\dagger a_{i_{M+1}} \dots a_{i_{2M}} \quad (2.2)$$

Ainsi, en notant $|\psi^N\rangle$ l'état quantique du système à N-corps, il est possible de définir les matrices densités réduites à M-corps comme

$$\rho_{i_{2M} \dots i_1}^{(M)} = \langle \psi^N | a_{i_1}^\dagger \dots a_{i_M}^\dagger a_{i_{M+1}} \dots a_{i_{2M}} | \psi^N \rangle \quad (2.3)$$

où on suppose la bonne normalisation des fonctions d'ondes (i.e. $\langle \psi^N | \psi^N \rangle = 1$). Ces matrices sont utilisées pour définir la valeur moyenne des observables à M-corps avec la relation usuelle

$$\langle \hat{O}^{(M)} \rangle = \text{Tr} \left[\hat{O}^{(M)} \hat{\rho}^{(M)} \right] \quad (2.4)$$

On en déduit donc, comme dit précédemment, que la donnée de la matrice à M-corps totale n'est pas forcément pertinente dans le cas où les observables d'intérêts ne sont que des observables à 1-corps.

Il sera particulièrement intéressant pour la suite de s'intéresser aux matrices de corrélation, et plus précisément à la matrice de corrélation à deux corps. Cette dernière peut être introduite de manière simple en utilisant le théorème de Wick pour écrire

$$\rho_{lkji}^{(2)} = C_{lkji}^2 + \rho_{li}^{(1)} \rho_{kj}^{(1)} - \rho_{ki}^{(1)} \rho_{lj}^{(1)} \quad (2.5)$$

où C^2 est donc défini comme la matrice de corrélation à deux corps et il est alors facile de montrer que

$$(\hat{\rho}^{(1)})^2 - \hat{\rho}^{(1)} = \text{Tr} [C^2] \quad (2.6)$$

1. Il reste difficile de donner une estimation quantitative étant donné que l'espace des phases d'un système dépend de ses degrés de libertés.

Il est alors intéressant de remarquer que, dans le cas où les corrélations à deux corps sont nulles ($C^2 = 0$), $(\hat{\rho}^1)^2 = \hat{\rho}^1$ et les valeurs propres de la matrice densité (les nombres d'occupation) ne pourront prendre que les valeurs 0 ou 1. Ce cas est détaillé dans les sections suivantes dans le cadre l'approximation Hartree-Fock (voir section 2.2) où on impose une forme de déterminant de Slater à la fonction d'onde (approximation des particules indépendantes). Ce cas précis signifie que toute l'information nécessaire à la description du système se trouve dans la matrice densité à un corps. Le cas inverse où $C^2 \neq 0$ stipule que les nombres d'occupation pourront cette fois prendre des valeurs continues comprises entre 0 et 1. Ce cas de figure apparaît par exemple dans le cadre de la théorie Hartree-Fock-Bogoliubov (approximation des quasi-particules indépendantes) présentée dans la section 2.3.

L'importance de la densité à un corps est donc directement reliée aux observables expérimentales que l'on souhaite décrire. De plus, un argument de simplicité (aussi bien pour le formalisme que pour la résolution numérique) nous pousse à privilégier cette densité à un corps. Ainsi, dans les sections suivantes, et de façon générale dans la suite de cette thèse, seule la densité à un corps et ses propriétés sont discutées. Cette densité à un corps représente la brique fondamentale de construction des théories DFT et EDF.

2.1.2 Théorème d'existence

Dans la théorie de la DFT, on considère un système lié par un potentiel extérieur V_{ext} . La puissance de la DFT provient du théorème de Hohenberg-Kohn[HK64] qui stipule l'existence d'une fonctionnelle de la densité $F[\rho]$ permettant d'écrire l'énergie du système comme

$$E_{V_{\text{ext}}}[\rho] = F[\rho] + \int d\vec{r} V_{\text{ext}}(\vec{r}) \rho(\vec{r}) \quad (2.7)$$

où $\rho(\vec{r})$ représente la densité locale à un corps du système ($\rho(\vec{r}) = \hat{\rho}^{(1)}(\vec{r}, \vec{r})$). Le point important ici est que la fonctionnelle F ne dépendra que de l'interaction entre les composants du système et pas du potentiel extérieur. Cette fonctionnelle possède de plus un minimum à l'exacte densité de l'état fondamental. L'équation Eq.(2.7) nous montre ainsi que la donnée seule de la densité locale $\rho(\vec{r})$ rend compte de toute l'information du système et donc que la donnée de toutes les fonctions d'ondes du système n'est pas nécessaire.

De plus, Hohenberg et Kohn ont montré que le potentiel extérieur pouvait être écrit en fonction de la densité locale à un corps. Ce résultat peut être démontré en quelques lignes. On suit la démonstration originale de [HK64] en commençant par supposer l'existence de deux potentiels V et V' donnant tous les deux la même densité ρ . Les fonctions d'onde associées à cette densité sont dénotées ψ et ψ' et ne sont pas égales (à moins que les potentiels soient égaux à une constante près). Puisque ces états $\psi^{(i)}$ représentent les états fondamentaux, on a

$$E' = \langle \psi' | H' | \psi' \rangle < \langle \psi | H' | \psi \rangle = \langle \psi | H + V' - V | \psi \rangle \quad (2.8)$$

soit

$$E' < E + \int (V' - V) \rho d\vec{r} \quad (2.9)$$

Un raisonnement identique en inversant les deux potentiels donnent

$$E < E' + \int (V - V') n dr \quad (2.10)$$

Puis en combinant ces deux équations

$$E' + E < E + E' \quad (2.11)$$

qui est absurde. On en déduit donc que la donnée de la densité ρ définit entièrement le potentiel externe V . Ainsi, l'énergie du système, qui ne dépendait déjà que du potentiel extérieur et de la densité à un corps, peut être réécrit en fonction de la seule densité locale à un corps i.e.

$$E = \mathcal{E} [\rho] \quad (2.12)$$

Ce théorème n'étant qu'un théorème d'existence, il ne permet donc pas de construire de façon systématique cette fonctionnelle. Dans la pratique, le schéma de résolution de Kohn et Sham (KS)[KS65b; KS65a] est le plus utilisé. Cette implémentation est basée sur une correspondance entre la densité d'un système en interaction et celle d'un système de particules indépendantes uniquement soumises à un potentiel V_{KS} . Formellement, cela revient à résoudre l'équation de Schrödinger suivante

$$\left[-\frac{\nabla^2}{2m} + V_{KS}(\vec{r}) \right] \psi_i(\vec{r}) = \epsilon_i \psi_i(\vec{r}) \quad (2.13)$$

où les ψ_i représentent les orbitales de KS. Il est important de remarquer que les orbitales de KS ψ_i ne possèdent, a priori, aucun sens physique et ne servent que de fonctions d'ondes auxiliaires pour définir la densité à un corps

$$\rho = \sum_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|. \quad (2.14)$$

La fonctionnelle $F[\rho]$ prend alors la forme suivante

$$F[\rho] = T[\rho] + E_H[\rho] + E_{XC}[\rho] \quad (2.15)$$

avec $T[\rho]$ la fonctionnelle cinétique du système sans interaction, $E_H[\rho]$ la partie Hartree (voir section 2.2) de la fonctionnelle qui ne dépend que du potentiel à un corps et enfin $E_{XC}[\rho]$ la partie échange de la fonctionnelle qui contient le terme de Fock et tous les termes d'interaction d'ordres supérieurs.

On obtient alors un schéma auto-cohérent pour résoudre le problème à N-corps où le point de départ est un potentiel de KS. On résout les équations du mouvement pour obtenir les fonctions d'ondes (et l'énergie) desquelles est extraite une densité à un corps que l'on peut utiliser pour reconstruire un nouveau potentiel, et ce, jusqu'à la convergence. Cet enchainement est résumé sur la Fig.2.1 et par l'équation

$$V_{KS} \rightarrow \psi_i \rightarrow \rho \rightarrow V_{KS}. \quad (2.16)$$

La difficulté dans l'utilisation du théorème HK et du schéma KS réside dans la construction de la partie d'échange. En effet, le théorème ne donne aucune information à propos de la forme de la fonctionnelle. De nombreuses prescriptions existent afin de construire la partie d'échange, la plus utilisée restant celle où cette partie d'échange est prise comme fonction de la densité locale à un corps seulement (voir par exemple [Per+05] pour différents exemples).

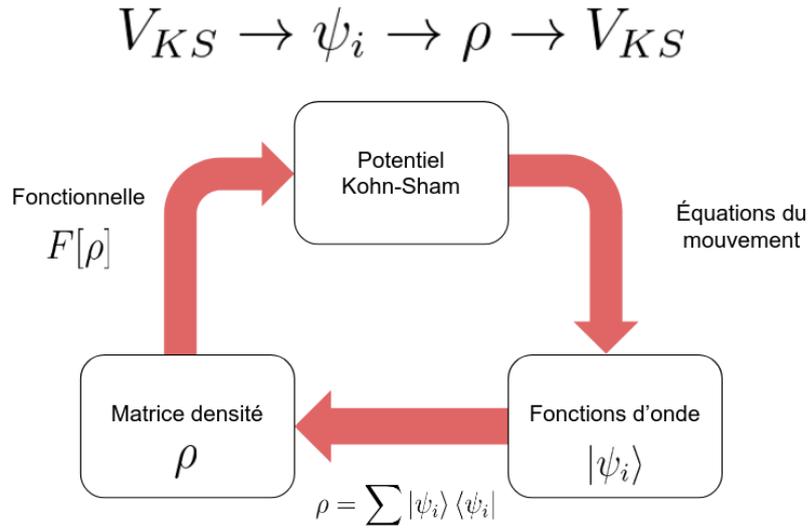


FIGURE 2.1 – Schéma générique de résolution du problème à N-corps dans l’implémentation de Kohn-Sham de la DFT.

2.1.3 Lien avec les EDF

Une des méthodes usuelles permettant de traiter le problème nucléaire est celui des EDF. Cependant, bien que possédant de nombreuses similarités, les EDF et les DFT possèdent aussi des différences fondamentales.

Le cadre théorique de la DFT présenté précédemment s’applique dans le cas où le système est soumis à un potentiel extérieur V_{ext} qui lie les composants du système. Le cas du noyau reste bien différent d’un point de vue fondamental. En effet, les nucléons ne sont pas liés par un potentiel extérieur, mais par interaction forte, directement entre eux. Ainsi, le noyau atomique est un système auto-lié et la présence d’un potentiel extérieur n’est pas requise. Il en résulte que l’application de la DFT au problème de physique nucléaire ne possède, pour le moment, pas de base mathématique quant à l’existence d’une telle fonctionnelle².

Une seconde différence fondamentale entre les méthodes EDF et DFT concerne la façon dont les symétries sont préservées. En DFT, les symétries du système ne peuvent être brisées[Gör93] sous peine de sortir du cadre du théorème HK. En physique nucléaire en revanche, afin de tenir compte du phénomène d’appariement par exemple (voir Sec.2.3), les symétries du système peuvent être brisées afin d’inclure des corrélations supplémentaires dans le champ moyen. Ces symétries sont brisées directement au niveau du vide choisit pour la théorie et la minimisation de la fonctionnelle dans ce vide particulier amène au cadre des théories SR-EDF (Single Reference EDF). Il est cependant possible de restaurer ces symétries brisées pour obtenir une théorie dite multi-références (MR-EDF)[DS10; She+21] prenant en compte les fluctuations des paramètres d’ordre des symétries brisées en mélangeant les différents états obtenus au niveau SR-EDF. Ces théories MR-EDF sont celles qui se rapprochent le plus des théories DFT même si un lien mathématiquement solide n’a pour le moment pas été dérivé.

2. De nombreuses études tentent de faire le lien entre DFT et EDF[DFP10].

Dans la suite de ce chapitre, on se propose donc de construire une énergie fonctionnelle de la densité dans un cadre relativiste au niveau SR-EDF. La théorie du champ moyen relativiste et son extension au cas superfluide seront ainsi présentées.

2.2 Théorie Hartree-Fock

On se propose ici de donner les principales étapes permettant la dérivation d'une énergie fonctionnelle de la densité. De la même façon que pour la DFT, le point de départ sera un Hamiltonien très général

$$H = \sum_{i=1}^N t_i + \sum_{i<j} V_{ij} + \sum_{i<j<k} V_{ijk} + \dots \quad (2.17)$$

où des potentiels à deux, trois, ..., N particules peuvent être inclus et rendent la résolution numérique trop coûteuse numériquement. Afin de traiter ce problème à N -corps, on utilise alors l'approximation du champ moyen qui consiste à séparer l'Hamiltonien en une partie à un corps englobant le plus de corrélations possible et une partie interaction à plusieurs corps. Cela revient donc à écrire

$$\begin{aligned} H &= \left[\sum_i \frac{p_i^2}{2m} + U_i \right] + \left[\sum_{ij} V_{ij} + \sum_{i<j<k} V_{ijk} + \dots - \sum_i U_i \right] \\ &= H_0 + \mathcal{V}_{res} \end{aligned} \quad (2.18)$$

avec H_0 un Hamiltonien à un corps facilement diagonalisable et \mathcal{V}_{res} un potentiel résiduel possiblement très complexe. Les U_i représentent le champ moyen et toute la difficulté de l'approche revient à trouver le « meilleur » champ moyen afin de prendre en compte le maximum de corrélation possible.

Sous cette approximation, le système devient donc un système de particules indépendantes plongées dans un champ moyen U . L'approximation Hartree-Fock fournit alors un moyen d'obtenir la meilleure représentation possible (le meilleur champ moyen). Pour cela, on suppose que les fonctions d'ondes $|\Phi_0\rangle$ prennent la forme de déterminant de Slater. Le vide de référence est alors choisi comme étant le vide des particules $|0\rangle$ et la fonction d'onde du système prend la forme³

$$|\Phi_0\rangle = \prod_i c_i^\dagger |0\rangle \quad (2.19)$$

avec c_i^\dagger l'opérateur de création de particule. Le problème revient ensuite à résoudre l'équation aux valeurs propres

$$H_0 |\Phi_0\rangle = E_0^{HF} |\Phi_0\rangle \quad (2.20)$$

avec E_0^{HF} l'énergie Hartree-Fock qui correspond donc à l'énergie du fondamental dans l'approximation Hartree-Fock.

3. Il est important de rappeler ici que l'interaction étant ajustée sur des données de physique nucléaire, l'état fondamental prend de fait en compte bien plus de corrélation que la simple approximation HF.

Matrice densité à un corps et énergie Hartree-Fock

La matrice densité à un corps s'exprime alors à partir de l'état fondamental $|\Phi_0\rangle$

$$\rho_{ji} \equiv \langle \Phi_0 | c_i^\dagger c_j | \Phi_0 \rangle \quad (2.21)$$

Comme mentionné dans la section précédente, dans le cas où les fonctions d'ondes se réduisent à un déterminant de Slater, la donnée de la matrice densité à un corps est suffisante pour caractériser entièrement le système.

Il est alors possible d'obtenir une expression de l'énergie Hartree-Fock en fonction seulement de cette matrice densité à un corps et des termes d'interaction. Pour ce faire, nous commençons par écrire l'Hamiltonien sous une forme quantifiée

$$H = \sum_{ij} t_{ij} c_i^\dagger c_j + \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \mathcal{V}_{ijkl} c_i^\dagger c_j^\dagger c_l c_k \quad (2.22)$$

L'énergie Hartree-Fock prend alors la forme

$$E_0^{HF} = \sum_{ij} t_{ij} \langle \Phi_0 | c_i^\dagger c_j | \Phi_0 \rangle + \sum_{i<j,k<l} \mathcal{V}_{ijkl} \langle \Phi_0 | c_i^\dagger c_j^\dagger c_l c_k | \Phi_0 \rangle \quad (2.23)$$

En utilisant le théorème de Wick et l'équation Eq.(2.19), il est possible de réécrire l'énergie HF en fonction de la densité à un corps seulement

$$E_0^{HF} = \sum_{i,j} t_{ij} \rho_{ji} + \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \mathcal{V}_{ijkl}^{(A)} \rho_{ki} \rho_{lj} \quad (2.24)$$

où le potentiel $\mathcal{V}_{ijkl}^{(A)}$ représente le potentiel \mathcal{V}_{ijkl} anti-symétrisé défini par

$$\mathcal{V}_{ijkl} (\rho_{ki} \rho_{lj} - \rho_{li} \rho_{kj}) = \mathcal{V}_{ijkl}^{(A)} \rho_{ki} \rho_{lj}. \quad (2.25)$$

La seule connaissance de la matrice densité à un corps permet donc de calculer l'énergie HF à partir du potentiel quantifié \mathcal{V} .

Écrite telle quelle, l'équation Eq.(2.24) définit en fait la fonctionnelle HF

$$\mathcal{E}^{HF} [\rho] = T [\rho] + E_H [\rho] + E_{XC} [\rho] \quad (2.26)$$

qui est bien une fonctionnelle de la densité à 1-corps. Il est cependant important de remarquer une différence importante avec la DFT : ici il s'agit d'une théorie dépendante de la matrice densité à 1-corps et non de la densité locale à 1-corps comme dans la DFT.

Équation Hartree-Fock

La dernière étape consiste à trouver la matrice densité à un corps ρ qui minimise notre fonctionnelle HF. On procède à la minimisation de \mathcal{E}^{HF} sous la condition de conserver un système de particules indépendantes i.e. en imposant l'idempotence de la matrice densité. On obtient alors

$$\delta (\mathcal{E}^{HF} - \Lambda (\rho^2 - \rho)) = 0 \quad (2.27)$$

où Λ représente un paramètre de Lagrange. Le premier terme peut se réécrire $\delta\mathcal{E}^{HF} = h\delta\rho$ avec h l'Hamiltonien du système donné par

$$h[\rho] = \frac{\delta\mathcal{E}^{HF}[\rho]}{\delta\rho}. \quad (2.28)$$

Finalement, le calcul explicite de Eq.(2.27) permet d'écrire l'équation HF sous sa forme finale

$$[h[\rho], \rho] = 0 \quad (2.29)$$

Cette équation nous enseigne que la base qui minimise l'énergie de notre système est celle où la densité et l'Hamiltonien commutent i.e. celle où ρ et h sont diagonales.

Pour être utilisable, il sera nécessaire de dériver les éléments de matrice t_{ij} et \mathcal{V}_{ijkl} qui dépendent de l'interaction choisie. Ces calculs sont présentés dans les sections Sec.2.4 et Sec.2.5 dans le cas d'une interaction relativiste par échange de mésons.

2.3 Théorie Hartree-Fock-Bogoluibov

2.3.1 Motivations

L'approximation HF est basée sur une hypothèse très simple de fonctions d'onde comme déterminant de Slater. Cependant, cette hypothèse mène à deux problèmes principaux de natures différentes, mais en lien très étroit :

- la théorie des perturbations associées aux hypothèses de l'approximation HF échoue à décrire les noyaux à couches ouvertes
- les résultats théoriques associés à des calculs HF ne permettent pas de rendre compte des résultats expérimentaux sur un grand nombre d'observables (oscillation des énergies de liaison en fonction de la nature pair-pair, pair-impair, impair-impair des noyaux, décalage des spectres d'excitations des noyaux miroirs, ...)

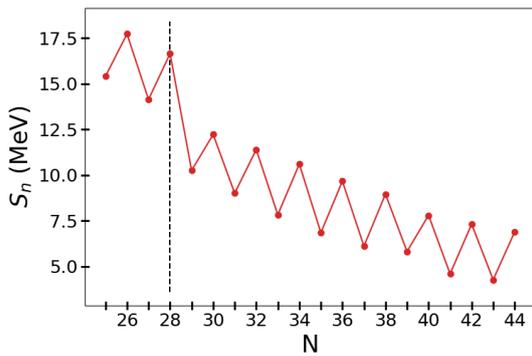
Le premier des problèmes énoncés ci-dessus se comprend facilement lorsque l'on essaie d'appliquer la théorie des perturbations sur un état HF. Si le potentiel résiduel est vraiment 'résiduel' dans le sens où les corrélations qu'il contient sont largement négligeables devant celles prises en compte dans le champ moyen, alors la théorie des perturbations devrait nous permettre d'introduire en partie ces corrélations résiduelles supplémentaires à moindre frais (auquel cas les corrections devraient rester faibles). En revanche, si ces corrections apparaissent comme étant du même ordre de grandeur, voire supérieure aux contributions du champ moyen, cela signifie que des corrélations importantes et fondamentales n'ont pas été prises en compte et sont donc manquantes au niveau champ moyen. Il sera alors nécessaire de modifier ce dernier pour prendre en compte ces corrélations supplémentaires.

Afin d'illustrer cette discussion, il est possible d'écrire simplement le premier ordre de la théorie des perturbations dans le cas d'un noyau à couche ouverte. On obtient alors une contribution de la forme

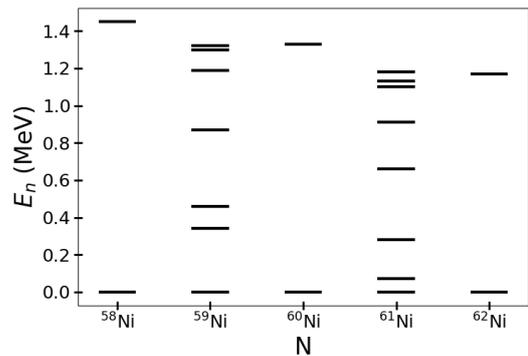
$$E = \mathcal{E} + \sum_{n>0} \frac{|\langle \phi_n^{HF} | \mathcal{V}_{res} | \phi_0^{HF} \rangle|^2}{\mathcal{E} - \mathcal{E}_n} \quad (2.30)$$

avec \mathcal{E} l'énergie du fondamental. Dans le cas précis d'un noyau à couche ouverte, le dénominateur $\mathcal{E} - \mathcal{E}_n$ peut prendre des valeurs très petites, voire nulles dans le cas où une sous-couche n'est pas remplie. La correction apportée au terme d'ordre 0 devient alors possiblement très grande (voire infinie) et la théorie des perturbations associées à ces états HF échoue donc à décrire ce type de noyau.

Le second problème énoncé ci-dessus concerne directement l'accord entre théorie et expérience. Un effet particulièrement visible et remarquable est celui de la différence d'énergie de liaison entre les noyaux pair-pair et les noyaux impair-impair (ou pair-impair, mais la différence est moins grande). Sur la Fig.2.2a sont représentées les énergies de séparation des neutrons $S_n = B(N, Z) - B(N - 1, Z)$ dans la chaîne isotopique du Nickel. On remarque alors une oscillation de cette énergie de séparation avec des pics hauts pour les noyaux pairs et des pics bas pour les noyaux impairs. Une différence de l'ordre du MeV est observée. Un autre effet remarquable est celui de la création d'un gap dans les spectres d'excitation de basse énergie comme montré sur la Fig.2.2b. Alors que plus d'un MeV sépare le niveau fondamental du premier état excité dans les noyaux pairs $^{58,60,62}\text{Ni}$, seulement quelques centaines de keV sont présents pour les impairs.



(a) Énergie de séparation des neutrons $S_n = B(N, Z) - B(N - 1, Z)$ dans la chaîne isotopique des Nickel. Données tirées de [NND].



(b) Spectre d'excitation de quelques isotopes du Nickel. Données tirées de [NND].

Afin d'expliquer ces différences et obtenir un cadre théorique sain, Bohr, Mottelson et Pines ont développé un modèle de superfluidité nucléaire[BMP58] en analogie avec la supraconductivité[BCS57]. De la même façon que deux électrons peuvent créer une paire de Cooper et ainsi faire gagner de l'énergie de liaison au système, les nucléons proches du niveau Fermi peuvent se rassembler par paires. Ainsi, étant donné que la création de paires permet de diminuer l'énergie du système en augmentant son énergie de liaison, les noyaux pair-pair posséderont une énergie de liaison plus importante expliquant alors les résultats de la Fig.2.2a. Une façon d'exciter un noyau revient alors à briser ces paires. Ainsi, dans des noyaux pair-pair où des paires de nucléons se forment facilement, une énergie minimale (un gap) égale à l'énergie de liaison de la paire est nécessaire pour exciter le système (gap non présent dans les noyaux impairs), expliquant la Fig.2.2b.

Il est important de remarquer que la création de paires de Cooper n'est pas un mécanisme qui apparaît dans tous les noyaux. En effet, il s'agit d'une compétition entre la différence d'énergie des niveaux à un corps et l'énergie apportée par une paire. Dans le cas où deux niveaux proches du niveau de Fermi sont à des énergies très

différentes, la création d'une paire ne sera pas énergétiquement favorable dans le sens où elle ne permettra pas de diminuer l'énergie du système et ne sera donc pas choisie comme la configuration fondamentale du système. C'est par exemple le cas des noyaux (doublement) magiques où la séparation entre le dernier état occupé et le premier état vide est très importante.

Ces corrélations d'appariement ne sont pas présentes au niveau Hartree-Fock signifiant qu'elles ont été négligées et sont donc comprises dans le terme d'interaction résiduelle \mathcal{V}_{res} . Afin de prendre en compte ces corrélations supplémentaires, il est donc nécessaire d'enrichir la fonction d'onde en changeant l'ansatz utilisée dans l'approximation champ moyen. Dans les sous-sections suivantes, le formalisme BCS (Bardeen–Cooper–Schrieffer) est tout d'abord introduit permettant une description simplifiée du phénomène d'appariement en liant étroitement avec la théorie de la supraconductivité telle qu'énoncée en 1957 [BCS57]. Puis le formalisme Bogoliubov sera introduit afin de généraliser les résultats de la théorie BCS.

2.3.2 Théorie BCS pour les systèmes nucléaires

L'approche BCS (Bardeen–Cooper–Schrieffer) permet d'inclure les corrélations de type particules-particules à moindre frais en modifiant légèrement la fonction d'onde du système. Cette fonction d'onde BCS [BCS57] prend la forme suivante ⁴

$$|\psi_{BCS}\rangle = \prod_{k>0} (u_k + v_k c_k^\dagger c_{\bar{k}}^\dagger) |0\rangle \quad (2.31)$$

où $c_k^\dagger c_{\bar{k}}^\dagger$ représente une paire de Cooper de nucléons composés de nucléons d'impulsions k et $-\bar{k}$ et de spins opposés avec $|\bar{k}\rangle$ correspondant à l'état renversé du temps de $|k\rangle$. Les paramètres u_k et v_k sont les inconnues du problème et sont déterminés de manière variationnelle. Il est de plus nécessaire d'imposer $\langle \psi_{BCS} | \psi_{BCS} \rangle = 1$ et donc

$$u_k^2 + v_k^2 = 1. \quad (2.32)$$

Il est alors possible de montrer que le nombre de particules dans le système s'écrit comme

$$N = \langle \hat{N} \rangle = \langle \psi_{BCS} | \sum_k c_k^\dagger c_k^\dagger | \psi_{BCS} \rangle = \sum_k v_k^2. \quad (2.33)$$

De la même façon, la variance du nombre de particules est non nulle et prend la forme

$$\Delta N = \langle \hat{N}^2 \rangle = N^2 + 2 \sum_k u_k v_k, \quad (2.34)$$

montrant que l'état BCS brise la conservation du nombre de particules. Ce phénomène peut être relié à une brisure spontanée d'une symétrie $U(1)$ et dont le paramètre d'ordre sera directement relié aux $\kappa_{kk}^* = \langle 0 | c_k^\dagger c_{\bar{k}}^\dagger | 0 \rangle$. Cette quantité n'est rien d'autre que la partie diagonale du tenseur d'appariement introduit de façon générale dans la section Sec.2.3.3.

4. Il est aussi possible d'écrire $|\psi_{BCS}\rangle = \mathcal{N} \exp \left\{ \sum_k x_k c_k^\dagger c_{\bar{k}}^\dagger \right\}$ avec \mathcal{N} une constante de normalisation et les x_i représentant les u_k et v_k .

La non-conservation du nombre de particules requiert de contraindre l'observable $N = \langle \hat{N} \rangle$ à une valeur fixée (égale au nombre de nucléons dans le noyau étudié). Pour ce faire, lors de la procédure variationnelle, un multiplicateur de Lagrange correspondant au potentiel chimique est ajouté au système $H \rightarrow H - \mu N$.

Il est alors possible d'introduire les états de quasi-particules (qp) BCS

$$b_k = u_k c_k - v_k c_{\bar{k}}^\dagger, \quad \forall k \geq 0 \quad (2.35)$$

avec comme convention $u_{\bar{k}} = u_k$ et $v_{\bar{k}} = -v_k$. On montre alors facilement que

$$b_k |\psi_{BCS}\rangle = b_{\bar{k}} |\psi_{BCS}\rangle = 0 \quad (2.36)$$

signifiant que les états de quasi-particules b_i ont comme vide l'état BCS (2.31). Ce constat permet dans le même temps d'écrire le vide de quasi-particules BCS comme

$$|\psi_{BCS}\rangle = \prod_{k \geq 0} b_k |0\rangle \quad (2.37)$$

Ce vide de qp BCS sera généralisé dans la section suivante 2.3.3 au vide de qp Bogoliubov.

En conclusion, les états qp de BCS apparaissent comme des excitations fermioniques associés à l'état BCS Eq.(2.31) qui en est le vide. En comparaison, les états HF étaient construits comme des déterminants de Slater $|\psi_{HF}\rangle = \prod_{i>0} c_i^\dagger |0\rangle$ où i ne parcouraient alors que les états occupés.

Les équations BCS peuvent être dérivées de manière variationnelle permettant alors d'écrire les facteurs d'occupations u et v comme

$$u_k = \frac{1}{2} \left[1 + \frac{\epsilon_k - \mu}{\sqrt{(\epsilon_k - \mu)^2 + \Delta_{k\bar{k}}^2}} \right] \quad (2.38)$$

$$v_k = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{\epsilon_k - \mu}{\sqrt{(\epsilon_k - \mu)^2 + \Delta_{k\bar{k}}^2}} \right] \quad (2.39)$$

où ϵ_k représente l'énergie de l'état k , μ le potentiel chimique et Δ le champ d'appariement dérivé à partir du tenseur d'appariement κ défini précédemment. Ce champ d'appariement Δ prend typiquement des valeurs comprises entre 0 MeV et quelques MeV. Ainsi, pour des niveaux tels que $\epsilon_k \gg \mu$ (ou dans le cas où le champ d'appariement est nul), $u_k \rightarrow 1$ et $v_k \rightarrow 0$. En revanche, autour du niveau de Fermi, les orbitales occupées peuvent s'étaler sur des orbitales vides auquel cas $u_k < 1$ et $v_k > 0$.

Le formalisme BCS présenté ici permet de rendre compte de la plupart des observations expérimentales qui mettaient en défaut la théorie HF. Il est cependant important de rappeler que, dans cette approche, le nombre de particules n'est plus conservée ce qui nous éloigne des systèmes physiques. Il est cependant possible de projeter les états BCS sur le bon nombre de particules afin de restaurer la symétrie de conservation du nombre de particules. Cette procédure n'est pas décrite ici et n'a pas été implémentée dans les travaux présentés dans ce manuscrit. Des détails sur cette méthode sont par exemple disponibles dans[DS10 ; She+21].

2.3.3 Formalisme de Bogoliubov

Il est possible de généraliser les transformations précédentes Eq.(2.35) à un cas beaucoup plus général où les opérateurs b précédents deviennent des combinaisons linéaires des opérateurs de création et annihilation [Bog58 ; BTŠ58]

$$\beta_\mu = \sum_n U_{\mu n}^* c_n + V_{\mu n}^* c_n^\dagger, \quad (2.40)$$

ou bien de façon matricielle

$$\begin{pmatrix} \beta \\ \beta^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U^\dagger & V^\dagger \\ V^T & U^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c \\ c^\dagger \end{pmatrix} = \mathcal{B}^\dagger \begin{pmatrix} c \\ c^\dagger \end{pmatrix} \quad (2.41)$$

où \mathcal{B} représente la matrice de Bogoliubov. Les opérateurs de qp β permettent alors de construire l'état de référence de notre théorie

$$|\psi_{HFB}\rangle = \prod_\nu \beta_\nu |0\rangle, \quad (2.42)$$

$$\beta_\mu |\psi_{HFB}\rangle = 0, \quad \forall \mu. \quad (2.43)$$

Les transformations de Bogoliubov étant linéaires, la condition $\mathcal{B}\mathcal{B}^\dagger = \mathcal{B}^\dagger\mathcal{B} = I$ doit être respectée. Cela impose en particulier les relations de commutation suivantes

$$\{\beta_\mu, \beta_\nu^\dagger\} = \delta_{\mu\nu} \quad (2.44a)$$

$$\{\beta_\mu, \beta_\nu\} = 0 \quad (2.44b)$$

qui peuvent à leur tour être retranscrites dans le langage des éléments U et V de la matrice de Bogoliubov

$$U^\dagger U + V^\dagger V = I \quad (2.45a)$$

$$UU^\dagger + V^*V^T = I \quad (2.45b)$$

$$U^T V + V^T U = 0 \quad (2.45c)$$

$$UV^\dagger + V^*U^T = 0 \quad (2.45d)$$

De la même façon que dans la théorie HF, il est maintenant possible de définir la densité et une nouvelle quantité appelée tenseur d'appariement

$$\rho_{ij} = \langle \psi_{HFB} | c_j^\dagger c_i | \psi_{HFB} \rangle = \rho_{ij}^*, \quad (2.46)$$

$$\kappa_{ij} = \langle \psi_{HFB} | c_j c_i | \psi_{HFB} \rangle = -\kappa_{ij}^*. \quad (2.47)$$

Le tenseur d'appariement est ici non nul, car le vide HFB $|\psi_{HFB}\rangle$ est différent du vide HF. $\kappa_{\alpha\beta}$ peut alors être interprétée comme le paramètre d'ordre de la brisure de la symétrie $U(1)$ correspondant à la conservation du nombre de particules. Ces quantités peuvent être redéfinies en terme des éléments de la matrice de Bogoliubov U et V comme

$$\rho_{ij} = \sum_\mu V_{\mu i}^* V^T \mu j = (V^* V^T)_{ij} \quad (2.48)$$

$$\kappa_{ij} = \sum_\mu V_{\mu i}^* U^T \mu j = (V^* U^T)_{ij} \quad (2.49)$$

Il est alors possible de montrer que $\rho^2 \neq \rho$

$$\rho^2 - \rho = V^* V^T [V^* V^T - I] = -V^* V^T U U^\dagger = V^* U^T V U^\dagger = \kappa \kappa^* \quad (2.50)$$

où les relations Eq.(2.45b) et Eq.(2.45c) ont été utilisées. Une nouvelle matrice généralisée \mathcal{R} peut alors être introduite

$$\mathcal{R} = \begin{pmatrix} \rho & \kappa \\ -\kappa^* & 1 - \rho^* \end{pmatrix}. \quad (2.51)$$

permettant d'avoir $\mathcal{R}^2 = \mathcal{R}$. De la même façon que précédemment, on écrira ici notre fonctionnelle finale comme la somme de quatre fonctionnelles, dépendant cette fois de la matrice densité généralisée

$$\mathcal{E}^{HFB}[\mathcal{R}] = T[\mathcal{R}] + E_H[\mathcal{R}] + E_{XC}[\mathcal{R}] + E_A[\mathcal{R}] \quad (2.52)$$

où le dernier terme prend en compte l'appariement.

2.3.4 Équations HFB

En procédant de manière équivalente à la dérivation des équations HF i.e. en minimisant la quantité

$$\mathcal{F} = \mathcal{E}^{HFB} - \Lambda(\rho^2 - \rho) - \mu N, \quad (2.53)$$

on obtient les équations HFB

$$[\mathcal{H}, \mathcal{R}] = 0 \quad (2.54)$$

$$(2.55)$$

où l'Hamiltonien du système \mathcal{H} est maintenant défini comme

$$\mathcal{H}[\mathcal{R}] = \frac{\delta \mathcal{E}^{HFB}[\mathcal{R}]}{\delta \mathcal{R}}. \quad (2.56)$$

Les équations HFB peuvent alors être réécrites sous forme matricielle

$$\begin{pmatrix} h - \lambda_1 & \Delta \\ -\Delta^* & -h^* + \lambda_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_k \\ V_k \end{pmatrix} = E_k \begin{pmatrix} U_k \\ V_k \end{pmatrix} \quad (2.57)$$

avec h le champ de Dirac $h = \frac{\delta \mathcal{E}^{HFB}}{\delta \rho}$ et Δ le champ d'appariement $\Delta^{(*)} = \frac{\delta \mathcal{E}^{HFB}}{\delta \kappa^{(*)}}$.

Les fonctions d'ondes recherchées sont donc les U et V qui peuvent être représentées, dans le cas relativiste traité ici, à l'aide de spineur de grande et petite composante f et g comme

$$U_k = \begin{pmatrix} f_k^U \\ i g_k^U \end{pmatrix}, \quad V_k = \begin{pmatrix} f_k^V \\ i g_k^V \end{pmatrix}. \quad (2.58)$$

Le schéma de résolution est présenté à la fin de ce chapitre en section Sec.2.7.

2.4 Équations du mouvement

Dans les deux sections précédentes ont été présentées les approximations mises en œuvre afin de traiter le problème à N-corps quantique. Maintenant que le schéma de résolution a été mis en place, il nous faut à présent dériver l'Hamiltonien du système. Cet Hamiltonien sera basé sur les Lagrangiens présentés dans le chapitre précédent (interaction par échange de mésons Sec.1.3.3 et interaction de portée nulle Sec.1.3.4) mais seules les dérivations concernant l'interaction par échange de mésons sont présentées ici. On rappelle ce Lagrangien par commodité :

$$\begin{aligned} \mathcal{L} = & \bar{\psi} \left[i\gamma^\mu \partial_\mu - M - g_\sigma \sigma - g_\omega \gamma^\mu \omega_\mu - g_\rho \gamma^\mu \vec{\rho}_\mu \cdot \vec{\tau} - e\gamma_\mu A^\mu \frac{1 - \tau_3}{2} \right] \psi \\ & + \frac{1}{2} (\partial_\mu \sigma \partial^\mu \sigma - m_\sigma^2 \sigma^2) - \frac{1}{4} (\Omega_{\mu\nu} \Omega^{\mu\nu} - m_\omega^2 \omega_\mu \omega^\mu) - \frac{1}{4} (\vec{\mathcal{R}}_{\mu\nu} \cdot \vec{\mathcal{R}}^{\mu\nu} - m_\rho^2 \vec{\rho}_\mu \cdot \vec{\rho}^\mu) \\ & - \frac{1}{4} \mathcal{F}_{\mu\nu} \mathcal{F}^{\mu\nu} \end{aligned} \quad (2.59)$$

où on rappelle que les g_i sont pris comme dépendant de la densité vectorielle $\rho_V = \sqrt{j_\mu j^\mu}$ avec le courant fermionique défini comme $j_\mu = \bar{\psi} \gamma_\mu \psi$. Les équations du mouvement sont alors dérivées via les équations d'Euler-Lagrange pour les parties fermionique et bosonique.

2.4.1 Partie fermionique

La partie fermionique des équations du mouvement peut être écrite sous la forme suivante

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \bar{\psi}} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \rho_V} \frac{\partial \rho_V}{\partial \bar{\psi}} = \partial_\mu \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \partial_\mu \bar{\psi}} \quad (2.60)$$

où le second terme dans le membre de gauche provient de la dépendance en densité du Lagrangien. Ces équations du mouvement mènent directement à l'équation de Dirac suivante

$$(\gamma^\mu (i\partial_\mu + \Sigma_\mu^V + \Sigma_\mu^R) - M + \Sigma^S) \psi = 0 \quad (2.61)$$

avec les self-énergies définies comme

$$\Sigma_\mu^V = e \frac{1 + \tau_3}{2} A_\mu + g_\omega \omega_\mu + g_\rho \vec{\rho}_\mu \cdot \vec{\tau} \quad (2.62a)$$

$$\Sigma_\mu^R = \frac{j_\mu}{\rho_V} \left[\frac{\partial g_\sigma}{\partial \rho_V} \bar{\psi} \sigma \psi + \frac{\partial g_\omega}{\partial \rho_V} \bar{\psi} \gamma^\mu \omega_\mu \psi + \frac{\partial g_\rho}{\partial \rho_V} \bar{\psi} \gamma^\mu \vec{\rho}_\mu \cdot \vec{\tau} \psi \right] \quad (2.62b)$$

$$\Sigma^S = g_\sigma \sigma \quad (2.62c)$$

On introduit également la masse effective de Dirac $M^* = M - \Sigma^S$.

2.4.2 Partie mésonique

Les équations du mouvement pour les mésons s'écrivent comme

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi} = \partial_\mu \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \partial_\mu \phi} \quad (2.63)$$

où $\phi = \sigma, \omega, \rho, A$. On obtient donc les quatre équations du mouvement suivantes

$$(\square + m_\sigma^2) \sigma = -g_\sigma \bar{\psi} \psi \quad (2.64a)$$

$$\partial_\mu \Omega^{\mu\nu} + m_\omega^2 \omega^\nu = g_\omega \bar{\psi} \gamma^\nu \psi \quad (2.64b)$$

$$\partial_\mu \vec{R}^{\mu\nu} + m_\rho^2 \vec{\rho}^\nu = g_\rho \bar{\psi} \gamma^\nu \vec{\tau} \psi \quad (2.64c)$$

$$\partial_\mu F^{\mu\nu} = e \bar{\psi} \gamma^\nu \frac{1 + \tau_3}{2} \psi \quad (2.64d)$$

Il est alors possible d'imposer la jauge de Coulomb $\partial_\mu A^\mu$ pour réécrire les équations de Proca et Maxwell sous forme d'équations de Klein-Gordon inhomogènes comme

$$(\square + m_\sigma^2) \sigma = -g_\sigma \bar{\psi} \psi \quad (2.65a)$$

$$(\square + m_\omega^2) \omega^\nu = g_\omega \bar{\psi} \gamma^\nu \psi \quad (2.65b)$$

$$(\square + m_\rho^2) \vec{\rho}^\nu = g_\rho \bar{\psi} \gamma^\nu \vec{\tau} \psi \quad (2.65c)$$

$$\square A^\nu = e \bar{\psi} \gamma^\nu \frac{1 + \tau_3}{2} \psi \quad (2.65d)$$

2.5 Hamiltonien du système

Comme introduit aux cours des sections précédentes, nous souhaitons obtenir une fonctionnelle de la densité $\mathcal{E}[\rho]$. Pour ce faire, il est commode et possible de passer dans une représentation Hamiltonienne de notre système. Cette transformation peut être réalisée facilement en appliquant une transformée de Legendre au Lagrangien précédent pour obtenir une densité Hamiltonienne i.e.

$$\mathcal{H} = \sum_\phi \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \partial_0 \phi} \partial_0 \phi - \mathcal{L} \quad (2.66)$$

avec $\phi = \psi, \sigma, \omega, \rho, A$.

2.5.1 Partie fermionique

L'impulsion pour la partie fermionique s'écrit simplement

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \partial_0 \psi} \partial_0 \psi = i \gamma^0 \bar{\psi} = i \psi^\dagger \quad (2.67)$$

La densité Hamiltonienne correspondante s'écrit alors

$$\mathcal{H}_\psi = \bar{\psi} [-i \gamma \cdot \nabla + M] \psi \quad (2.68)$$

2.5.2 Partie mésonique

Concernant les parties mésoniques, les impulsions s'écrivent

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \partial_0 \sigma} \partial_0 \sigma = (\partial_0 \sigma)^2 \quad (2.69a)$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \partial_0 \omega_\mu} \partial_0 \omega_\mu = -\Omega^{0i} \partial_0 \omega_i \quad (2.69b)$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \partial_0 \vec{\rho}_\mu} \partial_0 \vec{\rho}_\mu = -\vec{\mathcal{R}}^{0i} \partial_0 \vec{\rho}_i \quad (2.69c)$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \partial_0 A_\mu} \partial_0 A_\mu = -F^{0i} \partial_0 A_i \quad (2.69d)$$

En utilisant les équations du mouvement précédemment dérivées (2.65a)-(2.65d), les densités Hamiltonienne prennent les formes suivantes

$$\mathcal{H}_\sigma = \frac{1}{2} [\partial_0 \sigma \partial_0 \sigma + (\nabla \sigma)^2 + m_\sigma^2 \sigma^2] = -\frac{1}{2} g_\sigma \bar{\psi} \sigma \psi \quad (2.70a)$$

$$\mathcal{H}_\omega = -\frac{1}{2} [-\Omega^{0i} \partial_0 \omega_i + \Omega^{i\mu} \partial_i \omega_\mu - m_\omega^2 \omega^2] = -\frac{1}{2} g_\omega \bar{\psi} \gamma^\mu \omega_\mu \psi \quad (2.70b)$$

$$\mathcal{H}_\rho = -\frac{1}{2} [-\vec{\mathcal{R}}^{0i} \partial_0 \vec{\rho}_i + \vec{\mathcal{R}}^{i\mu} \partial_i \vec{\rho}_\mu - m_\rho^2 (\vec{\rho} \cdot \vec{\tau})^2] = -\frac{1}{2} g_\rho \bar{\psi} \gamma^\mu \vec{\rho}_\mu \cdot \vec{\tau} \psi \quad (2.70c)$$

$$\mathcal{H}_A = -\frac{1}{2} [-F^{0i} \partial_0 A_i + F^{i\mu} \partial_i A_\mu] = -\frac{1}{2} e \bar{\psi} \gamma^\mu A_\mu \frac{1 - \tau_3}{2} \psi \quad (2.70d)$$

2.5.3 Partie interaction

La dernière partie de l'Hamiltonien du système provient des termes d'interaction entre nucléons et mésons. Ce terme prend la forme

$$\mathcal{H}_{int} = \bar{\psi} \left[g_\sigma \sigma + g_\omega \gamma_\mu \omega^\mu + g_\rho \gamma_\mu \vec{\rho}^\mu \cdot \vec{\tau} + e \gamma_\mu A^\mu \frac{1 - \tau_3}{2} \right] \psi \quad (2.71)$$

Il est intéressant de remarquer les similarités entre cette partie interaction et la partie mésonique qui ne diffèrent, finalement, que d'un facteur $-\frac{1}{2}$.

2.5.4 Hamiltonien final

Pour obtenir l'Hamiltonien du système, il suffit d'écrire

$$\begin{aligned} H &= \int d^3 x [\mathcal{H}_\psi + \mathcal{H}_\sigma + \mathcal{H}_\omega + \mathcal{H}_\rho + \mathcal{H}_A + \mathcal{H}_{int}] \\ &= \int d^3 x \bar{\psi} [-i \gamma^\mu \cdot \nabla + M] \psi + \frac{1}{2} \int d^3 x \bar{\psi} \left[g_\sigma \sigma + g_\omega \gamma_\mu \omega^\mu + g_\rho \gamma_\mu \vec{\rho}^\mu \cdot \vec{\tau} + e \gamma_\mu A^\mu \frac{1 - \tau_3}{2} \right] \psi \end{aligned} \quad (2.72)$$

Il est alors possible d'exprimer cet Hamiltonien en fonction des degrés de liberté nucléoniques seulement en utilisant les équations du mouvement des champs mésoniques et en les inversant pour écrire

$$\phi(x) = \int d^4 y D_\phi(x, y) s_\phi(y) \quad (2.73)$$

avec $\phi = \sigma, \omega, \rho, A$, D_ϕ le propagateur mésonique et s_ϕ le terme de source (courant fermionique). On écrit alors

$$H = \int d^3x \bar{\psi} [-i\boldsymbol{\gamma}^\mu \cdot \boldsymbol{\nabla} + M] \psi + \sum_\phi \frac{1}{2} \int d^3x d^4y \bar{\psi}(x) \bar{\psi}(y) \Gamma_\phi(x, y) D_\phi(x, y) \psi(x) \psi(y) \quad (2.74)$$

où les vertex d'interaction Γ_ϕ prennent les formes suivantes

$$\Gamma_\sigma(x, y) = -g_\sigma(x) g_\sigma(y) \quad (2.75a)$$

$$\Gamma_\omega(x, y) = [g_\omega(x) \boldsymbol{\gamma}_\mu(x)] [g_\omega(y) \boldsymbol{\gamma}^\mu(y)] \quad (2.75b)$$

$$\Gamma_\rho(x, y) = [g_\rho(x) \boldsymbol{\gamma}_\mu(x) \vec{\tau}(x)] [g_\rho(y) \boldsymbol{\gamma}^\mu(y) \vec{\tau}(y)] \quad (2.75c)$$

$$\Gamma_A(x, y) = e^2 \left[\boldsymbol{\gamma}_\mu(x) \frac{1 - \tau_3(x)}{2} \right] \left[\boldsymbol{\gamma}^\mu(y) \frac{1 - \tau_3(y)}{2} \right] \quad (2.75d)$$

On remarque dans Eq.(2.74) un premier terme cinétique et un second terme d'interaction.

2.5.5 Quantification

La dernière étape dans la construction de notre fonctionnelle est la quantification de l'Hamiltonien. Les opérateurs spinoriels se quantifient de la manière suivante

$$\psi(x) = \sum_i \left[f_i(x) e^{-i\epsilon_i t} c_i + g_i(x) e^{i\epsilon_i t} d_i^\dagger \right] \stackrel{no-sea}{=} \sum_i f_i(x) e^{-i\epsilon_i t} c_i \quad (2.76)$$

$$\bar{\psi}(x) = \sum_i \left[f_i^\dagger(x) e^{i\epsilon_i t} c_i^\dagger + g_i^\dagger(x) e^{-i\epsilon_i t} d_i \right] \stackrel{no-sea}{=} \sum_i f_i^\dagger(x) e^{i\epsilon_i t} c_i^\dagger \quad (2.77)$$

où l'approximation no-sea a été utilisée. Cette approximation consiste à négliger les états de la mer de Dirac c'est-à-dire les solutions $\epsilon < -mc^2$. Cela permet de ne pas tenir compte des problèmes de régularisation dus aux contributions divergentes de certains diagrammes incluant des boucles nucléons-antinuéons. Cette approximation fait sens ici où elle peut être interprétée comme une méthode de soustraction[F^TS95 ; F^PS02]. La principale conséquence sera de négliger les opérateurs de création et annihilation des anti-nuéons (d_i^\dagger et d_i). Il est alors possible de réécrire l'Hamiltonien sous sa forme quantifiée

$$\begin{aligned} H_0 &= \sum_{ij} c_i^\dagger c_j \int d^3x \bar{f}_j [-i\boldsymbol{\gamma} \boldsymbol{\nabla} + M] f_i \\ &\quad + \sum_\phi \frac{1}{2} \sum_{ijkl} c_i^\dagger c_j^\dagger c_l c_k \int d^3x d^4y \bar{f}_i(x) \bar{f}_j(y) \Gamma_\phi(x, y) D_\phi(x, y) f_l(y) f_k(x) \\ &= \sum_{i,j} t_{ij} c_i^\dagger c_j + \sum_\phi \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \mathcal{V}_{ijkl}^\phi c_i^\dagger c_j^\dagger c_l c_k \\ H_0 &= T + \sum_\phi V_\phi \end{aligned} \quad (2.78)$$

Cet Hamiltonien va alors pouvoir être utilisé dans le cadre des approximations mises en place dans les sections précédentes afin de dériver les équations RMF et RHB présentées dans la section suivante.

2.6 Équations RMF et RHB

Les schémas d'approximations HF et HFB présentés dans les sections 2.2 et 2.3 peuvent maintenant être combinés avec les résultats dérivés dans les sections 2.4 et 2.5. Avant de procéder à ces dérivations, des approximations supplémentaires sont mises en place afin de faciliter la résolution du problème. En particulier, l'approximation Hartree est discutée où le terme de Fock est négligé ainsi que d'autres approximations supplémentaires sont discutées dans la suite de cette section.

2.6.1 Approximation Hartree

Il est important de revenir ici sur les deux termes de potentiel qui apparaissent dans l'énergie HF Eq.(2.24) $\sum_{i,j,k,l} \mathcal{V}_{ijkl} (\rho_{ki}\rho_{lj} - \rho_{li}\rho_{kj})$. Nous avons vu précédemment que, dans l'approximation HF, la base qui minimise l'énergie de notre système est celle où ρ et h sont diagonales i.e. $\rho_{ij} = \delta_{ij}$ pour les configurations trou-trou et $\rho_{ij} = 0$ pour les configurations particule-particule. Il est donc facile de réécrire la partie potentielle de l'énergie HF comme

$$\sum_{i,j,k,l} \mathcal{V}_{ijkl} (\rho_{ki}\rho_{lj} - \rho_{li}\rho_{kj}) = \sum_{i,j,k,l} V_{ijkl} n_i n_j (\delta_{ik}\delta_{lj} - \delta_{li}\delta_{kj}) = \sum_{ij} n_i n_j V_{ijij} - \sum_{ij} n_i n_j V_{ijji} \quad (2.79)$$

Il est alors possible de détailler les expressions de ces deux composantes en utilisant Eq.(2.78)

$$\begin{aligned} V_\phi^H &= \sum_{ij} n_i n_j V_{ijij} = \frac{1}{2} \sum_{ij} \int d^3x d^4y \bar{f}_i(x) \bar{f}_j(y) \Gamma_\phi(x,y) D_\phi(x,y) f_j(y) f_i(x) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{ij} \int d^3x d^4y \bar{f}_i(x) \Gamma_\phi(x) f_i(x) D_\phi(x,y) \bar{f}_j(y) \Gamma_\phi(y) f_j(y) \\ V_\phi^H &= \frac{1}{2} \sum_i \int d^3x \bar{f}_i(x) \Gamma_\phi(x) \langle \phi \rangle f_i(x) \end{aligned} \quad (2.80)$$

où $\langle \phi \rangle$ désigne la valeur moyenne du champ mésonique obtenue en intégrant sur la coordonnée y et où l'on a utilisé Eq.(2.73) pour faire apparaître le champ mésonique. Cette contribution est appelée contribution de Hartree (contribution directe) et on voit dans Eq.(2.80) que cette contribution prend la forme d'une intégrale simple.

La seconde contribution, dite d'échange ou terme de Fock, est bien plus compliquée à traiter

$$V_\phi^F = \sum_{ij} n_i n_j V_{ijji} = \frac{1}{2} \sum_{ij} \int d^3x d^3y \bar{f}_i(x) \Gamma_\phi(x) f_j(x) D_\phi(x,y) \bar{f}_j(y) \Gamma_\phi(y) f_i(y) \quad (2.81)$$

En raison de la forme $D_\phi(x,y) \bar{f}_j(y) \Gamma_\phi(y) f_i(y)$, il n'est cette fois plus possible de faire apparaître le champ mésonique et d'utiliser Eq.(2.73). L'intégrale sur la coordonnée y doit donc être effectuée numériquement à chaque itération, rendant l'utilisation de la

formulation avec le terme de Fock beaucoup plus lourde numériquement dans ce cadre relativiste.

Dans la suite, le terme de Fock sera donc négligé et seule la contribution de Hartree sera considérée. Il est important de rappeler ici que l'approximation Hartree ne revient pas à négliger toutes les contributions du terme de Fock. En effet, la fonctionnelle étant ajustée sur des données expérimentales, les contributions du terme de Fock seront partiellement absorbées dans les différents paramètres de la fonctionnelle. Il a été montré que la description des propriétés des noyaux dans ce cadre relativiste sans terme de Fock reste très satisfaisante (voir par exemple [Vre+05]). Cependant, il est possible de montrer que certains effets restent impossibles à décrire sans le terme de Fock (voir par exemple [LVM06; Lon+07; Lon+10]). Ainsi, dans l'approximation de Hartree, la fonctionnelle prend la forme simplifiée suivante

$$\mathcal{E}^{RMF}[\rho] = T[\rho] + E_H[\rho] \quad (2.82)$$

où seules la partie cinétique et la contribution de Hartree sont prises en compte. On parle généralement de formulation RMF pour champ moyen relativiste (Relativistic Mean Field).

De la même façon, lorsque les corrélations d'appariement sont prise en compte, le terme de Fock sera négligé et la fonctionnelle prendra donc la forme suivante

$$\mathcal{E}^{RHB}[\mathcal{R}] = T[\mathcal{R}] + E_H[\mathcal{R}] + E_A[\mathcal{R}] \quad (2.83)$$

où E_A représente les corrélations d'appariement et on parle de la formulation Hartree-Bogoliubov relativiste (RHB pour Relativistic Hartree-Bogoliubov).

2.6.2 Autres approximations

Avant de procéder à la dérivation de toutes les équations nécessaires à la résolution des équations RMF et RHB, certaines approximations sont mises en place. Tout d'abord, dans les travaux présentés ici, seuls les noyaux pair-pair ont été étudiés. Or ces systèmes sont invariants par renversement du sens du temps ce qui implique l'annulation des parties spatiales (au niveau Hartree) des différentes quantités vectorielles présentes ici (4-courants dans les sources, 4-vecteur méson et 4-vecteur électromagnétique). Une deuxième approximation revient à considérer l'approximation statique des systèmes étudiés et donc $\partial_0 X = 0$ où X représente n'importe quelle quantité (champs, position, ...). De plus, au niveau Hartree, seul la composante τ_3 de l'isospin contribue de sorte que $\vec{\phi} \cdot \vec{\tau} = \phi_3 \tau_3$. Ainsi, dans la suite, nous faisons les changements de notations suivants

$$\omega^\mu \rightarrow \omega \quad (2.84)$$

$$\vec{\rho}^\mu \rightarrow \rho_3 \quad (2.85)$$

$$A^\mu \rightarrow A \quad (2.86)$$

La dernière approximation utilisée ici est l'approximation no-sea et a déjà été présentée précédemment dans la section Sec.2.5.5.

2.6.3 Équations RMF

Sous ces différentes approximations, l'équation HF Eq.(2.29) peut alors se réécrire sous une forme plus pratique à utiliser qui correspond, dans le cadre relativiste utilisé, à l'équation RMF suivante

$$[-i\boldsymbol{\alpha}\cdot\nabla + \beta M^*(\mathbf{r}) + (V(\mathbf{r}) + \Sigma^R(\mathbf{r}))] f_i(\mathbf{r}) = \epsilon_i f_i(\mathbf{r}) \quad (2.87)$$

avec

- $M^*(\mathbf{r}) = M - S(\mathbf{r})$ la masse de Dirac (masse effective)
- les potentiels scalaire ($S(\mathbf{r})$) et vectoriel ($V(\mathbf{r})$) sont définis par

$$S(\mathbf{r}) = g_\sigma(\rho_v) \sigma(\mathbf{r}) \quad (2.88)$$

$$V(\mathbf{r}) = g_\omega(\rho_v) \omega(\mathbf{r}) + g_\rho(\rho_v) \rho_3(\mathbf{r}) \tau_3 + \frac{1 - \tau_3}{2} eA(\mathbf{r}) \quad (2.89)$$

- le potentiel de réarrangement Σ^R provient de la dépendance en densité des constantes de couplage qui introduisent un terme supplémentaire dans les équations du mouvement fermioniques

$$\Sigma^R(\mathbf{r}) = \frac{\partial g_\sigma}{\partial \rho_v} \rho_s(\mathbf{r}) \sigma(\mathbf{r}) + \frac{\partial g_\omega}{\partial \rho_v} \rho_v(\mathbf{r}) \omega(\mathbf{r}) + \frac{\partial g_\rho}{\partial \rho_v} \rho_{tv}(\mathbf{r}) \rho_3(\mathbf{r}) \quad (2.90)$$

- les densités scalaire (ρ_s), vectorielle (ρ_v), isovectorielle (ρ_{tv}) et de Coulomb (de protons ρ_c) qui interviennent dans la partie de réarrangement et dans les sources des équations de KG sont définies comme

$$\rho_s(\mathbf{r}) = \sum_i \bar{f}_i(\mathbf{r}) f_i(\mathbf{r}) \quad (2.91a)$$

$$\rho_v(\mathbf{r}) \equiv j^0(\mathbf{r}) = \sum_i \bar{f}_i(\mathbf{r}) \gamma^0 f_i(\mathbf{r}) \quad (2.91b)$$

$$\rho_{tv}(\mathbf{r}) \equiv j_{t3}^0(\mathbf{r}) = \sum_i \bar{f}_i(\mathbf{r}) \gamma^0 \tau_3 f_i(\mathbf{r}) \quad (2.91c)$$

$$\rho_c(\mathbf{r}) \equiv j_C^0(\mathbf{r}) = \sum_i \bar{f}_i(\mathbf{r}) \gamma^0 \frac{1 - \tau_3}{2} f_i(\mathbf{r}) \quad (2.91d)$$

Cette équation RMF doit être associée aux équations du mouvement mésonique Eq.((2.65a)-(2.65d)) qui se réécrivent (après la prise en compte des approximations discutées précédemment Sec.2.6.2)

$$(-\Delta + m_\sigma^2) \sigma(\mathbf{r}) = -g_\sigma(\mathbf{r}) \rho_s(\mathbf{r}) \quad (2.92a)$$

$$(-\Delta + m_\omega^2) \omega(\mathbf{r}) = g_\omega(\mathbf{r}) \rho_v(\mathbf{r}) \quad (2.92b)$$

$$(-\Delta + m_\rho^2) \rho_3(\mathbf{r}) = g_\rho(\mathbf{r}) \rho_{tv}(\mathbf{r}) \quad (2.92c)$$

$$-\Delta A(\mathbf{r}) = e \rho_c(\mathbf{r}) \quad (2.92d)$$

Il est intéressant de remarquer dès maintenant que, de la même façon que pour la DFT, un système d'équations auto-cohérente a été obtenu. En effet, la densité permet de calculer les différents champs (Eq.(2.92a-2.92d)) et ainsi de diagonaliser Eq.(2.87)

pour obtenir les énergies ϵ_i et états propres f_i . Ces mêmes f_i sont nécessaires au calcul de la densité, comme indiqué par Eq.(2.91b). Le système d'équations sera ainsi résolu de manière itérative jusqu'à un critère de convergence défini à l'avance. Des détails supplémentaires sur la résolution numérique des sets d'équations Eq.(2.87) et Eq.(2.92a-2.92d) est discutée à la fin de ce chapitre en section Sec.2.7.

2.6.4 Équations RHB

La généralisation au cas superfluide se fait facilement étant donné que la partie Hartree de l'interaction est inchangée i.e. l'hamiltonien h de Dirac est identique dans les approches RMF et RHB. La seule modification à apporter au niveau Hartree concerne la façon dont seront calculées les densités présentes dans les sources des équations de KG. Il suffit d'effectuer le remplacement $f_i \rightarrow V_i$ dans les équations Eq.(2.91a-2.91d).

La partie qui reste à déterminer est la partie gouvernant l'appariement. En effet, jusqu'ici nous n'avons traité que le canal d'interaction particules-trous à travers le Lagrangien phénoménologique par échange de mésons (ou par interaction de contact). Il est possible de dériver directement une interaction dans le canal particule-particule. Avant de discuter la forme que peut prendre cette interaction, il est intéressant de revenir sur la nature de l'appariement dans les systèmes nucléaires. Nous avons vu précédemment que, lorsque deux nucléons se retrouvent proches du niveau de Fermi, une configuration énergétiquement favorable apparaît comme la création d'une paire nucléon-nucléon. Dans la plupart des noyaux, le nombre de protons et neutrons étant assez différent, la création de paires n'aura lieu qu'entre nucléons de même nature (i.e. proton-proton ou neutron-neutron). Cependant, une paire de type proton-neutron reste envisageable[FM14]. Ce cas spécifique ne sera pas pris en compte ici aux vues des difficultés apportées par ce type de corrélation[BHR03].

En se contentant donc de décrire un appariement entre nucléons de même nature, il est possible d'obtenir un potentiel d'appariement relativiste en considérant, par exemple, une interaction de contact[SR02]. La structure de Lorentz peut alors être étudiée et il apparaît alors que l'utilisation d'un champ d'appariement non-relativiste permet, à moindre coût, de décrire les principales propriétés des noyaux⁵[SR02 ; Vre+05]. Dans la suite, une interaction non-relativiste dans le canal particule-particule sera donc utilisée.

Il existe alors plusieurs implémentations possibles : une force d'appariement type Gogny[Gon+96] ou une interaction séparable[Dug04 ; TMR09b ; TMR09c ; TMR09a]. La première de ces possibilités introduit un champ d'appariement non-local qui complexifie de manière non négligeable la résolution des équations RHB. La seconde introduit des divergences si un paramètre de coupure en énergie n'est pas introduit et risque donc d'introduire par la même occasion des dépendances dans ce seuil de coupure. Cependant, aux vues des résultats équivalents obtenus dans ces deux implémentations, le choix est fait dans la suite d'utiliser une force d'appariement séparable dans l'espace

5. Cette simplification est rendue possible par les faibles valeurs du champ d'appariement mélangeant les petite et grande composantes des spineurs.

des impulsions[[TMR09b](#); [TMR09c](#); [TMR09a](#)]. Cette force prend la forme suivante

$$\langle k|V^{1S_0}|k'\rangle = -Gp(k)p(k') \quad (2.93)$$

avec un choix Gaussien pour la fonction de poids $p(k) = \exp -a^2k^2$. Ce champ d'appariement introduit donc deux nouveaux paramètres dans notre fonctionnelle : la force d'appariement G et la portée a .

2.7 Aspects numériques

2.7.1 Résolution des équations RHB

Les équations RHB (ou RMF) présentées précédemment sont des équations auto-cohérentes qui peuvent être résolues de façon itérative. En effet, nous avons vu que pour obtenir les fonctions d'onde du système, il était nécessaire de diagonaliser la matrice Dirac-Bogoliubov. Or l'expression de cette matrice dépend explicitement de la densité vectorielle ρ_V qui est elle-même calculée à partir des fonctions d'onde ($\rho_{ij} = (V^*V^T)_{ij}$). La résolution de ces équations se passe donc en plusieurs étapes :

$$V, S \xrightarrow[\text{de Dirac}]{\text{Equation}} \begin{pmatrix} U_k \\ V_k \end{pmatrix}, E_k \rightarrow \rho \xrightarrow[\text{de KG}]{\text{Equation}} \phi \rightarrow V_{\text{new}}, S_{\text{new}} \quad (2.94)$$

où V et S représentent les potentiels scalaires et vecteurs, ρ la densité à 1-corps et ϕ les différents champs mésoniques et le champ électromagnétique. L'itération se fait via un algorithme de Broyden[[Bar+08](#)] qui mélange les éléments de matrice calculés aux itérations précédentes avec les nouveaux éléments de matrice.

Les potentiels d'entrées initiaux peuvent être pris égaux à des potentiels de Wood-Saxon ou bien être rechargé d'anciens calculs convergés. Nous verrons, en particulier dans le chapitre 6, que la réutilisation d'anciens calculs convergés permet d'accélérer grandement la résolution numérique.

Le critère de convergence est donné en fonction des différences entre la densité à l'étape $i-1$ et la densité à l'étape i . Si cette différence est plus faible qu'un paramètre ϵ , le calcul est considéré comme convergé ($|\rho_i - \rho_{i-1}| < \epsilon$). En pratique, d'autres quantités que la densité peuvent être utilisées pour définir un critère de convergence (la valeur des champs, l'hamiltonien, ...).

Dans la pratique, les spineurs sont développés sur une base d'oscillateur harmonique. Dans le cas où la symétrie sphérique est imposée, une base d'harmonique sphérique est choisie. Dans le cas d'une symétrie axiale, l'expansion est faite sur une base cylindrique. Des détails sur ces dérivations se trouvent en annexes [B.1](#) et [B.2](#).

2.7.2 Calculs contraints

La théorie RHB présentée ici permet, de façon variationnelle, d'obtenir des quantités relatives à l'état fondamental du système i.e. l'état qui minimise l'énergie de notre système sous réserve du respect de certaines contraintes physiques comme l'idempotence de

\mathcal{R} et la valeur finale du nombre moyen de particules N . Ces deux contraintes physiques que l'on a imposé au système nous ont permis de fixer certaines quantités en ajoutant des paramètres de Lagrange au système. Il est alors possible d'introduire des contraintes supplémentaires afin d'étudier le système autour de son fondamental. Ces corrélations supplémentaires ne peuvent pas être étudiées directement au niveau champ moyen (voir Chap.5), mais il reste possible d'imposer une forme particulière au noyau, une valeur de rayon, d'appariement, ... au niveau champ moyen. En contraignant le système à avoir certaines caractéristiques, l'énergie de cette configuration particulière sera, par définition, supérieure ou égale à celle de l'état fondamental. Il est alors possible d'étudier les propriétés de ces états contraints ce qui peut permettre de comprendre plus en détails de nombreux phénomènes comme l'agrégation nucléaire (voir Chap.3), la radioactivité (voir Chap.6), ...

Ces contraintes peuvent donc être de plusieurs natures. Il est par exemple possible d'imposer le rayon RMS du noyau et d'étudier comment ce dernier se réarrange en fonction de la contrainte [GS13 ; Ebr+14]. Une autre possibilité revient à contraindre la forme même du noyau. Cette contrainte peut être faite de nombreuses façons différentes, mais elle est généralement effectuée sur la base d'une décomposition en moments multipolaires. Dans le cadre des travaux présentés ici, la symétrie axiale ainsi que la symétrie par renversement du temps sont respectées. Dans le chapitre Chap.5, la parité est aussi respectée (le système est invariant par rapport au plan $z = 0$). Ces symétries empêchent certaines déformations du système (les configurations triaxiales par exemple) mais, de façon générale, toutes les contraintes multipolaires $Q_{i,0}$ sont possibles. Dans le cas d'un système respectant la parité, seule les contraintes $Q_{2i,0}$ sont possibles. Les opérateurs les plus utilisés pour étudier la fission, la désintégration, les modes d'excitation, etc, restent les opérateurs quadrupolaire $Q_{2,0}$, qui permet de déformer le noyau pour lui donner des formes oblate ou prolata, et octupolaire $Q_{3,0}$, qui permet d'introduire une asymétrie nécessaire dans le cas de phénomène radioactif non-symétrique (fission non-symétrique, radioactivité cluster ou α , ...). Ces deux opérateurs seront aussi les plus utilisés dans les chapitres suivant avec une exception pour l'opérateur hexadécapolaire $Q_{4,0}$ qui apparaîtra dans le chapitre Chap.6.

Formellement, cette contrainte peut être introduite de différentes façons. La première est celle du multiplicateur de Lagrange qui modifie la fonctionnelle

$$\mathcal{F}' = \mathcal{F} + \lambda \langle Q - q \rangle \quad (2.95)$$

où Q représente l'opérateur à contraindre et q la valeur cible. λ est alors déterminé par l'équation $\langle Q \rangle = q$. Cependant, une telle contrainte linéaire échoue dans de nombreux cas à converger vers un état RHB physique (voir [BW71] par exemple) ou du moins ne permet pas d'explorer entièrement l'espace de contraintes⁶. Pour palier ce problème, il est possible de modifier λ à chaque itération pour s'assurer que $\langle Q \rangle = q$ (voir [BW71] par exemple).

Une autre méthode consiste à utiliser une contrainte quadratique

$$\mathcal{F}' = \mathcal{F} + c (\langle Q \rangle - q)^2 \quad (2.96)$$

6. Cette contrainte linéaire ne permet d'obtenir la solution qui minimise \mathcal{F} seulement dans le cas où \mathcal{F} est convexe [BW71 ; Sta+10]

où c est un paramètre libre. Cette contrainte agit comme une fonction de pénalité lors de la minimisation forçant le système à minimiser la quantité $(\langle Q \rangle - q)^2$ et donc à converger vers la valeur q désirée. Il a cependant été montré[Sta+10] que le paramètre c doit être particulièrement bien choisi pour optimiser la convergence du système. Une faible valeur de c aura tendance à minimiser l'importance de la contrainte et le code convergera vers une valeur $q^{\text{conv}} \neq q$. À l'opposé, une trop forte valeur de c empêche très souvent le code converger.

Afin de se soustraire au problème d'une contrainte par multiplicateur de Lagrange, il est possible de combiner les deux approches précédentes et de minimiser

$$\mathcal{F}' = \mathcal{F} + \lambda \langle Q \rangle + c(\langle Q \rangle - q)^2 \quad (2.97)$$

Cette méthode porte le nom de Lagrangien augmenté [Hes69; Sta+10]. Le paramètre de Lagrange λ est calculé à chaque itération comme $\lambda^{i+1} = \lambda^i + 2c(\langle Q \rangle - q)$ [Hes69] et l'hamiltonien est modifié comme

$$h' = h + 2c(\langle Q \rangle - q + \lambda/2c) \quad (2.98)$$

Ainsi, la valeur cible q est remplacée par une valeur cible effective $q - \lambda/2c$ qui est ajustée à chaque itération. Cette méthode permet alors d'obtenir le q cible sans le problème de l'optimisation du paramètre c ⁷ et elle se généralise facilement aux cas où plusieurs contraintes sont imposées. Cette méthode du Lagrangien augmenté est la méthode utilisée dans tous les calculs contraints présentés dans cette thèse.

2.8 Conclusion

La théorie de la fonctionnelle en densité a été introduite dans ce chapitre ainsi que son application à la description des systèmes nucléaires dans le cadre des approches de l'énergie fonctionnelle de la densité. Les approches EDF ne rentrent pas exactement dans le cadre des théories de la DFT bien que ces deux cadres théoriques partagent de nombreuses similitudes.

Le traitement du problème quantique à N-corps a été envisagé tout d'abord dans l'approximation de Hartree permettant ainsi de prendre en compte les corrélations particules-trous à l'aide de l'hypothèse des particules indépendantes. Les équations du mouvement associées (équations RMF) ont ainsi été dérivées. Cette description a ensuite été enrichie en prenant en compte les corrélations de type particules-particules à l'aide du formalisme de Bogoliubov. Ce dernier permet, au prix de la brisure de la symétrie représentant la conservation du nombre de particules, de prendre en compte les effets d'appariement prenant place dans le noyau. Les équations RHB correspondantes ont été dérivées.

Finalement, les principales étapes concernant la résolution des équations RHB ont été rapidement présentées ainsi que les méthodes permettant d'effectuer des calculs contraints. Les résultats utilisant ces méthodes sont présentés dans les sections suivantes.

7. Il s'avère qu'en pratique le choix de c peut notablement impacter la vitesse de convergence du calcul, voire conditionner sa convergence dans le cas de grande déformation.

Références

- [Bar+08] Andrzej BARAN et al. « Broyden's method in nuclear structure calculations ». In : *Physical Review C* 78.1 (24 juill. 2008), p. 014318. DOI : [10.1103/PhysRevC.78.014318](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.78.014318) (cf. p. 51).
- [BCS57] J. BARDEEN, L. N. COOPER et J. R. SCHRIEFFER. « Theory of Superconductivity ». In : *Physical Review* 108.5 (1^{er} déc. 1957), p. 1175-1204. DOI : [10.1103/PhysRev.108.1175](https://doi.org/10.1103/PhysRev.108.1175) (cf. p. 38, 39).
- [BHR03] Michael BENDER, Paul-Henri HEENEN et Paul-Gerhard REINHARD. « Self-consistent mean-field models for nuclear structure ». In : *Reviews of Modern Physics* 75.1 (23 jan. 2003), p. 121-180. DOI : [10.1103/RevModPhys.75.121](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.75.121) (cf. p. 50).
- [BMP58] A. BOHR, B. R. MOTTELSON et D. PINES. « Possible Analogy between the Excitation Spectra of Nuclei and Those of the Superconducting Metallic State ». In : *Physical Review* 110.4 (15 mai 1958), p. 936-938. DOI : [10.1103/PhysRev.110.936](https://doi.org/10.1103/PhysRev.110.936) (cf. p. 38).
- [Bog58] N. N. BOGOLJUBOV. « On a new method in the theory of superconductivity ». In : *Il Nuovo Cimento (1955-1965)* 7.6 (1^{er} mars 1958), p. 794-805. ISSN : 1827-6121. DOI : [10.1007/BF02745585](https://doi.org/10.1007/BF02745585) (cf. p. 41).
- [BTŠ58] N. N. BOGOLJUBOV, V. V. TOLMACHOV et D. V. ŠIRKOV. « A New Method in the Theory of Superconductivity ». In : *Fortschritte der Physik* 6.11 (1958), p. 605-682. ISSN : 1521-3978. DOI : [10.1002/prop.19580061102](https://doi.org/10.1002/prop.19580061102) (cf. p. 41).
- [BW71] W. H. BASSICHIS et L. WILETS. « Solution to a Problem in Constrained Hartree-Fock and Other Calculations ». In : *Physical Review Letters* 27.21 (22 nov. 1971), p. 1451-1454. DOI : [10.1103/PhysRevLett.27.1451](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.27.1451) (cf. p. 52).
- [DFP10] J. E. DRUT, R. J. FURNSTAHL et L. PLATTER. « Toward ab initio density functional theory for nuclei ». In : *Progress in Particle and Nuclear Physics* 64.1 (1^{er} jan. 2010), p. 120-168. ISSN : 0146-6410. DOI : [10.1016/j.pnnp.2009.09.001](https://doi.org/10.1016/j.pnnp.2009.09.001) (cf. p. 34).
- [DS10] T. DUGUET et J. SADOUDI. « Breaking and restoring symmetries within the nuclear energy density functional method ». In : *Journal of Physics G : Nuclear and Particle Physics* 37.6 (mars 2010), p. 064009. ISSN : 0954-3899. DOI : [10.1088/0954-3899/37/6/064009](https://doi.org/10.1088/0954-3899/37/6/064009) (cf. p. 34, 40).
- [Dug04] T. DUGUET. « Bare vs effective pairing forces : A microscopic finite-range interaction for Hartree-Fock-Bogolyubov calculations in coordinate space ». In : *Physical Review C* 69.5 (25 mai 2004), p. 054317. DOI : [10.1103/PhysRevC.69.054317](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.69.054317) (cf. p. 50).
- [Ebr+14] J.-P. EBRAN et al. « Density functional theory studies of cluster states in nuclei ». In : *Physical Review C* 90.5 (nov. 2014), p. 054329. DOI : [10.1103/PhysRevC.90.054329](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.90.054329) (cf. p. 52).

- [FM14] S. FRAUENDORF et A. O. MACCHIAVELLI. « Overview of neutron–proton pairing ». In : *Progress in Particle and Nuclear Physics* 78 (1^{er} sept. 2014), p. 24-90. ISSN : 0146-6410. DOI : [10.1016/j.pnpnp.2014.07.001](https://doi.org/10.1016/j.pnpnp.2014.07.001) (cf. p. 50).
- [FPS02] R. J. FURNSTAHL, J. PIEKAREWICZ et Brian D. SEROT. « Covariant RPA in Effective Hadronic Field Theory ». In : *arXiv :nucl-th/0205048* (24 mai 2002). arXiv : [nuc1-th/0205048](https://arxiv.org/abs/nuc1-th/0205048) (cf. p. 46).
- [FTS95] R. J. FURNSTAHL, Hua-Bin TANG et Brian D. SEROT. « Vacuum contributions in a chiral effective Lagrangian for nuclei ». In : *Physical Review C* 52.3 (1^{er} sept. 1995), p. 1368-1379. DOI : [10.1103/PhysRevC.52.1368](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.52.1368) (cf. p. 46).
- [Gon+96] T. GONZALEZ-LLARENA et al. « Relativistic Hartree-Bogoliubov calculations with finite range pairing forces ». In : *Physics Letters B* 379.1 (27 juin 1996), p. 13-19. ISSN : 0370-2693. DOI : [10.1016/0370-2693\(96\)00461-3](https://doi.org/10.1016/0370-2693(96)00461-3) (cf. p. 50).
- [Gör93] Andreas GÖRLING. « Symmetry in density-functional theory ». In : *Physical Review A* 47.4 (1^{er} avr. 1993), p. 2783-2799. DOI : [10.1103/PhysRevA.47.2783](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.47.2783) (cf. p. 34).
- [GS13] M. GIROD et P. SCHUCK. « α -Particle Clustering from Expanding Self-Conjugate Nuclei within the Hartree-Fock-Bogoliubov Approach ». In : *Physical Review Letters* 111.13 (25 sept. 2013), p. 132503. DOI : [10.1103/PhysRevLett.111.132503](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.111.132503) (cf. p. 52).
- [Hes69] Magnus R. HESTENES. « Multiplier and gradient methods ». In : *Journal of Optimization Theory and Applications* 4.5 (1^{er} nov. 1969), p. 303-320. ISSN : 1573-2878. DOI : [10.1007/BF00927673](https://doi.org/10.1007/BF00927673) (cf. p. 53).
- [HK64] P. HOHENBERG et W. KOHN. « Inhomogeneous Electron Gas ». In : *Physical Review* 136.3 (9 nov. 1964), B864-B871. DOI : [10.1103/PhysRev.136.B864](https://doi.org/10.1103/PhysRev.136.B864) (cf. p. 32).
- [KS65a] W. KOHN et L. J. SHAM. « Quantum Density Oscillations in an Inhomogeneous Electron Gas ». In : *Physical Review* 137.6 (15 mars 1965), A1697-A1705. DOI : [10.1103/PhysRev.137.A1697](https://doi.org/10.1103/PhysRev.137.A1697) (cf. p. 33).
- [KS65b] W. KOHN et L. J. SHAM. « Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects ». In : *Physical Review* 140.4 (15 nov. 1965), A1133-A1138. DOI : [10.1103/PhysRev.140.A1133](https://doi.org/10.1103/PhysRev.140.A1133) (cf. p. 33).
- [Lon+07] WenHui LONG et al. « Shell structure and ρ -tensor correlations in density dependent relativistic Hartree-Fock theory ». In : *Physical Review C* 76.3 (14 sept. 2007), p. 034314. DOI : [10.1103/PhysRevC.76.034314](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.76.034314) (cf. p. 48).
- [Lon+10] Wen Hui LONG et al. « Relativistic Hartree-Fock-Bogoliubov theory with density dependent meson-nucleon couplings ». In : *Physical Review C* 81.2 (2010), p. 024308. DOI : [10.1103/PhysRevC.81.024308](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.81.024308) (cf. p. 48).
- [LVM06] Wen-Hui LONG, Nguyen VAN GIAI et Jie MENG. « Density-dependent relativistic Hartree–Fock approach ». In : *Physics Letters B* 640.4 (14 sept. 2006), p. 150-154. ISSN : 0370-2693. DOI : [10.1016/j.physletb.2006.07.064](https://doi.org/10.1016/j.physletb.2006.07.064) (cf. p. 48).

- [NND] NNDC. *National Nuclear Data Center*. URL : <https://www.nndc.bnl.gov/ensdf/> (cf. p. 38).
- [Per+05] John P. PERDEW et al. « Prescription for the design and selection of density functional approximations : More constraint satisfaction with fewer fits ». In : *The Journal of Chemical Physics* 123.6 (17 août 2005), p. 062201. ISSN : 0021-9606. DOI : [10.1063/1.1904565](https://doi.org/10.1063/1.1904565) (cf. p. 33).
- [She+21] J. A. SHEIKH et al. « Symmetry restoration in mean-field approaches ». In : *Journal of Physics G : Nuclear and Particle Physics* 48.12 (nov. 2021), p. 123001. ISSN : 0954-3899. DOI : [10.1088/1361-6471/ac288a](https://doi.org/10.1088/1361-6471/ac288a) (cf. p. 34, 40).
- [SR02] M. SERRA et P. RING. « Relativistic Hartree-Bogoliubov theory for finite nuclei ». In : *Physical Review C* 65.6 (20 juin 2002), p. 064324. DOI : [10.1103/PhysRevC.65.064324](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.65.064324) (cf. p. 50).
- [Sta+10] A. STASZCZAK et al. « Augmented Lagrangian method for constrained nuclear density functional theory ». In : *The European Physical Journal A* 46.1 (1^{er} oct. 2010), p. 85-90. ISSN : 1434-6001, 1434-601X. DOI : [10.1140/epja/i2010-11018-9](https://doi.org/10.1140/epja/i2010-11018-9) (cf. p. 52, 53).
- [TMR09a] Y. TIAN, Z. Y. MA et P. RING. « A finite range pairing force for density functional theory in superfluid nuclei ». In : *Physics Letters B* 676.1 (1^{er} juin 2009), p. 44-50. ISSN : 0370-2693. DOI : [10.1016/j.physletb.2009.04.067](https://doi.org/10.1016/j.physletb.2009.04.067) (cf. p. 50, 51).
- [TMR09b] Yuan TIAN, Zhong-yu MA et P. RING. « Axially deformed relativistic Hartree Bogoliubov theory with a separable pairing force ». In : *Physical Review C* 80.2 (27 août 2009), p. 024313. DOI : [10.1103/PhysRevC.80.024313](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.80.024313) (cf. p. 50, 51).
- [TMR09c] Yuan TIAN, Zhong-yu MA et Peter RING. « Separable pairing force for relativistic quasiparticle random-phase approximation ». In : *Physical Review C* 79.6 (1^{er} juin 2009), p. 064301. DOI : [10.1103/PhysRevC.79.064301](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.79.064301) (cf. p. 50, 51).
- [Vre+05] D. VRETENAR et al. « Relativistic Hartree-Bogoliubov theory : static and dynamic aspects of exotic nuclear structure ». In : *Physics Reports* 409.3 (1^{er} avr. 2005), p. 101-259. ISSN : 0370-1573. DOI : [10.1016/j.physrep.2004.10.001](https://doi.org/10.1016/j.physrep.2004.10.001) (cf. p. 48, 50).

Agrégation nucléaire et transition de phase

Ce chapitre est partiellement adapté des travaux présentés dans E. Khan, F. Mercier et al. 2022 (en préparation) pour la partie localisation et E. Yuksel, F. Mercier et al. (2022) (article soumis à PRC) pour la partie température finie. Des résultats complémentaires sont aussi présentés.

Sommaire

3.1	Phénomène d'agrégation nucléaire	58
3.1.1	Approche qualitative	59
3.1.2	Fonction de localisation	60
3.2	Formalisme RHB à température finie	64
3.2.1	Grand potentiel, matrice densité et facteur d'occupation	65
3.2.2	Équations RHB à température finie	66
3.2.3	Prise en compte des fluctuations statistiques	67
3.3	Évolution de la déformation avec la température : approche statistique	68
3.3.1	Approche statistique : génération aléatoire	68
3.3.2	Approche statistique : théorie de Landau	71
3.4	Évolution de la déformation avec la température : résultats FT-RHB	72
3.4.1	Systématique	73
3.4.2	Impact des fluctuations thermiques	75
3.5	Évolution de l'agrégation avec la température	77
3.6	Conclusion	78
	Références	79

Les transitions de phase sont des phénomènes très courants en physique, qu’elles soient d’origine thermique (fusion, ébullition, transition vers une phase supraconductrice, condensat de Bose-Einstein) ou quantique (transition vers une phase superfluide, transition de Mott, ...). Alors que les premières sont liées à la variation de la température, les transitions de phase quantique prennent lieu à température nulle et sont liées à la variation d’autre paramètre (champ magnétique, densité, ...). Quasiment tous les systèmes en interaction peuvent subir des transitions de phase, ces dernières étant généralement liées aux propriétés collectives d’un système. Les noyaux n’échappent pas à cette règle et on se propose ici d’étudier deux transitions de phase différentes : une première, quantique, liée au phénomène d’agrégation nucléaire et une seconde, thermique, liée à l’effet de la température sur les noyaux. D’autres transitions de phase prennent place dans le noyau comme une transition de Mott favorisant l’apparition de clusters α lorsque la densité est diminuée (voir par exemple [RMS82 ; Toh+01 ; GS13 ; Ebr+20]).

Une partie importante du travail de thèse présenté ici concerne la structure et l’évolution des clusters aussi bien au niveau RHB pour la description de la radioactivité (voir Chapitre 6) qu’au-delà du champ moyen dans le cadre de la QRPA (voir Chapitre 5). La compréhension du phénomène d’agrégation est donc primordiale pour ces applications. Ce phénomène apparait principalement dans les noyaux légers et se caractérise par une phase située entre cristal et liquide quantique. On se propose donc ici de donner quelques détails en section 3.1 concernant l’apparition de clusters dans les systèmes nucléaires et l’apport d’une approche relativiste pour la description de ces structures.

Comme beaucoup d’autres systèmes physiques, la température influence de façon importante la structure des noyaux (déformation, appariement, ...). Le formalisme RHB à température finie sera introduit en Sec.3.2. On se propose ensuite d’étudier quelques propriétés en détail, tout d’abord à l’aide de modèles statistiques simples en Sec.3.3 puis en étudiant l’évolution de la température critique des systèmes nucléaires à travers la carte des noyaux, ainsi que le lien avec la déformation initiale (à $T = 0$) en Sec.3.4. L’impact de la température sur la phase superfluide est aussi brièvement discutée. L’impact des fluctuations thermiques peut aussi être pris en compte dans les systèmes nucléaires et ses effets seront discutés dans les différentes sections. Finalement, l’impact de la température sur le phénomène d’agrégation sera aussi brièvement étudié en Sec.3.5.

3.1 Phénomène d’agrégation nucléaire

Le phénomène d’agrégation nucléaire a déjà été étudié ces dernières années au niveau champ moyen, aussi bien avec des méthodes de dynamique moléculaire fermionique (FMD) [FS00], dynamique moléculaire antisymétrisée (AMD) [KH01] ou EDF [Aru+05]. Ces travaux se sont en particulier concentrés sur les résultats dans les noyaux α -conjugués au niveau champ moyen [Mar+06 ; Rei+11 ; Ich+11 ; Ebr+12 ; GS13 ; Rob14], mais aussi, plus récemment, avec des résultats au-delà du champ moyen [MHG18 ; Mar+19].

Afin de comprendre comment ces structures apparaissent, il est tout d’abord intéressant de remarquer que, bien que différentes fonctionnelles décrivent correctement la

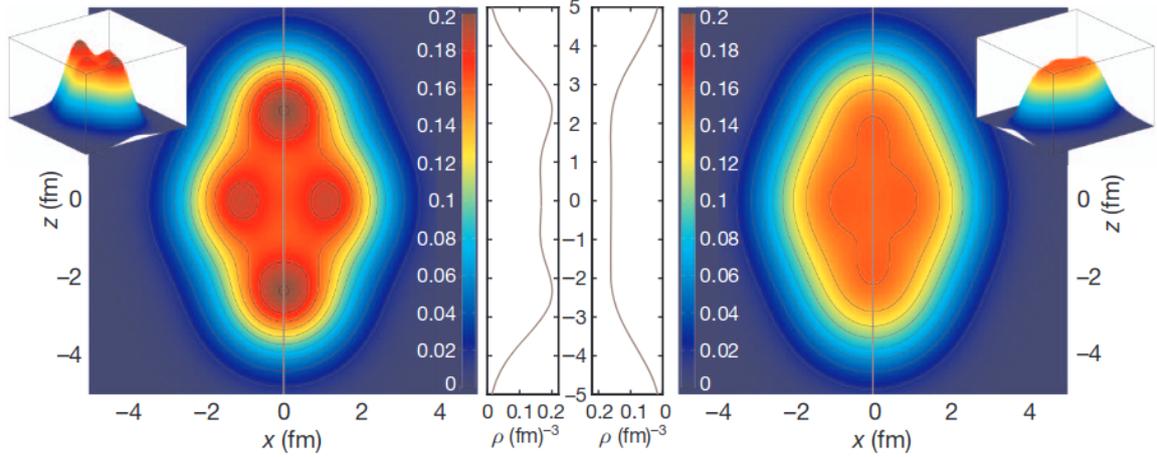


FIGURE 3.1 – Densités fondamentales du ^{20}Ne calculées dans des approches RHB avec (à gauche) la paramétrisation DD-ME2 et (à droite) au niveau HFB avec la paramétrisation SLy4. Figure tirée de [Ebr+12].

déformation, le rayon, l'énergie de liaison, ... d'un noyau donné, leurs résultats concernant la densité fondamentale du système peuvent être très différents comme illustré sur la figure (3.1). On remarque en particulier que, dans l'approche relativiste (à gauche), des zones de surdensités sont présentes, dont deux dominantes sur l'axe de symétrie du système. C'est dans ces surdensités que le maximum de densité est atteint pour le système, contrairement au cas non-relativiste où le maximum de densité est atteint au centre puis décroît progressivement. Une ressemblance intéressante entre ces deux fonctionnelles est qu'elles prédisent une déformation du fondamental quasiment égale pour ce noyau de ^{20}Ne , montrant ainsi que ce phénomène de surdensités ne prend pas son origine dans la déformation seule. Ainsi, les causes doivent être recherchées dans le potentiel lui-même (lié à l'interaction).

3.1.1 Approche qualitative

Afin de comprendre le phénomène d'agrégation, il est important de comprendre ce qu'il représente. Si des sous-structures parviennent à se former au sein d'un noyau, cela signifie qu'une partie des nucléons du système sont globalement plus localisés que d'autres. Or, la localisation est directement liée à la profondeur du potentiel utilisé¹. En effet, un potentiel profond aura tendance à localiser les nucléons à un endroit précis alors qu'un potentiel peu profond aura tendance à donner des fonctions d'onde délocalisées. Dans le cas relativiste, le potentiel ressenti par les nucléons est une combinaison des potentiels scalaire et vecteur. Plus précisément, $V + S$ est responsable de la profondeur du potentiel central alors que $V - S$ gouvernera la partie spin-orbite de l'interaction. Dans le cas relativiste avec l'interaction DD-ME2 dont les résultats sont présentés à gauche de Fig.(3.1), $V + S \approx 320 - 400 = 80$ MeV peut être comparé au ~ 70 MeV de l'interaction SLy4 présentés à droite de Fig.(3.1). Cette différence modifie de façon conséquente le spectre en énergie des noyaux, sans pour autant modifier les propriétés

1. Plus spécifiquement, le terme cinétique et le potentiel s'opposent amenant à une localisation ou une délocalisation.

macroscopiques (énergie, déformation, ...). Ainsi, dans le cas relativiste, les fonctions d'onde sont moins dispersées, favorisant la création de sous-structures. Cette observation est un premier pas vers la compréhension du phénomène d'agrégation.

Il est cependant possible d'aller plus loin dans cette analyse en introduisant une quantité appelée paramètre de localisation et définie comme [Ebr+13; Ebr+18]

$$\alpha_{\text{loc}} = \frac{2\Delta r}{\bar{r}} \quad (3.1)$$

avec la dispersion de la fonction d'onde $\Delta r = \sqrt{\langle r^2 \rangle - \langle r \rangle^2}$ et \bar{r} la distance moyenne entre nucléons. Cette quantité permet d'étudier les différentes phases possibles dans un noyau :

- $\alpha \ll 1$ signifie que la dispersion est très faible comparée à la distance moyenne entre nucléons et donc que les nucléons sont très localisés (comportement solide)
- $\alpha \gg 1$ est le cas inverse où les nucléons sont délocalisés et le noyau se comporte comme un liquide quantique (dans la pratique, la limite liquide quantique se trouve autour de $\alpha \gtrsim 1.3$ dans le cas des systèmes nucléaires)
- $\alpha \approx 1$ est un cas intermédiaire qui permet de faire la transition entre les deux comportements précédents et permet d'obtenir des clusters au sein d'un noyau

Dans le cas d'un potentiel harmonique, il est possible de montrer que [Ebr+18]

$$\alpha_{\text{OH}} \approx \frac{\sqrt{\hbar(2n-1)}}{(2mV_0r_0^2)^{1/4}} A^{1/6} \quad (3.2)$$

avec n le nombre quantique principal, m la masse d'un nucléon, V_0 la profondeur du potentiel, $r_0 = 1.25$ fm et A le nombre de nucléons dans le noyau. Cette formule rejoint l'intuition concernant le lien entre la profondeur du potentiel et l'impact sur la dispersion du système puisqu'on obtient $\alpha \propto V_0^{-1/4}$ et donc, plus le potentiel est profond, plus le facteur de localisation sera petit et donc plus la probabilité de trouver des clusters sera élevée. On remarque aussi, grâce à cette formule, que le facteur de localisation est proportionnel au nombre de particules, i.e. plus un noyau est lourd, plus son comportement se rapprochera de celui d'un liquide quantique. De la même façon, $\alpha \propto \sqrt{n}$, ainsi, les orbitales avec de grand n seront plus délocalisées, ce qui restreint, encore une fois, l'obtention de structures très localisées dans les noyaux lourds.

Il est alors possible de fixer toutes les valeurs sauf le nombre de particules du système pour obtenir une première estimation de la région de noyaux où le phénomène d'agrégation pourrait être visible. En procédant ainsi, on obtient $\alpha \sim 1$ pour $A \sim 20 - 30$. Ces résultats sont directement illustrés sur la Fig.3.2 pour différentes valeurs de potentiel V_0 et nombre quantique n .

3.1.2 Fonction de localisation

Afin d'étudier plus précisément la formation de clusters dans les noyaux, il est possible de définir une quantité plus locale, appelée fonction de localisation, qui permet d'obtenir une mesure de la probabilité de trouver deux nucléons de spin σ et isospin τ identiques à un endroit donné du noyau. Cette fonction a originellement été introduite

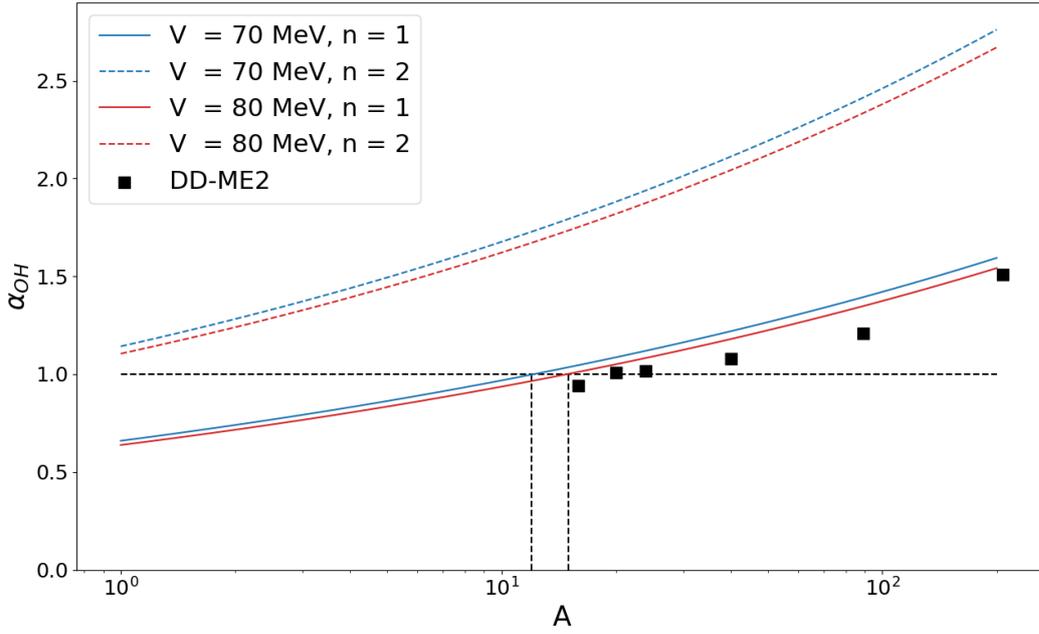


FIGURE 3.2 – Évolution du paramètre α_{OH} avec le nombre de particules A pour différentes valeurs de potentiels V et nombre quantique principal n . Les points noirs représentant le résultat de calculs RHB avec la fonctionnelle DD-ME2 sont tirés de [Ebr+13].

par [BE90] dans le cadre des systèmes électroniques puis plus récemment dans le cas des noyaux [Rei+11].

On commence par définir une probabilité $P_{\tau\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ de trouver deux nucléons de même spin σ et isospin τ à deux endroits de l'espace \mathbf{r} et \mathbf{r}' . Cette dernière peut s'écrire comme

$$P_{\tau\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \rho_{\tau\sigma}(\mathbf{r})\rho_{\tau\sigma}(\mathbf{r}') - |\rho_{\tau\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')|^2 \quad (3.3)$$

où $|\rho_{\tau\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')|^2$ représente simplement la matrice densité à un corps et $\rho_{\tau\sigma}(\mathbf{r}) = \rho_{\tau\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{r})$ la densité locale à un corps.

Il est alors possible de construire la probabilité de trouver un nucléon en \mathbf{r}' sachant qu'un nucléon de même spin et isospin se trouve en \mathbf{r} . On note cette probabilité conditionnelle $R_{\tau\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = P_{\tau\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')/\rho_{\tau\sigma}(\mathbf{r})$. Comme expliqué précédemment, nous souhaitons à terme obtenir une mesure de la probabilité d'obtenir deux nucléons de même nature et de même spin à une position r . Nous pouvons donc effectuer un développement limité de $R_{\tau\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ autour de $\mathbf{r}' = \mathbf{r} + \delta\mathbf{r}$ ². On obtient alors [BE90; Rei+11]

$$R_{\tau\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{r} + \delta\mathbf{r}) \approx \frac{1}{3} \left(\tau_{\tau\sigma} - \frac{1}{4} \frac{(\nabla \rho_{\tau\sigma})^2}{\rho_{\tau\sigma}} - \frac{\mathbf{j}_{q\sigma}^2}{\rho_{\tau\sigma}} \right) \delta\mathbf{r}^2 \quad (3.4)$$

2. En procédant ainsi R perd son caractère probabiliste dans le sens où cette fonction n'est plus normalisée si tous les termes de l'expansion ne sont pas pris en compte. Cette fonction se doit d'être renormalisée.

où ont été utilisées la densité d'énergie cinétique $\tau_{\tau\sigma}$ et le courant³ $\mathbf{j}_{q\sigma}$ définies comme

$$\tau_{\tau\sigma}(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha} |\nabla\Phi_{\alpha}(\mathbf{r})|^2 \quad (3.5a)$$

$$\mathbf{j}_{\tau\sigma}(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha} \text{Im} [\Phi_{\alpha}^*(\mathbf{r}) \nabla\Phi_{\alpha}(\mathbf{r})] \quad (3.5b)$$

et $\nabla\rho_{\tau\sigma}$ définie comme

$$\nabla\rho_{\tau\sigma}(\mathbf{r}) = 2 \sum_{\alpha} \text{Re} [\Phi_{\alpha}^*(\mathbf{r}) \nabla\Phi_{\alpha}(\mathbf{r})] \quad (3.6)$$

Il est alors possible de définir une mesure de localisation que l'on associe au développement au second ordre de $R_{\tau\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{r} + \delta\mathbf{r})$

$$D_{\tau\sigma}(\mathbf{r}) = \tau_{\tau\sigma} - \frac{1}{4} \frac{(\nabla\rho_{\tau\sigma})^2}{\rho_{\tau\sigma}} - \frac{\mathbf{j}_{q\sigma}^2}{\rho_{\tau\sigma}} \quad (3.7)$$

Ainsi définie, $D_{\tau\sigma}(\mathbf{r}) \rightarrow 0 \iff P_{\tau\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{r} + \delta\mathbf{r}) \rightarrow 0$. Afin de simplifier l'interprétation, il est donc commode d'inverser $D_{\tau\sigma}$ et de procéder à une normalisation. On obtient alors la fonction de localisation $C_{\tau\sigma}$

$$C_{\tau\sigma}(\mathbf{r}) = \left[1 + \left(\frac{\tau_{\tau\sigma}\rho_{\tau\sigma} - \frac{1}{4}(\nabla\rho_{\tau\sigma})^2 - \mathbf{j}_{\tau\sigma}^2}{\rho_{\tau\sigma}\tau_{\tau\sigma}^{TF}} \right)^2 \right]^{-1} \quad (3.8)$$

où la normalisation est effectuée par rapport à la densité de Thomas-Fermi définie comme [BE90; Rei+11]

$$\tau_{\tau\sigma}^{TF} = \frac{3}{5} (6\pi^2)^{2/3} \rho_{\tau\sigma}^{5/3} \quad (3.9)$$

Cette densité cinétique fournit une échelle de densité naturelle nous permettant de comparer facilement les différentes densités. La densité de Thomas-Fermi représente la densité cinétique d'un gaz homogène de neutrons et protons. Dans le cas de systèmes pair-pair comme étudiés ici, on a $C_{p\uparrow} \approx C_{p\downarrow}$ et $C_{n\uparrow} \approx C_{n\downarrow}$.

On distingue alors deux cas de figure⁴ :

- $C_{\tau\sigma} \approx 1$ (équivalent à $D_{\tau\sigma} \approx 0$) signifie que la probabilité de trouver deux nucléons de même spin et d'isospin proches est nulle. En d'autres termes, cela traduit la localisation de 2 neutrons et 2 protons s'interprétant comme une particule α .
- $C_{\tau\sigma} \approx 0.5$ (équivalent à $D_{\tau\sigma} \approx 1$) signifie que les nucléons sont délocalisés.

Un exemple de fonction de localisation est donné sur la Fig.3.3. Il s'avère que les surdensités visibles précédemment discutées sur la Fig.3.1 montrent une forte localisation signifiant la présence de clusters α aux pôles.

Afin de mieux comprendre cette fonction de localisation, sur la Fig.3.4 sont affichées les différentes contributions à cette fonction dans le cas des neutrons (une structure

3. Dans le cas de la description d'un système nucléaire pair-pair dans un régime statique, le courant s'annule.

4. On s'intéresse particulièrement ici au noyau $N = Z$ légers. Les localisations protons et neutrons sont donc très similaires $C_n \sim C_p$

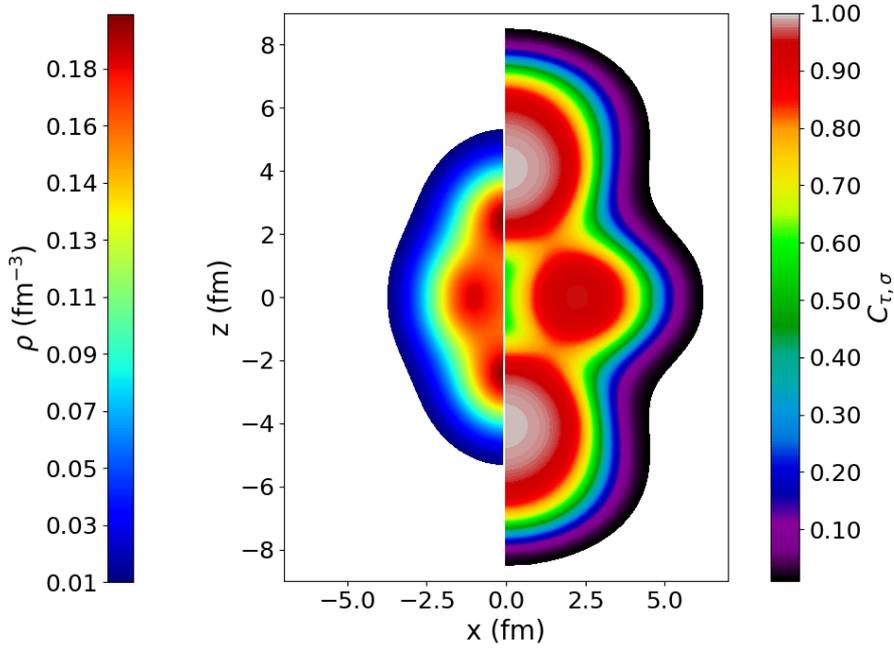


FIGURE 3.3 – Densité et localisation du ^{20}Ne dans son état fondamental obtenues au niveau RHB avec la fonctionnelle DD-ME2.

sensiblement identique est obtenue pour les protons). En particulier, la densité cinétique multipliée par la densité ainsi que le carré des dérivées suivant r et z sont présentés. Ces quantités sont directement comparées à la densité de neutrons affichée à gauche sur chaque graphe. Il est intéressant de remarquer la relativement faible valeur des dérivées ($\sim 10^{-5}\text{fm}^{-8}$) par rapport à la densité cinétique ($\sim 10^{-2}\text{fm}^{-8}$).

On remarque qu'ainsi définie, la localisation semble prendre la valeur 1 au niveau de la surface, voire en dehors du noyau ($\rho < 0.01\text{fm}^{-3}$). Cette propriété s'interprète facilement en remarquant qu'il sera toujours relativement probable de ne pas trouver des nucléons de même spin et isospin loin du centre du noyau, là où les fonctions d'ondes ne possèdent pratiquement aucun recouvrement. En effet, la définition de la fonction de localisation peut aussi s'interpréter de cette façon : aux endroits où les recouvrements de fonctions d'onde sont nuls, la localisation vaut 1. Dans les noyaux sphériques par exemple, la fonction d'onde prend des valeurs proches de 1 loin du centre, au niveau de la surface. Il est donc important ici de nuancer l'utilisation de cette fonction de localisation. Ici en particulier, nous voyons que la localisation n'a pas l'air d'être directement reliée à la présence d'une surdensité. La structure en α du ^{20}Ne n'est donc pas totalement justifiée par l'utilisation de la fonction de localisation. Cette constatation est soutenue par les résultats présentés par [Rei+11] montrant une localisation du ^{20}Ne obtenue à l'aide d'une fonctionnelle de Skyrme (où des surdensités ne sont pas visibles) très proche de celle obtenue ici avec DD-ME2 signifiant bien une décorrélation entre la fonction de localisation et les surdensités.

Il est intéressant de faire le lien ici avec l'approche de champ moyen généralisé discutée dans le [premier chapitre](#). Les résultats incluant des clusters de deutéron, hélium, tritium et hélium dans la matière infinie [Typ+10] montrent que ces clusters peuvent ap-

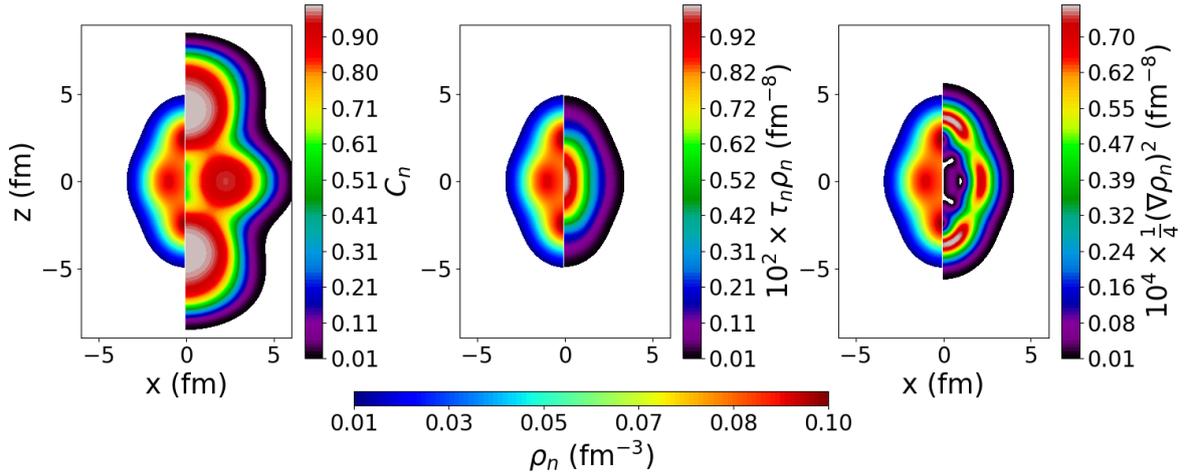


FIGURE 3.4 – Sur chaque graphe sont tracées la densité de neutrons à gauche et, dans l’ordre à droite de chaque graphe, la localisation $C_{n\sigma}$, la densité cinétique $\tau_{n\sigma}\rho_n$ et la dérivée spatiale de la densité au carré $\frac{1}{4}(\nabla\rho_n)^2$.

paraître naturellement à des densités comprises entre $0.01\rho_{GS}$ et $0.1\rho_{GS}$. Des études plus récentes[Ebr+20] concernant l’apparition de cluster α obtiennent des valeurs similaires avec une transition autour de $\rho/\rho_0 \sim 0.3$ caractérisée par une transition de Mott⁵. Une augmentation de l’énergie de symétrie est aussi prédite par rapport au modèle de champ moyen relativiste (RMF) sans clusters. Étant donné les faibles densités auxquelles ces clusters semblent apparaître, ils pourraient avoir une influence non négligeable à la surface des noyaux finis où la densité décroît rapidement. Une première étude[Typ14] s’est intéressé à ces effets dans la chaîne des Étais en incluant uniquement des clusters α . Les résultats semblent montrer l’apparition de clusters α à la surface des noyaux. De plus, une diminution de l’épaisseur de la peau de neutrons et une diminution des rayons protons et neutrons (en particulier dans les noyaux proches de $N = Z$) est aussi observée. Bien que ce type d’approche n’ait pas été mis en pratique dans ce travail de thèse, la prise en compte des degrés de liberté cluster pourrait s’avérer intéressante, et particulièrement dans le cas de la radioactivité α traitée dans le Chapitre 6.

3.2 Formalisme RHB à température finie

Bien que la phase cluster discutée précédemment des systèmes nucléaires représentent à elle seule un exemple particulier de transition de phase quantique piloté par la densité, il est possible d’étudier l’effet de la température sur cette phase particulière.

La prise en compte de la température dans la description des noyaux modifie, de manière plus ou moins importante, les niveaux d’occupation des orbitales. En effet, les fluctuations thermiques vont permettre de peupler (ou dépeupler) des états proches du niveau de Fermi. Les effets de la température sont particulièrement intéressants à

5. Il est d’ailleurs possible d’interpréter la présence de clusters présents sur les figures présentes comme étant liée à une transition de Mott. Des calculs supplémentaires seront cependant nécessaires afin de valider cette hypothèse en étudiant l’apparition de ces surdensités et en les reliant à la densité à la surface du noyau.

étudier dans le cas de systèmes superfluides et déformés où des transitions de phase sont attendues. En effet, la température va avoir un effet déterminant sur la création des paires de Cooper qui forment notre base de qp. Dans le cas où la température devient assez importante, les paires seront brisées et il est donc attendu que le phénomène de superfluidité disparaisse. De la même façon, lorsque la température augmente suffisamment, les orbitales se peuplent de façon homogène, forçant ainsi la déformation à devenir nulle.

3.2.1 Grand potentiel, matrice densité et facteur d'occupation

Les systèmes dont on souhaite décrire la thermodynamique sont ici des systèmes finis où la limite thermodynamique, définie par un volume infini, un nombre de particules infini, mais une densité finie ($V \rightarrow \infty$, $N \rightarrow \infty$ et $N/V \rightarrow \text{cste}$) n'est donc pas respectée. Les fluctuations statistiques sont donc potentiellement importantes et leur inclusion est discutée plus loin. Ces fluctuations rendent les ensembles thermodynamiques différents et les choix ne sont donc plus équivalents (voir par exemple [CG08] pour une discussion détaillée)⁶. Dans ce travail, la température T et le potentiel chimique μ sont fixés, ce qui nous permet de travailler dans l'ensemble grand canonique dont le potentiel peut être écrit comme⁷

$$\Omega = E - TS - \mu_N N - \mu_Z Z \quad (3.10)$$

avec S l'entropie du système, N le nombre de neutrons et Z celui de protons. Il est alors possible de calculer la valeur moyenne d'une observable \hat{O} comme

$$\langle \hat{O} \rangle = \langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle = \text{Tr} \{ \hat{D} \hat{O} \} \quad (3.11)$$

où \hat{D} représente la matrice densité du système. L'énergie E , le nombre de particules A et l'entropie S prennent donc les formes suivantes

$$E = \text{Tr} \{ \hat{D} \hat{H} \} \quad (3.12a)$$

$$A = \text{Tr} \{ \hat{D} \hat{A} \} \quad (3.12b)$$

$$S = -\text{Tr} \{ \hat{D} \log \hat{D} \} \quad (3.12c)$$

L'état fondamental peut alors être obtenu en minimisant le grand potentiel Ω par rapport à la matrice densité \hat{D} . En effet, l'ensemble des quantités apparaissant dans le grand potentiel étant des fonctions de la matrice densité, le grand potentiel devient lui-même une fonction de la matrice densité $\Omega[\hat{D}]$. On obtient donc⁸

$$\delta\Omega = \text{Tr} \left\{ \left(\hat{H} - T \log \hat{D} - \mu \hat{N} \right) \delta\hat{D} \right\} \quad (3.13)$$

6. De la même façon, la problématique de la présence de transition de phase dans les systèmes finis reste entière, mais ne sera pas abordée ici.

7. Étant donné que l'on contraindra la forme du système, en pratique le potentiel grand canonique prend en compte un terme de Lagrange.

8. Dans tout ce qui suit la constante de Boltzmann est prise égale à 1, $k_B = 1$

dont la seule solution pour une variation quelconque de densité $\delta\hat{D}$ est $\hat{H} - T \log \hat{D} - \mu\hat{N} = 0$ ou

$$\hat{D} = Z^{-1} \exp \left\{ -\beta \left(\hat{H} - \mu\hat{N} \right) \right\} \quad (3.14)$$

avec $Z = \text{Tr} \left\{ \exp \left\{ -\beta \left(\hat{H} - \mu\hat{N} \right) \right\} \right\}$ la fonction de partition du système et $\beta = 1/T$.

La différence majeure avec le formalisme à température nulle, introduit dans le chapitre précédent, se trouve dans les facteurs d'occupation qui sont maintenant soumis à des fluctuations statistiques liées aux effets de température. Comme pour tout système fermionique à température finie, les nombres d'occupations suivent une distribution de Fermi-Dirac⁹

$$\langle n_i \rangle \equiv f_i = \frac{1}{e^{\beta E_i} + 1} \quad (3.15)$$

Les nombres d'occupation prennent donc des valeurs comprises entre 0 et 1 même en l'absence de couplage particule-particule.

3.2.2 Équations RHB à température finie

En reprenant le formalisme de Bogoliubov dérivé au chapitre précédent (voir Sec.2.3), il est possible de réécrire la matrice densité et le tenseur d'appariement en fonction des éléments de la matrice de Bogoliubov (U et V) et des opérateurs de quasi-particules (β) [Goo81]

$$\rho_{ij} = \langle c_i^\dagger c_j \rangle = \sum_{\mu\nu} V_{\mu i}^* \langle \beta_\mu^\dagger \beta_\nu \rangle V_{\nu j} + U_{\mu i} \langle \beta_\mu \beta_\nu^\dagger \rangle U_{\nu j} \quad (3.16)$$

$$\kappa_{ij} = \langle c_i c_j \rangle = \sum_{\mu\nu} V_{\mu i}^* \langle \beta_\mu^\dagger \beta_\nu \rangle U_{\nu j} + U_{\mu i} \langle \beta_\mu \beta_\nu^\dagger \rangle V_{\nu j} \quad (3.17)$$

avec $\langle \beta_\mu \beta_\nu^\dagger \rangle = f_\mu \delta_{\mu\nu}$ et $\langle \beta_\mu^\dagger \beta_\nu \rangle = (1 - f_\mu) \delta_{\mu\nu}$ où f_μ représente le facteur d'occupation et suit une distribution de Fermi-Dirac. Il est alors possible de réécrire la matrice densité et le tenseur d'appariement de manière plus concise

$$\rho = U f U^\dagger + V^* (1 - f) V^T \quad (3.18)$$

$$\kappa = U f V^\dagger + V^* (1 - f) U^T \quad (3.19)$$

La matrice densité généralisée \mathcal{R} prend alors une forme identique à précédemment

$$\mathcal{R} = \begin{pmatrix} \rho & \kappa \\ -\kappa^* & 1 - \rho^* \end{pmatrix} = \mathcal{B} \begin{pmatrix} f & 0 \\ 0 & 1 - f \end{pmatrix} \mathcal{B}^\dagger \quad (3.20)$$

avec \mathcal{B} la matrice de Bogoliubov. Dans le cas de la théorie HFB à température finie, les facteurs d'occupation brisent l'idempotence de la matrice densité généralisée¹⁰. Ainsi, \mathcal{R} n'est plus un état pur, autrement dit, à température finie, les états ne sont plus décrits par le vide des quasi-particules.

9. Ce résultat se retrouve facilement à partir de Eq.(3.14)

10. Dans la limite de température nulle, $\mathcal{R} \xrightarrow{T \rightarrow 0} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ qui est bien idempotente. Pour une discussion plus complète de la limite à température nulle, voir par exemple [DR20]

Finalement, le nombre de particules moyen $N = \langle \hat{N} \rangle$ est aussi modifié pour prendre en compte l'occupation thermique

$$N = \sum_i v_i^2 (1 - f_i) + u_i^2 f_i \quad (3.21)$$

Les quantités usuelles telles que l'entropie et la capacité calorifique peuvent alors être calculées

$$S(T) = -k_B \sum_i [f_i \ln(f_i) + (1 - f_i) \ln(1 - f_i)] \quad (3.22)$$

$$C_V(T) = T \frac{\partial S(T)}{\partial T} \quad (3.23)$$

où, pour le calcul de l'entropie, la somme est faite sur toutes les particules du système.

3.2.3 Prise en compte des fluctuations statistiques

Les résultats des équations FT-HFB permettent d'avoir accès aux densités, moments, etc les plus probables. Or, dans le contexte d'une théorie formulée à température finie, les fluctuations sont importantes et peuvent être prises en compte. Ces fluctuations peuvent devenir particulièrement importantes pour des systèmes très petits. Ainsi, à une température fixée, une observable \mathcal{O} prend la forme (voir par exemple [MER03])

$$\overline{\mathcal{O}} = \langle \langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_q \rangle = \frac{\int \langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_q e^{-F(q)/T} dq}{\int e^{-F(q)/T} dq} \quad (3.24)$$

où F représente l'énergie libre

$$F = E - TS \quad (3.25)$$

et

$$\langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_q = \text{Tr} \left\{ \hat{\mathcal{D}} \hat{\mathcal{O}} \right\} \quad (3.26)$$

L'énergie libre doit être calculée à partir d'une référence. Ici, le choix est fait de déterminer l'énergie libre à partir du minimum de l'énergie libre à $T = 0$ i.e.

$$\tilde{F}(T, \beta) \equiv F(T, \beta) - F_0(0, \beta) \quad (3.27)$$

Dans la suite, on dénotera \tilde{F} et F sans distinction particulière.

Il est important de remarquer ici qu'une étape est nécessaire afin d'obtenir Eq.(3.24). En effet, la double moyenne d'un opérateur doit être définie comme (à un facteur de normalisation prêt)

$$\overline{\mathcal{O}} \propto \text{Tr} \left\{ \hat{\mathcal{O}} \int dq \hat{\mathcal{D}} e^{\beta F(q)} \right\} \quad (3.28)$$

Sous la condition que \mathcal{O} soit bien un opérateur (en particulier qu'il ne dépende pas de la densité) et qu'il soit linéaire, on réécrit

$$\overline{\mathcal{O}} \propto \text{Tr} \left\{ \int dq \hat{\mathcal{O}} \hat{\mathcal{D}} e^{-\beta F(q)} \right\} = \int dq \text{Tr} \left\{ \hat{\mathcal{O}} \hat{\mathcal{D}} \right\} e^{-\beta F(q)} \quad (3.29)$$

En particulier, dans la suite, nous nous intéressons à l'impact des fluctuations thermiques au niveau de la densité et de la localisation. Ces quantités n'étant pas des opérateurs, nous choisissons de calculer les fluctuations thermiques comme dans l'Eq.(3.24) i.e.

$$\bar{\rho}(\vec{r}) = \frac{\int \rho^q(\vec{r}) e^{-F(q)/T} dq}{\int e^{-F(q)/T} dq} \quad (3.30)$$

et de façon identique pour la localisation. Étant donné qu'elles ne sont pas bien définies par l'Eq.(3.24), ces définitions restent arbitraires.

3.3 Évolution de la déformation avec la température : approche statistique

Pour comprendre l'impact de la température sur la déformation, il est intéressant de revenir sur l'origine des déformations en physique nucléaire. Si un noyau est déformé dans son état fondamental, cela signifie que les occupations des orbitales proches du niveau de Fermi ne sont pas toutes égales entre elles. La température va avoir pour effet de modifier les occupations des orbitales autour du niveau de Fermi. Toutes ces orbitales sont associées à une densité partielle particulière dont sa géométrie lui est propre. En particulier, il serait possible de dire que chaque densité partielle associée à une orbitale o possède un paramètre de déformation quadrupolaire β_2^o . Étant donné qu'à température élevée, un grand nombre d'orbitales posséderont un facteur d'occupation non nul, la somme de toutes les densités partielles associées à chacune de ces orbitales devrait tendre vers un cas sphérique. En effet, il n'y a pas de raison apparente pour laquelle des orbitales avec un β_2^o particulier devraient être privilégiées.

Formellement, il est possible d'écrire

$$\rho = \sum_{n,j} \sum_{m=-j}^j f(\epsilon_{njm}) |\psi_{njm}|^2 \quad (3.31)$$

avec f les facteurs d'occupations qui ne dépendent que de l'énergie de l'orbitale associée et ψ les fonctions d'ondes. Le cas sphérique correspond à $\epsilon_{njm} = \epsilon_{nj}$ (niveaux dégénérés) et donc

$$f(\epsilon_{njm})^{\text{sph}} = f(\epsilon_{nj}) \quad (3.32)$$

En revanche, dans le cas où Eq.(3.32) n'est pas respectée, c'est-à-dire lorsque les niveaux d'énergie ne sont plus dégénérés, la densité n'est plus sphérique et le noyau est déformé.

3.3.1 Approche statistique : génération aléatoire

Afin de confirmer ces interprétations, il est possible d'utiliser un modèle statistique comme celui proposé dans [Bea21]. Ce modèle est construit comme suit :

- des rapports de déformation dans le cas d'une symétrie axiale $b = \frac{b_x}{b_z} \in [0, 2]$ sont générés aléatoirement.

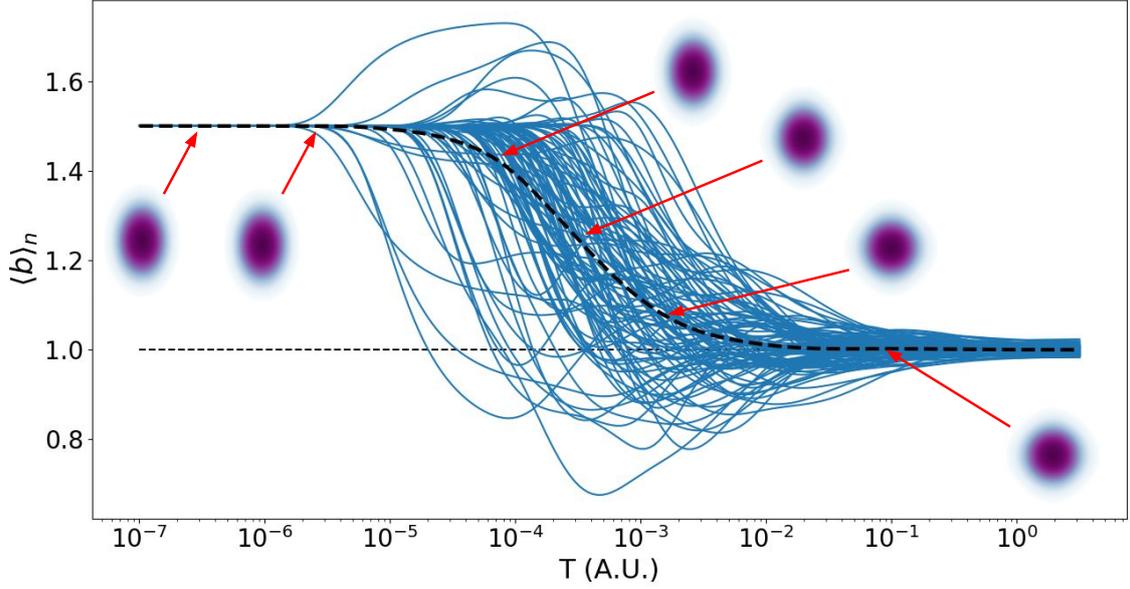


FIGURE 3.5 – $\langle b \rangle_n$ défini dans Eq.(3.33) en fonction de la température T pour 100 trajectoires générées aléatoirement avec $N = 1000$ et un gap $\Delta = 0$. La déformation initiale est fixée à $b_0 = 0$ pour toutes les générations. La densité totale définie par l'Eq.(3.35) est tracée pour quelques valeurs de températures avec $a = 3$ (unité arbitraire).

- pour chacune de ces déformations b_i , une énergie est générée de façon aléatoire¹¹ $E_{1 \geq i \geq N} \in [\Delta, E_M + \Delta]$ avec Δ un possible gap entre le fondamental et le niveau suivant et E_M l'énergie maximale autorisée. N représente le nombre total de particules dans le système. Dans la suite, nous prendrons $E_0 = 0$ MeV.
- on définit la déformation moyenne du système comme

$$\langle b \rangle_n = \frac{\sum_{i=1}^N n_i b_i}{\sum_{i=1}^N n_i} \quad (3.33)$$

où

$$n_i = \frac{1}{1 + e^{\beta(E_i - E_0)}} \quad (3.34)$$

une distribution de Fermi Dirac avec $\beta = 1/T$.

Évolution de la densité Afin d'étudier cette transition de phase et d'obtenir une représentation graphique, on introduit simplement des densités partielles associées à chaque niveau d'énergie qui prennent la forme d'une densité de Wood-Saxon

$$\rho_i^{WS}(r, z) = \frac{1}{1 + \exp \left\{ \frac{\sqrt{b_r^2 r^2 + b_z^2 z^2}}{a} \right\}} \quad (3.35)$$

11. La génération aléatoire permet de grossièrement mimer l'énergie des orbitales nucléaires.

avec a un paramètre à fixer correspondant à l'épaisseur de la surface. La densité totale du système peut alors être écrite comme

$$\rho(r, z) = \sum_i n_i \rho_i^{WS}(r, z) \quad (3.36)$$

Ce modèle peut ensuite être étudié numériquement et l'évolution de la déformation moyenne avec la température est présenté sur la Fig.3.5 pour 100 trajectoires différentes (générations aléatoires différentes). Présentés ainsi, ces résultats montrent que les fluctuations statistiques peuvent être importantes. En effet, il est impossible qu'à basse énergie une déformation élevée ($b \sim 2$ ou $b \sim 0$) devienne dominante avec le fondamental, faisant ainsi varier de manière brutale la moyenne des déformations du système. Cependant, en moyennant sur quelques centaines de générations (courbe en noir), la transition prend une forme typique de transition de phase dont la valeur de température critique est discutée dans les paragraphes suivants.

On remarque de plus l'évolution de la densité totale le long de cette transition de phase, passant progressivement d'une structure prolate à sphérique. Bien sûr, les densités associées à chaque génération de courbe peuvent varier, passant même parfois de prolate à oblate avant de redevenir sphérique.

Évolution de la température critique Ce simple modèle statistique permet aussi d'étudier les propriétés basiques de cette transition de phase, en particulier en étudiant l'évolution de la température critique avec le nombre N de niveaux concernés et Δ le gap entre le dernier niveau occupé et le niveau suivant.

Commençons par nous placer dans le cas où $\Delta = 0$. Il est intéressant de remarquer que, étant donné la répartition aléatoire des énergies, il est possible d'approximer cette répartition comme étant uniforme avec $\delta E = \frac{E_M}{N}$. Sous cette hypothèse, il est possible de grossièrement approximer la température critique comme le moment où l'énergie du premier état occupé devient égale à la température, i.e.

$$T_c \approx E_1 \approx \frac{E_M}{N} \quad (3.37)$$

On en déduit donc une évolution en $1/N$ de la température critique du système. Physiquement, ce résultat se comprend comme : si E_M reste fixe alors que N augmente, cela veut dire que la densité de niveaux du système augmente. Or si la densité de niveaux augmente, la diffusion sur les orbitales se fait plus facilement, i.e. à de plus basses énergies. Donc quand N augmente, T_c diminue. En présence d'un gap, cette formule devient

$$T_c \approx E_1 \approx \frac{E_M}{N} + \Delta \quad (3.38)$$

Ce résultat peut être comparé au résultat empirique¹² $T_c \sim \frac{\Delta(T=0)}{2}$ [Goo81 ; KVS07]. La même dépendance linéaire en Δ est obtenue.

12. Ce résultat se retrouve en considérant un modèle FTHF + BCS pour une couche à moitié remplie où l'équation de gap se résume à $\Delta = \Delta_0 \tanh(\frac{1}{2}\beta\Delta)$. La limite $\Delta \rightarrow 0$ donne alors $T_C = \frac{\Delta_0}{2}$.

3.3.2 Approche statistique : théorie de Landau

Une autre méthode statistique permettant d'étudier l'évolution de la déformation avec la température revient à étudier la transition de phase en utilisant une théorie de Landau (voir par exemple [LA84] pour plus de détails).

Étapes de la transition de phase Une fois restreint au cas axial encore une fois, et en considérant donc le paramètre β_2 comme paramètre d'ordre de la transition, il est possible d'écrire l'énergie libre comme

$$F = F(T, \beta_2) \quad (3.39)$$

Nous pouvons alors écrire (voir [LA84] pour plus de détails sur la dérivation des invariants)

$$F(T, \beta_2) = F_0^T(T) + F_2^T(T)\beta_2^2 - F_3^T(T)\beta_2^3 + F_4(T)\beta_2^4 + \dots \quad (3.40)$$

où les F_i^T sont des paramètres dépendants de la température. En particulier F_0^T représente l'énergie libre d'une forme sphérique. Une expansion similaire peut être faite par rapport à la température

$$F(T, \beta_2) = F_0^\beta(\beta_2) - E_2^\beta(\beta_2)T^2 + O(T^4) \quad (3.41)$$

où E_0^β correspond à l'énergie à température nulle.

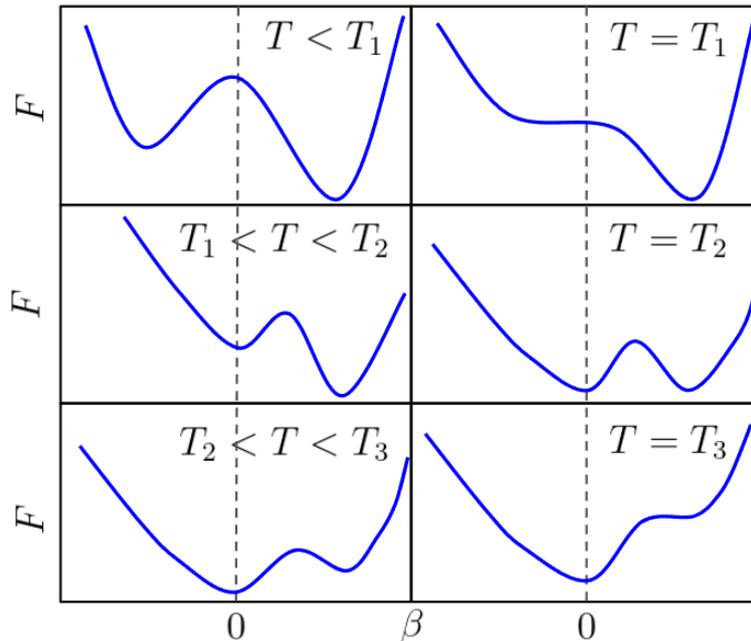


FIGURE 3.6 – Évolution schématique de l'énergie libre avec la température. Les températures T_1 , T_2 et T_3 sont définies dans le texte.

Il est intéressant de revenir sur Eq.(3.40) et d'étudier le signe des différentes composantes. Tout d'abord, $F_4^T \geq 0$ sinon le système est infiniment déformé dans son état fondamental. Ensuite, le signe de F_3^T déterminera si le système préfère être dans un état oblate ($F_3^T < 0$) ou prolatae ($F_3^T > 0$). Dans le cas où $F_3^T = 0$, le système sera dégénéré.

Finalement, le paramètre F_2^T encode pour la stabilité de l'extremum $\beta = 0$. En effet, si $F_2^T < 0$, l'extremum est instable et le système est déformé. À l'inverse, si $F_2^T > 0$ il s'agit d'un minimum stable et le système peut être sphérique¹³. De manière générale, les extrema sont donnés par $\frac{\partial F}{\partial \beta_2} = 0$

$$\beta_0 = 0 \quad (3.42a)$$

$$\beta_{1,2} = \frac{3F_3^T \pm \sqrt{9(F_3^T)^2 - 32F_2^T F_4^T}}{8F_4^T} \quad (3.42b)$$

avec $\beta_1 < \beta_2$.

Dans la suite, on se place dans le cas où le minimum global à température nulle correspond à une densité prolata (i.e. $F_3 > 0$). On distingue alors 7 étapes possibles résumées sur la Fig.3.6 :

1. $T < T_1$: β_1 et β_2 sont deux minima locaux et β_2 est le minimum global. β_0 est un maximum.
2. $T = T_1$: β_1 et β_0 sont confondus et représentent un point d'inflexion. β_2 est toujours le minimum global. T_1 est définie par l'équation $F_2^T = 0$.
3. $T_1 < T < T_2$: β_0 et β_2 sont des minima, mais β_2 reste le minimum global. β_1 correspond à un maximum.
4. $T = T_2$: $F(\beta_0) = F(\beta_2)$. Cette relation définit la température T_2 et se réécrit comme $3F_3^T = 4\sqrt{F_2^T F_4^T}$
5. $T_2 < T < T_3$: β_0 correspond au minimum de l'énergie libre.
6. $T = T_3$: $\beta_1 = \beta_2$ représente un point d'inflexion et β_0 correspond toujours au minimum de l'énergie libre. La température T_3 est définie par la relation $3F_3^T = 4\sqrt{2F_2^T F_4^T}$.
7. $T > T_3$: β_0 est le seul minimum de l'énergie libre.

Il est alors possible d'ajuster directement les coefficients des différentes fonctions F sur des données théoriques[LA84]. Pour cela, il est nécessaire de paramétrer les différents coefficients F_i^β . À l'ordre deux, les résultats autour de $\beta_2 \sim 0$ sont très satisfaisant, mais les résultats au-delà $|\beta_2| > 0.4$ montrent qu'une croissance $F \propto \beta_2^2$ n'est pas suffisante. Il est nécessaire d'aller à l'ordre 4 pour obtenir des résultats satisfaisants jusqu'à $|\beta_2| \sim 1 - 2$.

Ces différents modèles statistiques nous permettent d'obtenir une compréhension qualitative du phénomène de transition de phase, aussi bien la phase superfluide que déformée. Afin de compléter cette qualitative, dans la section suivante, nous nous intéressons aux résultats FT-RHB effectué sur différents noyaux.

3.4 Évolution de la déformation avec la température : résultats FT-RHB

Le modèle statistique présenté précédemment permet d'étudier très facilement différentes propriétés de la transition de phase de manière qualitative. On se propose donc

13. Il est toujours possible qu'un autre minimum stable existe à plus faible énergie si $F_3^T \neq 0$

ici d'aller plus loin en utilisant un modèle microscopique RMF. La fonctionnelle utilisée ici est une fonctionnelle relativiste traitant l'interaction par échange de mésons, comme présenté précédemment dans la section 1.3.3. La paramétrisation utilisée ici est DD-ME2. Le formalisme à température finie est implémenté dans un code relativiste Hartree-Bogoliubov à symétrie axiale. Nous nous intéressons en particulier à l'effet de la température sur la déformation et l'appariement.

3.4.1 Systématique

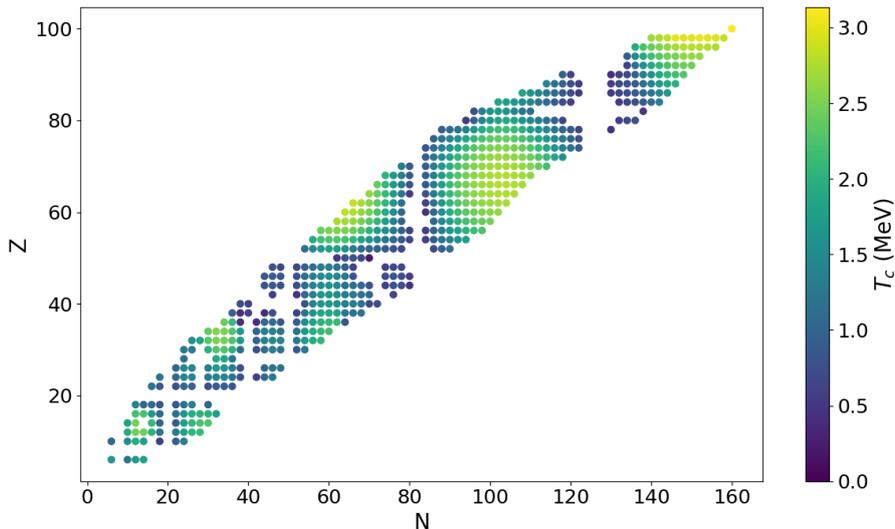


FIGURE 3.7 – Évolution de la température critique T_C en fonction du nombre de neutrons N et protons Z .

Afin d'étudier les propriétés de déformation avec la température au niveau RHB, des systématiques ont été mises en place. Des calculs FT-RHB ont été effectués pour ~ 1000 noyaux entre $A = 10$ et $A = 200$ entre $T = 0$ MeV et $T = 5$ MeV. Les fluctuations thermiques introduites dans l'Eq.(3.24) ne sont pour le moment pas traitées. La température critique est ici définie comme

$$\beta_2(T_C) = 0.1\beta_2(T = 0) \quad (3.43)$$

Il a été vérifié que les résultats ne dépendent que peu de cette définition qui fait sens ici étant donné que la transition de phase a lieu de manière abrupte, sur quelques centaines de keV tout au plus. On se propose donc dans la suite d'étudier les propriétés de la température critique sur une partie de la carte des noyaux.

Les résultats de la température critique en fonction du nombre de neutrons N et protons Z sont présentés sur la Fig.3.7. Cette structure fait apparaître les nombres magiques, et quelques noyaux proches, où la déformation des états fondamentaux est nulle. En dehors de ces lignes/colonnes représentant les nombres magiques, des zones apparaissent distinctement. Il est intéressant de remarquer que ces zones sont identiques à celle d'une carte des noyaux où la déformation serait affichée au lieu de la température critique. Ces premiers résultats montrent donc l'importance de la déformation de l'état

fondamental pour la température critique. Afin de faire transparaître ce résultat plus explicitement, il est possible de tracer directement la température critique en fonction de la déformation du GS, voir Fig.3.8. Une tendance apparaît dans ces résultats : la

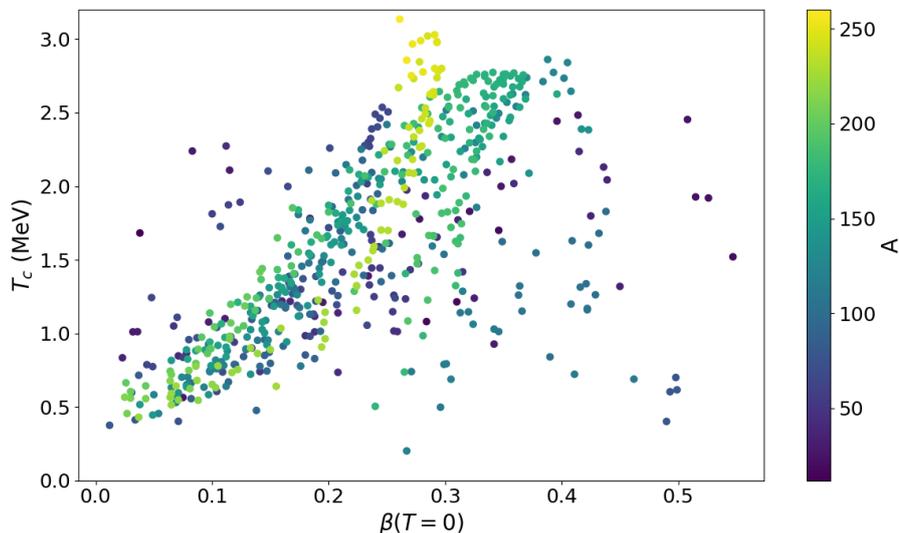


FIGURE 3.8 – Évolution de la température critique T_C en fonction du nombre de nucléons A et de la déformation initiale $\beta_2(T=0)$.

température critique est approximativement proportionnelle à la déformation de l'état fondamental. En particulier, il semble que deux tendances apparaissent : pour les noyaux $A \lesssim 200$, l'évolution est linéaire avec un coefficient de proportionnalité $T_C \sim 7\beta_2^0$, alors que pour $A \gtrsim 200$, $T_C \sim 18\beta_2^0 + \text{cst.}$ Il est cependant nécessaire de souligner que, dans le cas des noyaux légers (représentés en bleu foncé sur Fig.3.8), leur répartition ne semble pas suivre une évolution linéaire, mais exhibe plutôt un caractère aléatoire. Cette propriété est directement liée au nombre de nucléons relativement faible composant ces noyaux légers, nous éloignant beaucoup de l'approximation thermodynamique. De manière générale, comme discuté précédemment, les systèmes finis peuvent être le siège de fluctuations particulièrement importantes.

Des études récentes se sont intéressées à l'évolution de la température critique avec la déformation initiale des noyaux [ZN18] au sein de chaînes isotopiques (principalement dans les noyaux très riches en neutrons). Ces études ont montré une corrélation linéaire entre la température critique et la déformation initiale au sein d'une même chaîne isotopique. Afin d'étudier cette corrélation, les résultats utilisant la paramétrisation DD-ME2 à température finie sont tracés sur la Fig.3.9 pour 6 chaînes isotopiques. L'évolution linéaire est bien respectée et le coefficient directeur semble augmenter avec le nombre de nucléons. La dépendance linéaire apparaît à partir des noyaux $A \sim 100$. En revanche, l'augmentation du coefficient directeur avec le nombre de nucléons n'est une propriété qui n'a été observée que dans les noyaux très lourds $A \gtrsim 200$.

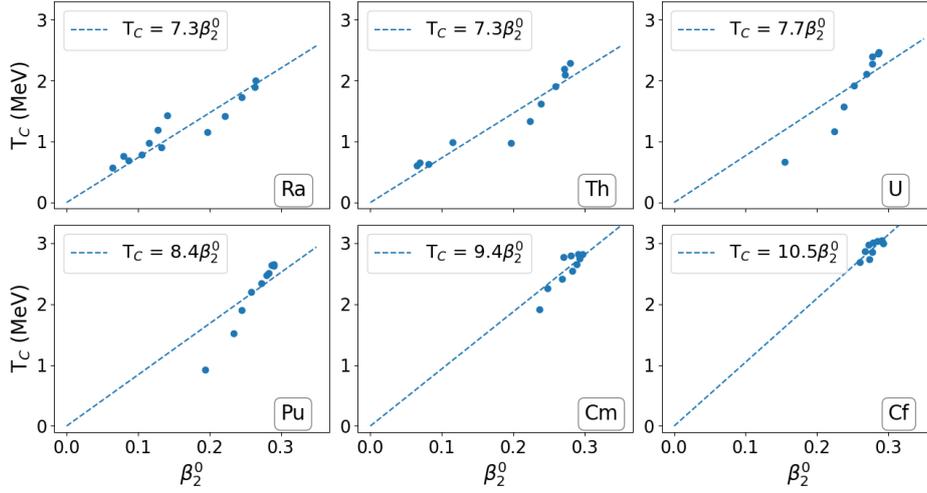


FIGURE 3.9 – Évolution de la température critique T_C en fonction de la déformation initiale $\beta_2(T = 0)$ dans certaines chaînes isotopiques. Le meilleur ajustement linéaire est tracé en pointillés pour chaque chaîne.

3.4.2 Impact des fluctuations thermiques

Les systématiques présentées ci-dessus ne prenaient pas en compte les fluctuations thermiques autour du minimum. La prise en compte de ces fluctuations nécessite en effet d'effectuer de nombreux calculs à déformation contrainte afin d'obtenir l'énergie libre des différents états.

On se propose ici d'étudier le cas d'un noyau léger (le ^{20}Ne) et d'un noyau plus lourd (le ^{164}Er) où on s'attend à des différences importantes au niveau de la transition de phase.

Effet sur la température critique

Les résultats sont présentés sur la Fig.3.10. Comme attendu, les résultats FT-RHB (sans prise en compte des fluctuations) présentent une transition de phase très brutale autour de 1.5 MeV pour le ^{20}Ne et 2.7 MeV pour le ^{164}Er . La prise en compte des fluctuations modifie de manière importante l'évolution de la déformation avec la température. En dessous de ~ 1 MeV, les comportements restent identiques puis le mélange statistique des configurations adouci la transition. Il est intéressant de remarquer que la déformation à haute température converge vers une valeur non nulle $\beta_2 \approx 0.1$ pour les deux noyaux. Cette déformation non nulle s'explique par le fait que l'énergie libre ne correspond pas exactement à une parabole centrée sur zéro. Par conséquent, certains états (ici prolate) vont être favorisés et la contribution totale de ces états ne tend pas vers 0.

Il est aussi intéressant d'étudier l'entropie et la capacité calorifique C_V définie comme

$$C_V = T \frac{\partial S}{\partial T} \quad (3.44)$$

Ces quantités sont tracées sur la partie droite de Fig.3.10. Dans le cas du ^{20}Ne , l'entropie

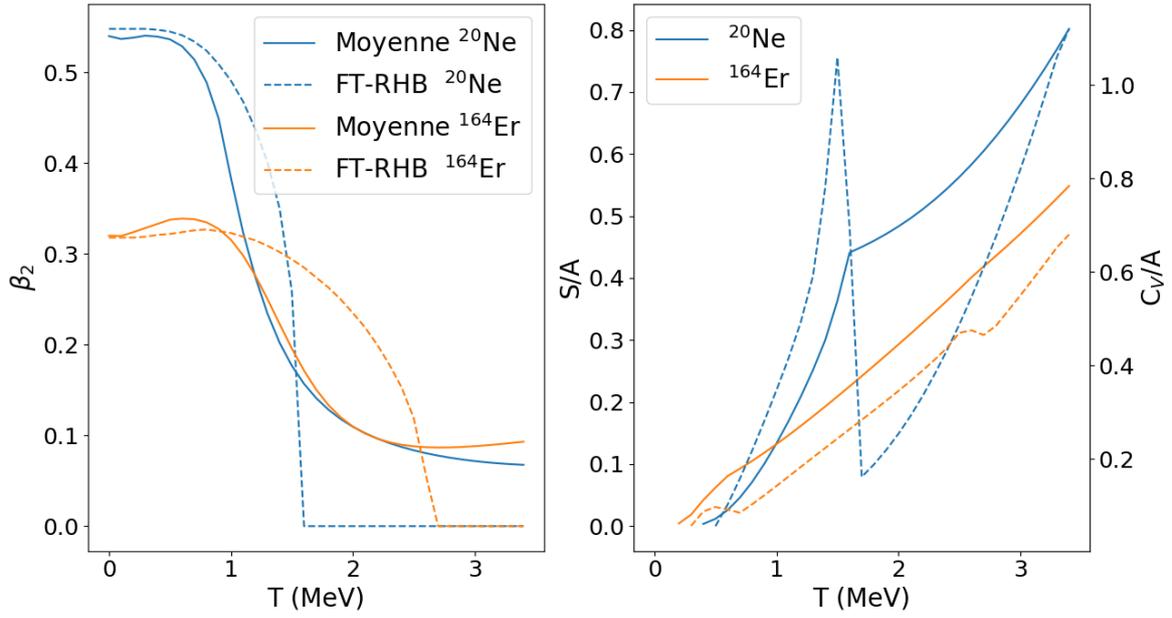


FIGURE 3.10 – À gauche sont présentées les évolutions de la déformation quadrupolaire avec la température dans le cas du ^{20}Ne (courbe bleue) et du ^{164}Er (courbe orange). Les courbes en pointillés correspondent aux résultats FT-RHB sans prise en compte des fluctuations thermiques. Les courbes en trait plein représentent les résultats prenant en compte les fluctuations thermiques. À droite sont tracées l'entropie par nucléons en trait plein et la capacité calorifique $C_V = T \frac{\partial S}{\partial T}$ par nucléons en fonction de la température.

change brutalement de pente autour de $T = 1.5$ MeV, température qui correspond à la transition de phase. Ce brusque changement crée une discontinuité dans la capacité calorifique, signal fort d'une transition de phase. Le cas du ^{164}Er est similaire bien que moins flagrant. Le changement de pente de l'entropie n'est pas visible à l'œil nu, mais la capacité calorifique indique bien une transition de phase autour de $T = 2.7$ MeV. Une deuxième discontinuité est présente dans C_V à très basse énergie, autour de $T = 0.3$ MeV qui correspond à la transition du système d'une phase superfluide vers une phase non-superfluide.

Energie libre

Afin de mieux appréhender ces résultats, sur la Fig.3.11 sont tracées l'énergie libre et les probabilités associées à différentes températures. À température nulle, l'état qui minimise l'énergie libre (qui est alors équivalente à l'énergie du système) est le seul état contribuant à la valeur moyenne d'une observable (ici la déformation). À mesure que la température augmente, la topologie de l'énergie libre se modifie et la distribution de probabilité prend des valeurs non nulles au niveau des différents minima de l'énergie libre. Il est possible de définir une température critique à partir de laquelle le minimum global de l'énergie libre se trouve en $\beta_2 = 0$ qui correspondrait ici à $T_C \approx 2.5$ MeV. Cependant, comme indiqué sur la Fig.3.10, cette température critique ne signifie pas que le système est sphérique. Les fluctuations thermiques autour de $\beta_2 = 0$ ne sont pas uniformément réparties et le système exhibe une certaine déformation généralement

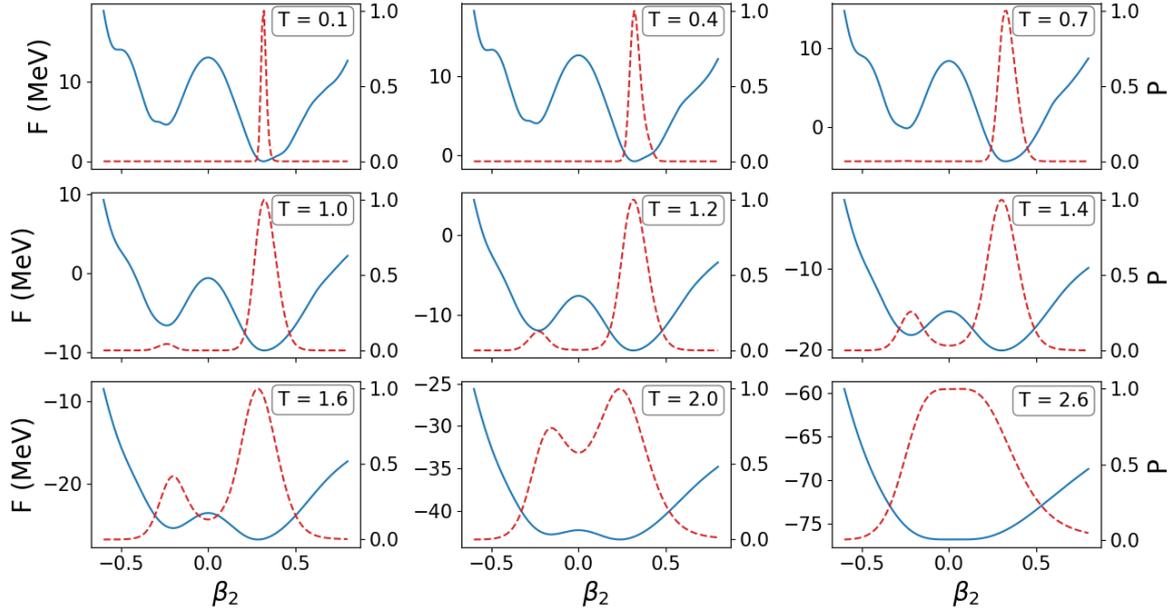


FIGURE 3.11 – Évolution de l'énergie libre (en bleu) avec la déformation tracée à différentes températures. Les probabilités associées à chaque configuration déformée sont tracées en rouge. Les températures sont données en MeV.

non nulle. En approximant la forme de la distribution de probabilité à une Gaussienne, on peut calculer qu'à $T = 2.5$ MeV, cette Gaussienne est centrée sur $\beta_2 \approx 0.07$ et son écart-type est donné par $\sigma \approx 0.26$. Cette valeur moyenne correspond à la valeur asymptotique que prend la déformation sur la Fig.3.10.

3.5 Évolution de l'agrégation avec la température

Il est possible de définir de la même façon une densité moyenne qui prend en compte les fluctuations thermiques ainsi qu'une localisation moyenne. Comme discuté précédemment, ces quantités restent mal définies étant donné que la formule (3.24) n'est valide que pour des opérateurs. Cependant, on se propose ici d'utiliser une formulation identique où la densité et la localisation sont moyennées comme

$$\bar{\rho}(\vec{r}) = \frac{\int \rho^q(\vec{r}) e^{-F(q)/T} dq}{\int e^{-F(q)/T} dq} \quad (3.45a)$$

$$\bar{C}_{\tau\sigma}(\vec{r}) = \frac{\int C_{\tau\sigma}^q(\vec{r}) e^{-F(q)/T} dq}{\int e^{-F(q)/T} dq} \quad (3.45b)$$

Les résultats sont présentés sur la Fig.3.12 dans le cas du ^{20}Ne . On remarque tout d'abord, comme étudié précédemment, que la déformation du noyau avec prise en compte de la moyenne statistique ne tend pas exactement vers 0, mais reste légèrement oblate à haute température. La localisation moyennée montre que les clusters se dissolvent plus rapidement que sans moyenne. Ce résultat est facilement interprétable étant donné que le mélange avec des configurations de moins en moins déformées

favorisent un comportement de fluide quantique.

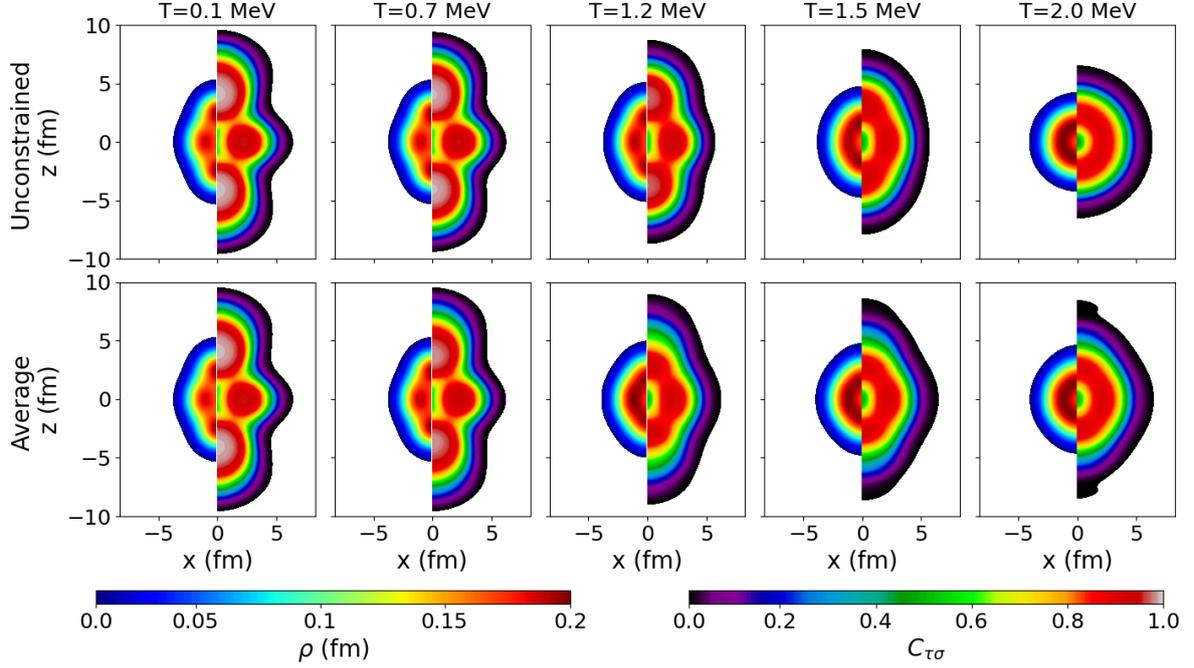


FIGURE 3.12 – Évolution de la densité et de la localisation dans le ^{20}Ne avec la température. La première ligne correspond aux quantités non moyennées et la seconde aux quantités moyennées.

On remarque que les propriétés de localisation disparaissent bien avant la température critique. Ce phénomène a du sens étant donné que, même pour une température de quelques dixièmes de MeV, l'élargissement de la surface d'énergie potentielle (PES) va favoriser le mélange de configurations différentes (cf. Fig.3.11). Or, la fonction de localisation est très sensible à la densité locale qu'un mélange de configurations peut facilement modifier. Cependant, aux vues de la discussion présentées au début de ce chapitre concernant la fonction de localisation, il peut être plus judicieux de définir la phase cluster comme le moment où des surdensités sont présentes. Dans ce cas, nous obtenons $T_C^{\text{cluster}} \sim 1.3$ MeV contre $T_C^{\beta_2} \sim 1.8$ MeV.

3.6 Conclusion

Les phénomènes de transition de phase au sein du noyau sont de plusieurs natures. Nous avons rappelé les principaux résultats à la phase d'agrégation nucléaire qui se trouve entre une phase cristalline et une phase de liquide quantique. Le phénomène d'agrégation nucléaire a lieu principalement dans les noyaux légers avec des interactions possédant un potentiel suffisamment profond afin de localiser plus facilement les fonctions d'onde.

La mesure de localisation $C_{\tau\sigma}$ a été introduite afin d'étudier le phénomène d'agrégation de manière locale. Le cas du ^{20}Ne a permis d'illustrer son utilité et d'exhiber la structure en clusters α présente dans son état fondamental. Cependant, des réserves

ont été prononcées quant à son utilisation pour caractériser les phases clusters étant donné que le maximum de la localisation est généralement atteint à la surface (où la probabilité de trouver deux nucléons de même spin et isospin est en effet faible) et non aux endroits exhibant une surdensité.

Les transitions de phase avec la température ont aussi été étudiées, principalement sur l'effet de la température sur la déformation des noyaux. Des modèles statistiques ont été présentés permettant d'obtenir une compréhension qualitative de cette transition de phase d'un état déformé vers un état sphérique. Puis, des calculs systématiques sur un grand nombre de noyaux ont été effectués, permettant de dégager une tendance reliant la température critique à la déformation initiale qui seraient linéairement proportionnelles. Finalement, les effets de la prise en compte des fluctuations thermiques à l'aide d'une moyenne sur la déformation ont été étudiés. En particulier, il apparaît que la déformation à haute température des systèmes nucléaires ne tend pas exactement vers zéro en raison de ces fluctuations. Cette propriété est expliquée par la topologie de la PES qui, bien que minimale en $\beta_2 = 0$, n'est pas symétrique, ce qui favorise une configuration moyenne oblate ou prolata. Les effets de la température sur l'agrégation nucléaire ont été discutés avec et sans la prise en compte des fluctuations thermiques. Il apparaît que les propriétés de localisation disparaissent avec la température, généralement bien avant la température critique du système pour la déformation.

Références

- [Aru+05] P. ARUMUGAM et al. « Relativistic mean field study of clustering in light nuclei ». In : *Physical Review C* 71.6 (22 juin 2005), p. 064308. DOI : [10.1103/PhysRevC.71.064308](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.71.064308) (cf. p. 58).
- [BE90] A. D. BECKE et K. E. EDGEcombe. « A simple measure of electron localization in atomic and molecular systems ». In : *The Journal of Chemical Physics* 92.9 (24 jan. 1990), p. 5397. ISSN : 0021-9606. DOI : [10.1063/1.458517](https://doi.org/10.1063/1.458517) (cf. p. 61, 62).
- [Bea21] Yann BEAUJEAULT-TAUDIÈRE. « Study of the multipolar excitations in cold and hot, deformed and superfluid systems with the method of finite amplitudes ». Thèse de doct. Université Paris-Saclay, 26 oct. 2021 (cf. p. 68).
- [CG08] Philippe CHOMAZ et Francesca GULMINELLI. « Phase Transitions in Finite Systems using Information Theory ». In : *AIP Conference Proceedings* 970.1 (14 jan. 2008), p. 175. ISSN : 0094-243X. DOI : [10.1063/1.2839119](https://doi.org/10.1063/1.2839119) (cf. p. 65).
- [DR20] T. DUGUET et W. RYSSSENS. « Zero-pairing and zero-temperature limits of finite-temperature Hartree-Fock-Bogoliubov theory ». In : *Physical Review C* 102.4 (27 oct. 2020), p. 044328. DOI : [10.1103/PhysRevC.102.044328](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.102.044328) (cf. p. 66).
- [Ebr+12] J.-P. EBRAN et al. « How atomic nuclei cluster ». In : *Nature* 487.7407 (juill. 2012), p. 341-344. ISSN : 1476-4687. DOI : [10.1038/nature11246](https://doi.org/10.1038/nature11246) (cf. p. 58, 59).

- [Ebr+13] J.-P. EBRAN et al. « Localization and clustering in the nuclear Fermi liquid ». In : *Physical Review C* 87.4 (2013), p. 044307. DOI : [10.1103/PhysRevC.87.044307](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.87.044307) (cf. p. 60, 61).
- [Ebr+18] J.-P. EBRAN et al. « Single-particle spatial dispersion and clusters in nuclei ». In : *Physical Review C* 97.6 (juin 2018), p. 061301. DOI : [10.1103/PhysRevC.97.061301](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.97.061301) (cf. p. 60).
- [Ebr+20] J.-P. EBRAN et al. « α -particle condensation : A nuclear quantum phase transition ». In : *Physical Review C* 102.1 (6 juill. 2020), p. 014305. DOI : [10.1103/PhysRevC.102.014305](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.102.014305) (cf. p. 58, 64).
- [FS00] Hans FELDMEIERS et Jürgen SCHNACK. « Molecular dynamics for fermions ». In : *Reviews of Modern Physics* 72.3 (1^{er} juill. 2000), p. 655-688. DOI : [10.1103/RevModPhys.72.655](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.72.655) (cf. p. 58).
- [Goo81] Alan L. GOODMAN. « Finite-temperature HFB theory ». In : *Nuclear Physics A* 352.1 (26 jan. 1981), p. 30-44. ISSN : 0375-9474. DOI : [10.1016/0375-9474\(81\)90557-1](https://doi.org/10.1016/0375-9474(81)90557-1) (cf. p. 66, 70).
- [GS13] M. GIROD et P. SCHUCK. « α -Particle Clustering from Expanding Self-Conjugate Nuclei within the Hartree-Fock-Bogoliubov Approach ». In : *Physical Review Letters* 111.13 (25 sept. 2013), p. 132503. DOI : [10.1103/PhysRevLett.111.132503](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.111.132503) (cf. p. 58).
- [Ich+11] T. ICHIKAWA et al. « Linear Chain Structure of Four- α Clusters in ^{16}O ». In : *Physical Review Letters* 107.11 (9 sept. 2011), p. 112501. DOI : [10.1103/PhysRevLett.107.112501](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.107.112501) (cf. p. 58).
- [KH01] Yoshiko KANADA-EN'YO et Hisashi HORIUCHI. « Structure of Light Unstable Nuclei Studied with Antisymmetrized Molecular Dynamics ». In : *Progress of Theoretical Physics Supplement* 142 (1^{er} mars 2001), p. 205-263. ISSN : 0375-9687. DOI : [10.1143/PTPS.142.205](https://doi.org/10.1143/PTPS.142.205) (cf. p. 58).
- [KVS07] E. KHAN, Nguyen VAN GIAI et N. SANDULESCU. « Pairing interactions and vanishing pairing correlations in hot nuclei ». In : *Nuclear Physics A* 789.1 (1^{er} juin 2007), p. 94-102. ISSN : 0375-9474. DOI : [10.1016/j.nuclphysa.2007.03.005](https://doi.org/10.1016/j.nuclphysa.2007.03.005) (cf. p. 70).
- [LA84] S. LEVIT et Y. ALHASSID. « Phenomenology of shape transitions in hot nuclei ». In : *Nuclear Physics A* 413.3 (1984), p. 439-474. ISSN : 0375-9474. DOI : [10.1016/0375-9474\(84\)90421-4](https://doi.org/10.1016/0375-9474(84)90421-4) (cf. p. 71, 72).
- [Mar+06] J. A. MARUHN et al. « α -cluster structure and exotic states in a self-consistent model for light nuclei ». In : *Physical Review C* 74.4 (26 oct. 2006), p. 044311. DOI : [10.1103/PhysRevC.74.044311](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.74.044311) (cf. p. 58).
- [Mar+19] P. MAREVIĆ et al. « Cluster structures in ^{12}C from global energy density functionals ». In : *Physical Review C* 99.3 (mars 2019), p. 034317. DOI : [10.1103/PhysRevC.99.034317](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.99.034317) (cf. p. 58).
- [MER03] V. MARTIN, J. L. EGIDO et L. M. ROBLEDO. « Thermal shape fluctuation effects in the description of hot nuclei ». In : *Physical Review C* 68.3 (23 sept. 2003), p. 034327. DOI : [10.1103/PhysRevC.68.034327](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.68.034327) (cf. p. 67).

- [MHG18] Jérôme MARGUERON, Rudiney HOFFMANN CASALI et Francesca GULMINELLI. « Equation of state for dense nucleonic matter from metamodeling. I. Foundational aspects ». In : *Physical Review C* 97.2 (28 fév. 2018), p. 025805. DOI : [10.1103/PhysRevC.97.025805](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.97.025805) (cf. p. 58).
- [Rei+11] P.-G. REINHARD et al. « Localization in light nuclei ». In : *Physical Review C* 83.3 (mars 2011), p. 034312. DOI : [10.1103/PhysRevC.83.034312](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.83.034312) (cf. p. 58, 61-63).
- [RMS82] G. RÖPKE, L. MÜNCHOW et H. SCHULZ. « Particle clustering and Mott transitions in nuclear matter at finite temperature : (I). Method and general aspects ». In : *Nuclear Physics A* 379.3 (10 mai 1982), p. 536-552. ISSN : 0375-9474. DOI : [10.1016/0375-9474\(82\)90013-6](https://doi.org/10.1016/0375-9474(82)90013-6) (cf. p. 58).
- [Rob14] Luis M. ROBLED0. « Clustering in atomic nuclei : a mean field perspective ». In : *Journal of Physics : Conference Series* 569 (déc. 2014), p. 012038. ISSN : 1742-6596. DOI : [10.1088/1742-6596/569/1/012038](https://doi.org/10.1088/1742-6596/569/1/012038) (cf. p. 58).
- [Toh+01] A. TOHSAKI et al. « Alpha Cluster Condensation in 12 and ^{16}O ». In : *Physical Review Letters* 87.19 (17 oct. 2001), p. 192501. DOI : [10.1103/PhysRevLett.87.192501](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.87.192501) (cf. p. 58).
- [Typ+10] S. TYPEL et al. « Composition and thermodynamics of nuclear matter with light clusters ». In : *Physical Review C* 81.1 (13 jan. 2010), p. 015803. DOI : [10.1103/PhysRevC.81.015803](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.81.015803) (cf. p. 63).
- [Typ14] S. TYPEL. « Neutron skin thickness of heavy nuclei with α -particle correlations and the slope of the nuclear symmetry energy ». In : *Physical Review C* 89.6 (30 juin 2014), p. 064321. DOI : [10.1103/PhysRevC.89.064321](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.89.064321) (cf. p. 64).
- [ZN18] W. ZHANG et Y. F. NIU. « Critical temperature for shape transition in hot nuclei within covariant density functional theory ». In : *Physical Review C* 97.5 (2018), p. 054302. DOI : [10.1103/PhysRevC.97.054302](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.97.054302) (cf. p. 74).

Procédure d'ajustement des fonctionnelles et effet d'un terme tenseur au niveau RHB

Ce chapitre est partiellement adapté des travaux décrits dans F. Mercier et al. (2022) (en préparation). Des résultats complémentaires sont aussi présentés.

Sommaire

4.1 Terme tenseur au niveau RMF	85
4.1.1 Équation du mouvement	86
4.2 Procédure d'ajustement	87
4.2.1 Paramétrisation des fonctionnelles	87
4.2.2 Données expérimentales	88
4.2.3 Protocole d'optimisation	89
4.2.4 Résultats	92
4.3 Analyse de l'échantillonnage	95
4.3.1 Les paramètres	95
4.3.2 Corrélations	97
4.4 Applications et discussion	100
4.4.1 Matière nucléaire infinie	100
4.4.2 Énergie de liaison et rayons	101
4.4.3 Impact de la déformation	103
4.4.4 Gaps	104
4.4.5 Densité	105
4.5 Conclusion	107
Références	108

Nous avons vu, dans les deux premiers chapitres, que la formulation covariante du problème à N-corps quantique fournit un mécanisme naturel pour l'apparition des parties centrale et spin-orbite (SO) de l'interaction en termes de combinaisons de potentiels scalaires et vectoriels. Cela permet de traiter ces termes sur un pied d'égalité, d'une manière plus cohérente que dans un cadre non relativiste. Bien que la partie centrale du potentiel soit relativement bien connue et comprise, le terme SO peut être plus difficile à appréhender.

Le couplage tensoriel est particulièrement important pour l'interaction nucléon-nucléon dans le vide où sa contribution est indispensable à la description de l'énergie de liaison du deutéron [RS41] et du moment quadripolaire électrique non nul du deutéron [GS42]. Dans la matière nucléaire, l'impact des termes tensoriels a été étudié en détail pour différentes interactions, qu'elles soient covariantes [Ruf+88; Lon+07; TA20] ou non [SBF77; DG80; Les+07]. Ces études ont montré que, au niveau Hartree, les effets des termes tenseurs restent faibles. En revanche, des effets importants sur les propriétés de la matière infinie ont été observés avec une incompressibilité plus faible et une masse effective des nucléons plus élevée.

La contribution au potentiel d'un terme tenseur entre deux nucléons 1 et 2 est généralement identifiée comme étant de la forme

$$V_T \propto S_{12} = 3 \left(\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{k} \right) \left(\vec{\sigma}_2 \cdot \vec{k} \right) - \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 k^2 \quad (4.1)$$

avec k l'impulsion transférée. Cette quantité, bien définie dans un cadre non-relativiste, se doit d'être modifiée ici pour prendre en compte la structure de Lorentz. Dans ce cadre, l'opérateur de spin $\vec{S} = \frac{1}{2}\vec{\sigma}$ se met sous la forme $\vec{S} = -\frac{1}{2}\gamma_0\gamma_5\vec{\gamma}$. Une réduction non relativiste des potentiels mésoniques montrent alors que ces derniers possèdent déjà une contribution tensorielle au potentiel dans tous les canaux (σ , ω et ρ) [Jia+15]. On se propose ici d'ajouter des couplages tensoriels explicitement dans le Lagrangien d'origine dans les canaux vectoriels qui correspondent à des couplages dérivatifs¹. Dans cette approche covariante par échange de mésons, les termes de dérivées sont les termes les plus simples à ajouter et les termes tenseurs peuvent donc également être considérés comme la prochaine contribution pertinente à une interaction EDF².

Historiquement, la première apparition de couplages tensoriels explicites dans le cadre des théories RMF peut être trouvée dans [Ruf+88], avec un couplage non linéaire pour le degré de liberté scalaire-scalaire dans les noyaux sphériques. Cette étude a montré un impact négligeable du couplage tensoriel ρ , tandis que le couplage ω semblait améliorer légèrement l'ajustement de l'interaction, avec une masse effective accrue et une incompressibilité plus faible. De nombreuses études ont ensuite été menées pour étendre ces calculs au cas déformé au niveau RMF [JO91]. Des études spécifiques ont été réalisées pour comprendre l'effet des termes tensoriels sur les séparations spin-orbite [Ren+95; FRS98; Jia+15], les gaps entre couches [WDL13], l'épaisseur de la surface

1. Il est en théorie possible d'ajouter également un couplage dérivatif dans le canal σ mais ce couplage ne sera pas étudié ici.

2. Bien que cet argument reste subjectif étant donné qu'il ne s'agit pas d'une théorie effective caractérisée par un "power counting".

[Jia+05], les séparations pseudo-spin-orbite [Lon+07], les propriétés de la matière nucléaire [TA20], etc. Cependant, une étude de l'interaction des termes tensoriels avec l'appariement et la déformation, dans une approche covariante, fait encore défaut.

Dans ce travail, de nouvelles paramétrisations EDF covariantes (cEDF) sont introduites au niveau RHB avec une dépendance en densité dans les constantes de couplage. Ces nouvelles paramétrisations sont ajustées au moyen de la procédure des moindres carrés en utilisant à la fois la méthode Markov-Chain-Monte-Carlo [Nea93 ; For+13] et la minimisation simplex [Pre89]. Les contraintes sur l'énergie de liaison, les rayons, les séparations spin-orbite et les gaps entre niveaux, ainsi que plusieurs contraintes provenant des propriétés de la matière infinie sont considérées. L'effet du couplage tensoriel est étudié en détail dans des systèmes à la fois sphériques et déformés axialement.

Ce chapitre est organisé comme suit : la section 4.1 introduit le cadre théorique, tandis que la section 4.2 se concentre sur la procédure d'ajustement. Les résultats généraux du processus de minimisation sont donnés dans la section 4.3, et les applications à la matière infinie, aux énergies de liaison, aux rayons, à l'effet de la déformation, aux séparations SO, aux gaps et aux densités sont présentées dans la section 4.4.

4.1 Terme tenseur au niveau RMF

L'ajout de couplages tenseurs au niveau RMF se fait en introduisant un couplage dérivatif de la forme $g_\phi^T \bar{\psi} \partial \phi \psi$ avec ϕ un champ mésonique. Dans le cas qui nous intéresse ici, nous introduisons deux couplages tenseurs, un dans le canal vecteur-isoscalaire ω et un dans le canal vecteur-isovecteur ρ . On rappelle ici par convenance la densité Lagrangienne totale

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_{\text{nucleon}} + \mathcal{L}_{\text{meson}} + \mathcal{L}_{\text{EM}} \quad (4.2)$$

avec la partie nucléonique donnée par le Lagrangien de Dirac et les termes d'interaction

$$\mathcal{L}_{\text{nucleon}} = \bar{\psi} (i\gamma^\mu D_\mu - \sigma_{\mu\nu} T^{\mu\nu} - M^*) \psi \quad (4.3)$$

avec γ_μ les matrices de Dirac usuelles et $\sigma_{\mu\nu} = -\frac{i}{4} [\gamma_\mu, \gamma_\nu]$. Le spineur adjoint est défini comme $\bar{\psi} = \psi^\dagger \gamma^0$ et la masse effective de Dirac s'écrit

$$M^* = M - g_\sigma \sigma \quad (4.4)$$

avec σ un champ scalaire-isoscalaire. La dérivée covariante s'écrit comme

$$D_\mu = \partial_\mu - g_\omega \omega_\mu - g_\rho \vec{\rho}_\mu \cdot \vec{\tau} - e A_\mu \frac{1 + \tau_3}{2} \quad (4.5)$$

avec ω_μ un champ vecteur-isoscalaire, ρ_μ un champ vecteur-isovecteur et A_μ le potentiel électromagnétique. τ_3 représente la troisième composante des matrices de Pauli. Les constantes g_i représentent les constantes de couplage. Finalement, la partie tenseur du Lagrangien nucléonique prend la forme

$$T^{\mu\nu} = \frac{g_\omega^T}{2M} \Omega^{\mu\nu} + \frac{g_\rho^T}{2M} \vec{\mathcal{R}}^{\mu\nu} \cdot \vec{\tau} \quad (4.6)$$

avec $\Omega^{\mu\nu} = \partial^\mu \omega^\nu - \partial^\nu \omega^\mu$ et $\vec{\mathcal{R}}^{\mu\nu} = \partial^\mu \vec{\rho}^\nu - \partial^\nu \vec{\rho}^\mu$. Les constantes g_i^T représentent les constantes de couplage tenseur.

La partie mésonique de notre Lagrangien et la partie électromagnétique s'écrivent

$$\mathcal{L}_{\text{meson}} = \frac{1}{2} (\partial_\mu \sigma \partial^\mu \sigma - m_\sigma^2 \sigma^2) - \frac{1}{4} (\Omega_{\mu\nu} \Omega^{\mu\nu} - 2m_\omega^2 \omega_\mu \omega^\mu) - \frac{1}{4} (\vec{\mathcal{R}}_{\mu\nu} \cdot \vec{\mathcal{R}}^{\mu\nu} - 2m_\rho^2 \vec{\rho}_\mu \cdot \vec{\rho}^\mu) \quad (4.7)$$

$$\mathcal{L}_{\text{EM}} = -\frac{1}{4} (F_{\mu\nu} F^{\mu\nu}) \quad (4.8)$$

avec $F^{\mu\nu} = \partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu$ le tenseur électromagnétique.

4.1.1 Équation du mouvement

Nous utilisons ici les mêmes approximations que celles explicitées dans le chapitre 2 i.e. seule la composante temporelle et la troisième composante de l'isospin des champs mésoniques est prise en compte ($\omega_\mu \rightarrow \omega_0 \equiv \omega$ et $\vec{\rho}_\mu \rightarrow \vec{\rho}_0 \equiv \vec{\rho} \rightarrow \rho_3$), et l'approximation sans mer de Dirac est aussi appliquée. Les équations d'Euler-Lagrange peuvent alors être dérivées de manière usuelle et pour la partie fermionique on obtient

$$[-i\boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\nabla} + \beta M^*(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}) + \beta \boldsymbol{\sigma}^0 \cdot \mathbf{T}(\mathbf{r})] \psi_i(\mathbf{r}) = \epsilon_i \psi_i(\mathbf{r}) \quad (4.9)$$

où, en utilisant les différentes approximations, la composante tenseur s'écrit

$$\sigma_{\mu\nu} T^{\mu\nu} = \sigma^{\mu\nu} [\partial_\mu \phi_\nu - \partial_\nu \phi_\mu] \quad (4.10)$$

$$= \sigma^{i0} \partial_i \phi_0 - \sigma^{0i} \partial_i \phi_0 \quad (4.11)$$

$$= 2\sigma^{i0} \partial_i \phi_0 \quad (4.12)$$

$$\sigma_{\mu\nu} T^{\mu\nu} = \boldsymbol{\sigma}^0 \cdot \mathbf{T} \quad (4.13)$$

$$(4.14)$$

avec $\boldsymbol{\sigma}^0 = \sigma^{i0}$ et

$$\mathbf{T} = -\frac{g_\omega^T}{M} \boldsymbol{\nabla} \omega - \tau_3 \frac{g_\rho^T}{M} \boldsymbol{\nabla} \rho \quad (4.15)$$

Les potentiels scalaire et vecteur prennent les mêmes formes que précédemment

$$S_i = g_\sigma \sigma \quad (4.16a)$$

$$V_i = g_\omega \omega + \tau_3 g_\rho \rho_3 + \frac{1 + \tau_3}{2} g_\gamma A_\gamma + V^{(R)} \quad (4.16b)$$

avec le potentiel de réarrangement

$$V_i^{(R)} = \frac{dg_\omega}{d\rho^{(v)}} \rho_\omega \omega + \tau_3 \frac{dg_\rho}{d\rho^{(v)}} \rho_\rho \rho_3 \quad (4.17)$$

Il est important de remarquer ici que si les constantes de couplage tenseur sont prises comme dépendantes de la densité, de nouveaux termes doivent être pris en compte dans le potentiel de réarrangement. Par soucis de simplicité, une telle dépendance n'est

pas prise en compte ici³. Finalement, les équations d'Euler-Lagrange pour les parties mésoniques s'écrivent comme

$$-\Delta\sigma + m_\sigma^2\sigma = -g_\sigma\rho_\sigma \quad (4.18a)$$

$$-\Delta\omega + m_\omega^2\omega = g_\omega\rho_\omega + \frac{g_\omega^T}{M}\nabla \cdot \beta\sigma^0\omega \quad (4.18b)$$

$$-\Delta\rho_3 + m_\omega^2\rho_3 = g_\rho\rho_\rho + \frac{g_\rho^T}{M}\nabla \cdot \beta\sigma^0\rho_3 \quad (4.18c)$$

Les contributions du terme tenseur à l'Hamiltonien sont données en détail dans l'annexe B.

4.2 Procédure d'ajustement

4.2.1 Paramétrisation des fonctionnelles

Dans les chapitres précédents ont été présentées différentes fonctionnelles relativistes. En particulier, dans la section 1.3, la paramétrisation des fonctionnelles a été discutée avec l'inclusion d'une dépendance en densité dans les constantes de couplage. Les paramètres libres de la théorie sont alors composés des différentes constantes de couplage, des paramètres nécessaires à encoder la dépendance en densité ainsi que la masse du méson σ . Comme discuté dans le chapitre 1, les formes des dépendances en densité sont motivées par des études DBHF [HM87 ; BM90 ; TW99]. Dans la suite, on notera

$$g_i(\rho_V(\mathbf{r})) = \Gamma_i h_i(x), \quad i = \sigma, \omega, \rho, \quad (4.19)$$

avec

$$\Gamma_i \equiv g_i(\rho_{\text{sat}}), \quad (4.20a)$$

$$x \equiv \frac{\rho_V(\mathbf{r})}{\rho_{\text{sat}}}. \quad (4.20b)$$

Les fonctions h prennent des formes différentes dans les canaux IS et IV. Dans le canal IS ($i = \sigma, \omega$)

$$h_i(x) \equiv a_i \frac{1 + b_i(x + d_i)^2}{1 + c_i(x + d_i)^2}, \quad i = \sigma, \omega, \quad (4.21)$$

et dans le canal IV ($i = \rho$)

$$h_\rho(x) \equiv \exp[-a_\rho(x - 1)]. \quad (4.22)$$

Les paramètres entrants dans la définition des constantes de couplage ne sont pas des variables indépendantes. Une première contrainte évidente impose que $h_i(1) = 1$

3. S'agissant de termes possédant peu d'influence sur les propriétés des noyaux, il est aussi à prévoir qu'un ajout de multiples constantes de couplage dans ces canaux ne puissent pas être correctement ajustées et ne permettent pas d'améliorer la description des propriétés nucléaires.

(i.e. que la constante de couplage à densité de saturation soit donnée par Γ_i), donnant la relation

$$a_i = \frac{1 + c_i (1 + d_i)^2}{1 + b_i (1 + d_i)^2}, \quad i = \sigma, \omega. \quad (4.23)$$

Une contrainte supplémentaire peut être imposée à la dérivée seconde des h pour s'assurer que les contributions de réarrangement ne divergent pas à densité nulle, à savoir $h_i''(0) = 0$ ($i = \sigma, \omega$), ce qui conduit à

$$c_i = \frac{1}{3d_i^2}, \quad i = \sigma, \omega. \quad (4.24)$$

Au total, les constantes de couplage impliquent 12 paramètres libres dans le cas d'une interaction avec termes tenseurs (10 sinon)

- 6 paramètres Γ_i , b_i et d_i ($i = \sigma, \omega$) dans le canal isoscalaire
- 2 paramètres Γ_ρ et a_ρ dans le canal isovecteur
- la densité de saturation ρ_{sat}
- 2 couplages tensoriels indépendants de la densité Γ_i^T ($i = \omega, \rho$)

La masse du nucléon est fixée à $M = M_n = M_p = 939$ MeV, les masses des mésons ω et ρ sont fixées à leur valeur observée dans le vide, c'est-à-dire $m_\omega = 783$ MeV et $m_\rho = 763$ MeV, tandis que la masse du méson σ reste un paramètre libre à ajuster faisant passer de 9 (resp. 10) à 10 (resp. 12) le nombre de paramètres libres pour cette interaction.

Afin d'évaluer de manière fiable l'impact des couplages tensoriels sur les propriétés nucléaires au niveau RHB, deux nouvelles paramétrisations seront dérivées en utilisant le même protocole d'ajustement : une première sans termes tenseurs (10 paramètres libres) et une seconde avec ces couplages tenseurs $N - \omega$ et $N - \rho$ (12 paramètres libres).

4.2.2 Données expérimentales

Avant de discuter de la procédure d'ajustement, nous présentons d'abord l'ensemble des données empiriques sélectionnées pour ajuster les nouvelles interactions. Cet ensemble contient à la fois des propriétés de la matière nucléaire homogène infinie et des propriétés des noyaux finis \mathcal{O}_i , chacune accompagnée d'une incertitude $\Delta\mathcal{O}_i$ permettant de mesurer la qualité de la paramétrisation vis-à-vis de chacune des contraintes.

Un premier ensemble de contraintes provient des propriétés de la matière nucléaire infinie (toutes les quantités sont calculées à saturation $\rho = \rho_{\text{sat}}$). Le secteur isoscalaire est contraint par l'énergie par particule dans la matière symétrique E_0 et l'incompressibilité K_0 . Pour les paramètres isovecteurs, les contraintes choisies sont l'énergie de symétrie J et la dépendance en densité de l'énergie de symétrie L et K_{sym} (paramètres caractérisant l'équation d'état nucléaire autour de la densité de saturation ρ_{sat} et l'asymétrie d'isospin $\delta \equiv (\rho_n - \rho_p)/\rho = 0$, voir App. C). Les paramètres sélectionnés sont reportés dans le Tableau 4.1 avec leurs valeurs considérées (provenant d'extrapolations (dépendantes du modèle) des propriétés mesurées dans les noyaux finis) et la précision associée à laquelle ces valeurs doivent être reproduites dans l'ajustement.

	ρ_{sat} (fm ⁻³)	E_0 (MeV)	K (MeV)	J (MeV)
\mathcal{O}	0.152	-16.15	235	31.5
$\Delta\mathcal{O}$	0.03	0.15	30	3

TABLE 4.1 – Contraintes sur la matière nucléaire infinie considérée dans l’ajustement (première ligne), et leurs incertitudes associées (seconde ligne). Ces contraintes ont été choisies empiriquement à partir des résultats d’autres paramétrisations (DD-ME2 et DD-PC1) et en utilisant les résultats de [MHG18]

En plus des données de la matière nucléaire infinie, les propriétés de 12 noyaux sphériques représentatifs sont ajoutées et présentées dans le Tableau 4.2. Le choix de ces noyaux permet une bonne reproduction des propriétés d’énergie de liaison, de rayons, de séparations SO et de gaps. Le coût numérique associé à l’algorithme d’optimisation rend difficile l’inclusion de noyaux déformés dans la base de données. L’ensemble des données expérimentales sélectionnées comprend les énergies de liaison, les rayons de charge, les différences entre les rayons r.m.s. des neutrons et des protons et certains gaps d’énergie.

Le choix de ces observables particulières a été motivé par différentes études concernant le rôle du terme tenseur dans la matière finie (le terme tenseur ne contribue pas à la matière infinie puisqu’il n’implique que des termes dérivatifs). En particulier, plusieurs études [Tar+08; Mor+10] montrent que le terme tenseur a un effet important sur les gaps neutrons et protons à $N, Z = 8, 20, 28$. Il est également attendu que le terme tenseur ait un impact sur la valeur de la séparation SO pour des états donnés. Cependant, aucune contrainte forte n’a été utilisée dans la procédure d’ajustement. Les RMS sur les énergies de séparation SO sont calculés ultérieurement pour comparer les interactions.

La fonction de poids utilisée ici pour ajuster l’interaction est une somme pondérée de différences quadratiques

$$\chi^2(\mathbf{p}) = \sum_i \left(\frac{\mathcal{O}_i^{th}(\mathbf{p}) - \mathcal{O}_i^{exp}}{\Delta\mathcal{O}_i} \right)^2, \quad (4.25)$$

avec \mathcal{O}_i^{th} (resp. \mathcal{O}_i^{exp}) la valeur théorique (resp. expérimentale) pour un élément \mathcal{O}_i de l’ensemble de données sélectionné, et $\Delta\mathcal{O}_i$ l’erreur estimée correspondante grâce à laquelle on peut équilibrer les contributions des différentes catégories de données ajustées simultanément.

4.2.3 Protocole d’optimisation

La méthode d’ajustement est essentielle pour obtenir des paramétrisations fiables. De nombreuses méthodes ont été développées au fil des années pour tenter de traiter ces ajustements multidimensionnels sous contraintes. L’une des spécificités de ces procédures réside dans le fait qu’il est impossible d’utiliser des méthodes impliquant des dérivées en raison du coût numérique important que représente le calcul de ces dérivées.

Nucleus	BE/A (MeV)	r_{charge} (fm)	$r_n - r_p$ (fm)	Δ_{so} (MeV)	Gaps (MeV)	Commentaires
^{16}O	7.976	2.730			11.61 (p 1d5/2 - 1p1/2) 11.55 (n 1d5/2 - 1p1/2)	Z=8 gap N=8 gap
^{22}O	7.364				10.25 (p 1d5/2 - 1p1/2)	Z=8 gap
^{40}Ca	8.551	3.485			07.25 (p 1f7/2 - 1d3/2 (2s1/2)) 07.30 (p 1f7/2 - 1d3/2)	Z=20 gap N=20 gap
^{48}Ca	8.667	3.484			06.55 (p 1f7/2 - 1d3/2 (2s1/2))	Z=20 gap
^{54}Ca	8.247				06.24 (p 1f7/2 - 1d3/2 (2s1/2))	Z=20 gap
^{56}Ni	8.642				06.48 (p 2p3/2 - 1f7/2) 06.36 (n 2p3/2 - 1f7/2)	Z=28 gap N=28 gap
^{60}Ni	8.780				04.74 (p 2p3/2 - 1f7/2)	Z=28 gap
^{66}Ni	8.739				05.53 (p 2p3/2 - 1f7/2)	Z=28 gap
^{90}Zr	8.710	4.272				
^{116}Sn	8.523	4.626	0.120			
^{124}Sn	8.467	4.674	0.190			
^{132}Sn	8.354	4.709		01.48 (2d) 06.14 (1g)		
^{208}Pb	7.868	5.505				
$\Delta\mathcal{O}_i$	0.03	0.01	0.01	0.2	0.2	

TABLE 4.2 – Données expérimentales utilisées pour contraindre l’ajustement sur certains noyaux. Données tirées de [NND]

Par conséquent, de nombreuses méthodes sans dérivée sont couramment utilisées, notamment la méthode Nelder-Mead (NM) simplex [Pre89] et la variante de l’algorithme POUNDerS utilisée par la collaboration UNEDF [Kor+10]. Dans d’autres approches traitant des descriptions très précises des énergies de liaison et des rayons sur l’ensemble de la carte nucléaire (aussi utilisées pour la prédiction de nouveaux noyaux), des techniques de réseaux de neurones (par exemple) sont utilisées (voir par exemple [Sca+21]). Le problème commun de ces procédures d’ajustement est qu’elles nécessitent une puissance de calcul massive pour atteindre une convergence optimale. En particulier, la nécessité d’inclure de nombreux noyaux dans la procédure d’ajustement est cruciale pour éviter de tomber dans des minima locaux ou de manquer une partie de la physique. Une autre difficulté réside dans la prise en compte de noyaux déformés, dont les temps de calcul peuvent être un voire deux ordres de grandeur supérieurs par rapport à des codes sphériques.

Dans la présente étude, différentes méthodes ont été testées afin de comprendre les avantages et les inconvénients de chacune. Plus précisément, l’algorithme de Nelder-Mead et l’échantillonnage MCMC ont été utilisés en raison de leur complémentarité. Alors que la méthode NM permet de trouver un minimum global dans une certaine région de l’espace des paramètres, l’échantillonnage MCMC permet de balayer un espace des paramètres plus large et d’obtenir de biens meilleures informations sur les corrélations.

La difficulté la plus importante est qu’il n’y a priori aucune corrélation (ou très faible) entre une paramétrisation très bien convergée (en termes de faible χ^2) et une bonne valeur RMS sur l’énergie de liaison (ou des rayons) sur l’ensemble de la carte des noyaux. En effet, puisque la procédure d’ajustement est effectuée sur un petit sous-ensemble de la carte des noyaux, rien ne garantit que les résultats seront correctement extrapolés au reste de la carte (en particulier lorsque l’ensemble de contraintes est constitué uniquement de noyaux sphériques qui ne rendent pas compte de toutes les propriétés des noyaux déformés). Combiné avec les corrélations importantes entre les différents paramètres, le choix d’une paramétrisation devient une tâche très subjective. Ce fait, qui est discuté plus en détail dans la section suivante, nous a conduit à privilégier une approche MCMC, afin d’obtenir une plus grande diversité de minima locaux qui ont ensuite été testés sur un plus grand nombre de noyaux. Afin de vérifier ces minima locaux dans l’échantillonnage MCMC, une dernière étape est réalisée en effectuant une minimisation simplex sur ces minima locaux pour assurer une bonne convergence.

Dans la suite, chaque paramétrisation sera écrite comme un vecteur englobant l’ensemble des paramètres du modèle, à savoir

$$\mathbf{p}_{\mathcal{X}} = (m_{\sigma}, \Gamma_{\sigma}, b_{\sigma}, d_{\sigma}, \Gamma_{\omega}, b_{\omega}, d_{\omega}, \Gamma_{\rho}, a_{\rho}, \rho_{\text{sat}}), \quad (4.26a)$$

$$\mathbf{p}_T = (\mathbf{p}_{\mathcal{X}}, \Gamma_{\omega}^T, \Gamma_{\rho}^T), \quad (4.26b)$$

La recherche d’un minimum pour la fonction objectif (4.25) dans l’espace paramètres est effectuée par deux optimiseurs qui ne nécessitent pas de calculs de dérivées

- l’algorithme de recherche de minima de Nelder-Mead (NM) [Pre89], parfois appelé méthode du simplex, qui offre un excellent compromis entre simplicité et efficacité,

mais qui ne permet pas une analyse détaillée des corrélations dans l'ensemble des paramètres

- l'algorithme de Monte Carlo par chaîne de Markov (MCMC) basé sur la méthode de Metropolis-Hastings [For+13] qui permet une meilleure exploration de l'espace des paramètres et donne accès à une meilleure quantification des corrélations entre paramètres, mais pour un coût de calcul plus élevé.

La procédure d'optimisation suit alors les étapes suivantes (voir aussi Fig. 4.1) :

1. Un set de paramètres \mathbf{p}^0 est aléatoirement généré et correspond alors à la position d'un marcheur MCMC
2. Un calcul des propriétés de la matière infinie est effectué avec cette paramétrisation \mathbf{p}^0 et comparé une première fois aux données de Tab.4.1. On construit ainsi la fonction de poids pour la matière infinie $\chi_{\text{EoS},i}^2(\mathbf{p}^0)$ ($i = \rho_{\text{sat}}, E_0, K, J$).
3. Si $\chi_{\text{EoS},i}^2(\mathbf{p}^0) > 9$, l'ensemble \mathbf{p}^0 est rejeté et le marcheur bouge avec la simple donnée de $\chi_{\text{EoS},i}^2$ donnant alors un nouveau set \mathbf{p}^1 . Les étapes 2 et 3 sont ensuite répétées jusqu'à ce que $\chi_{\text{EoS},i}^2(\mathbf{p}^{\text{EoS ok};1}) < 9$ pour un set de paramètres $\mathbf{p}^{\text{EoS ok};j}$.
4. Les propriétés des noyaux de Tab.4.2 sont alors calculées pour le set $\mathbf{p}^{\text{EoS ok};j}$ ce qui permet le calcul de la fonction de poids Eq.(4.25).
5. Les étapes 2 à 4 sont alors répétées $N_S = 20000$ fois permettant d'obtenir $N_S = 20000$ paramétrisations par marcheur $\mathbf{p}^{\text{EoS ok};j}$ chacune associées à χ_j^2 .
6. L'énergie de liaison et le rayon de ~ 1000 noyaux déformés sont ensuite déterminés avec un code axial pour un sous-ensemble de N_{NM} sets parmi tous ceux obtenus précédemment. Les valeurs des déviations r.m.s. correspondantes $\delta_B^2(\mathbf{p}^{\text{MCMC};k}) = \sum_{k=1}^{\sim 1000} (B_k^{\text{th}}(\mathbf{p}^{\text{MCMC};k}) - B_k^{\text{exp}})^2$ et $\delta_r^2(\mathbf{p}^{\text{MCMC};k}) = \sum_{k=1}^{\sim 1000} (r_k^{\text{th}}(\mathbf{p}^{\text{MCMC};k}) - r_k^{\text{exp}})^2$ sont alors calculées.
7. Ces N_{NM} paramétrisations vont ensuite être soumises à une nouvelle minimisation en utilisant cette fois un algorithme de NM avec une fonction de poids identique Eq.(4.25). On obtient ainsi de nouvelles paramétrisations $\mathbf{p}^{\text{MCMC-NM};n}$, et leurs χ_n^2 associés.
8. L'étape 6 est ensuite répétée pour ces N_{NM} nouvelles paramétrisations $\mathbf{p}^{\text{MCMC-NM};n}$. L'interaction qui minimise les déviations r.m.s. est finalement celle sélectionnée.

N_{NM} représente le nombre de paramétrisations testées par un second algorithme de NM. Il s'agit aussi du nombre de paramétrisations dont les propriétés sur toute la carte des noyaux sont calculées. Dans l'étude présentée ici, $N_{\text{NM}} = 20$. Le nombre d'itérations de chaque marcheur a été fixé à $N_S = 20000$. Comme le montre le graphe Fig.4.2, ce chiffre est largement suffisant pour obtenir une bonne convergence des marcheurs.

4.2.4 Résultats

Les simulations MCMC ont été réalisées sur l'espace complet des paramètres, afin de contrôler les différentes corrélations qui lient les paramètres de la fonctionnelle. Chaque simulation MCMC a été exécutée avec $N_w = 200$ marcheurs pour $N_s = 2 \times 10^4$ étapes, chacune conduisant à un total de $\sim 5.10^7$ calculs RHB sphériques convergés.

Les calculs MCMC convergent rapidement vers $\chi^2 \sim 32$ comme le montre la Fig.4.2. Quelques minima inférieurs peuvent être trouvés plus tard dans le processus, mais

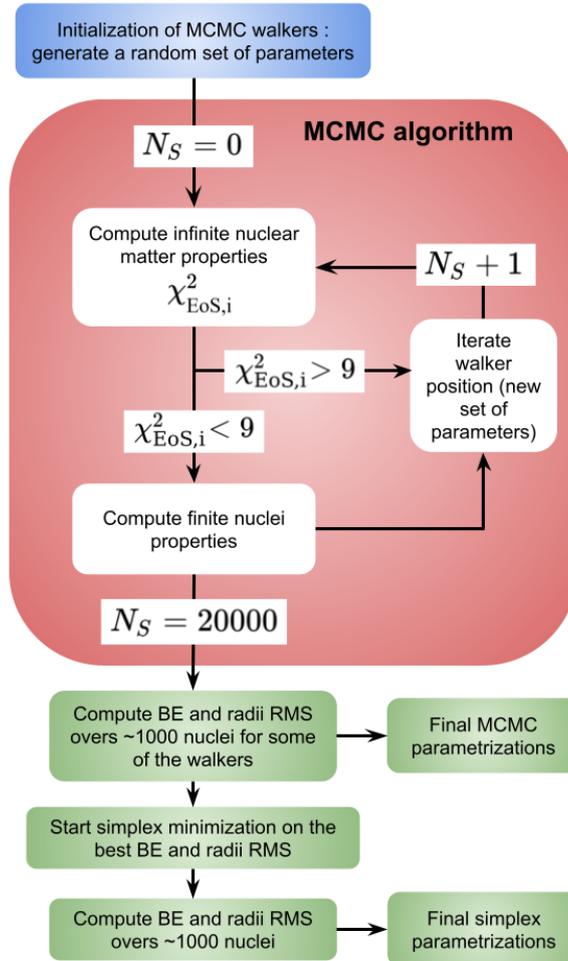


FIGURE 4.1 – Vue schématique des différentes étapes de la minimisation. Voir le texte pour plus de détails.

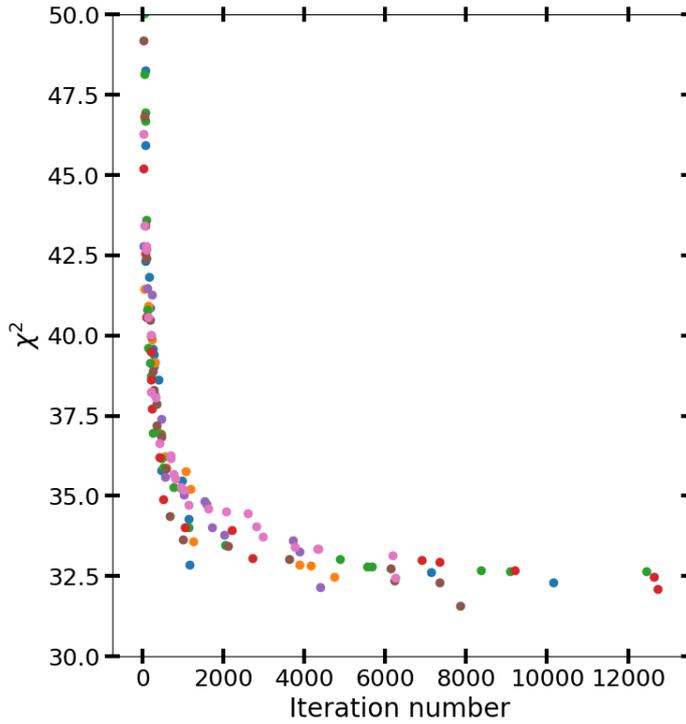


FIGURE 4.2 – Valeurs de χ^2 en fonction du nombre d’itérations pour 7 marcheurs différents (sélectionnés aléatoirement sur les 200) représentés par des couleurs différentes.

comme est expliqué précédemment, une valeur de χ^2 inférieure n’est pas systématiquement corrélée à une énergie de liaison (ou rayon) RMS inférieure sur la carte nucléaire.

Il a été vérifié que les résultats ne dépendent pas des marcheurs, dans le sens où tous les calculs les plus convergés d’un marcheur sont similaires à ceux d’un autre marcheur. Cette vérification est importante pour assurer que le point final de chaque marcheur est indépendant de sa position initiale (qui est choisie aléatoirement pour les N_w marcheurs).

Afin de montrer qu’une valeur de χ^2 inférieure ne correspond pas nécessairement à des valeurs RMS inférieures, la Fig.4.3 montre le RMS des énergies de liaison en fonction de χ^2 , pour différentes paramétrisations, calculées sur ~ 1000 noyaux. Il est important de noter que, parfois, des valeurs moyennes importantes de $E_{\text{exp}} - E_{\text{th}}$ sont obtenues, conduisant à d’importantes valeurs de RMS sur les BE (visibles dans l’échelle de couleurs de la Fig.4.3). Il convient de noter que les paramétrisations obtenues avec la minimisation simplex conduisent à un RMS sur les BE quasi-constant (~ 2.1 MeV). Cela est certainement le signe que toutes les minimisations simplex aboutissent à des minima locaux équivalents (en raison de la corrélation entre les paramètres). Ce n’est pas le cas de l’échantillonnage MCMC, qui explore beaucoup plus l’espace des paramètres et aboutit à des minima locaux non équivalents.

Il reste tout de même intéressant de noter une faible corrélation entre le RMS sur les BE et les valeurs de χ^2 pour l’échantillonnage MCMC : une faible valeur de χ^2 semble

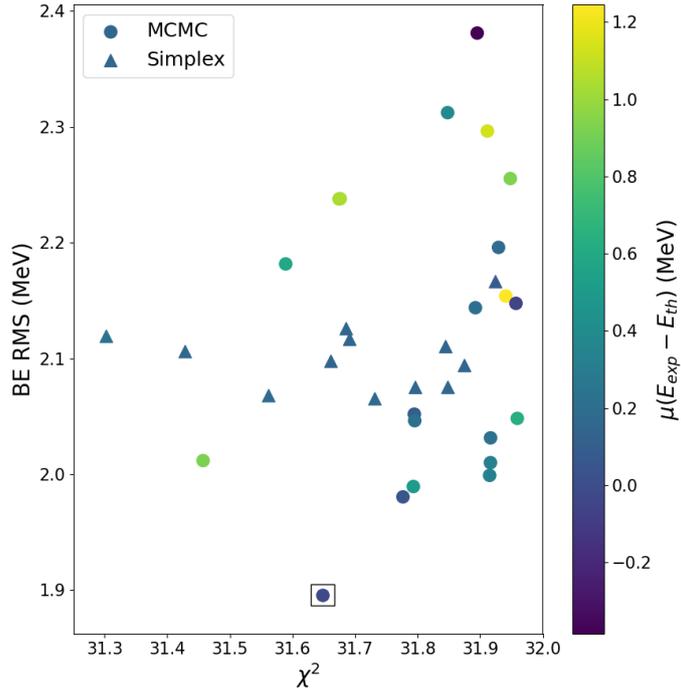


FIGURE 4.3 – RMS sur les énergies de liaison en fonction du χ^2 . Les points représentent les résultats MCMC et les triangles les résultats de la minimisation simplex. La légende en couleur montre la valeur moyenne de $E_{exp} - E_{th}$. Le point entouré d'un carré représente la paramétrisation choisie pour les applications présentées ci-après.

être liée à une faible valeur du RMS sur les BE. Cependant, la dispersion statistique autour de cette tendance reste très importante et ce critère ne peut être utilisé pour déterminer l'interaction la mieux ajustée.

Finalement, c'est l'ensemble avec le RMS le plus faible qui est retenu. Les valeurs de ce jeu de paramètres sont données dans le Tab.4.3 pour les interactions ajustées sans termes tenseurs (DD-MEV) et avec (DD-MEVT). Cependant, il est important de noter que ce choix reste subjectif. Comme dans toute autre approche traitant de la minimisation multidimensionnelle, il n'empêche généralement pas l'existence d'une meilleure interaction (aussi bien à cause de la présence de minima locaux que du faible nombre de noyaux présents dans l'ajustement).

4.3 Analyse de l'échantillonnage

4.3.1 Les paramètres

Il est tout d'abord pertinent de tracer les valeurs de certains des calculs les plus convergés, pour les deux interactions, visibles sur la Fig.4.4. Il est intéressant de noter que tous les paramètres ont été modifiés (à l'exception de la densité de saturation) entre les interactions DD-MEV et DD-MEVT, ce qui signifie qu'une procédure d'ajustement se concentrant uniquement sur les degrés de libertés tenseurs ($\Gamma_{\omega,\rho}^T$) par-dessus une interaction ajustée plus ancienne ne conduirait certainement pas à une interaction

Param.	DD-ME2	DD-MEV	DD-MEVT
m_σ (MeV)	550.1238	544.8503 543.8758 (1.0387)	530.3956 528.483 (2.4997)
Γ_σ	10.5396	10.2600 10.1680 (0.0686)	9.2652 9.1410 (0.1428)
Γ_ω	13.0189	12.7563 12.6512 (0.102)	11.6465 11.5027 (0.1661)
Γ_ρ	3.6836	3.6709 3.5827 (0.0648)	3.7971 3.7957 (0.0583)
b_σ	1.0943	1.4449 1.4982 (0.1208)	2.0162 2.1246 (0.1487)
c_σ	1.7057	2.0619 2.0708 (0.1296)	2.4924 2.5474 (0.1487)
b_ω	0.9240	0.9828 0.8793 (0.0735)	1.4375 1.5615 (0.1952)
c_ω	1.4620	1.3672 1.1762 (0.1175)	1.5696 1.6279 (0.2238)
a_{tv}	0.5647	0.5856 0.6708 (0.0424)	0.5777 0.5446 (0.0387)
ρ_{sat} (fm ⁻³)	0.1520	0.1505 0.1525 (0.0020)	0.1516 0.1517 (0.0023)
Γ_ω^T	0.0	0.0	1.5496 1.7564 (0.2341)
Γ_ρ^T	0.0	0.0	-2.3243 0.2127 (2.0169)

TABLE 4.3 – Les paramètres des nouvelles fonctionnelles sont donnés en gras à chaque entrée du tableau. En dessous sont répertoriés les valeurs moyennes et écart-types (entre parenthèses) obtenus dans l'échantillonnage MCMC.

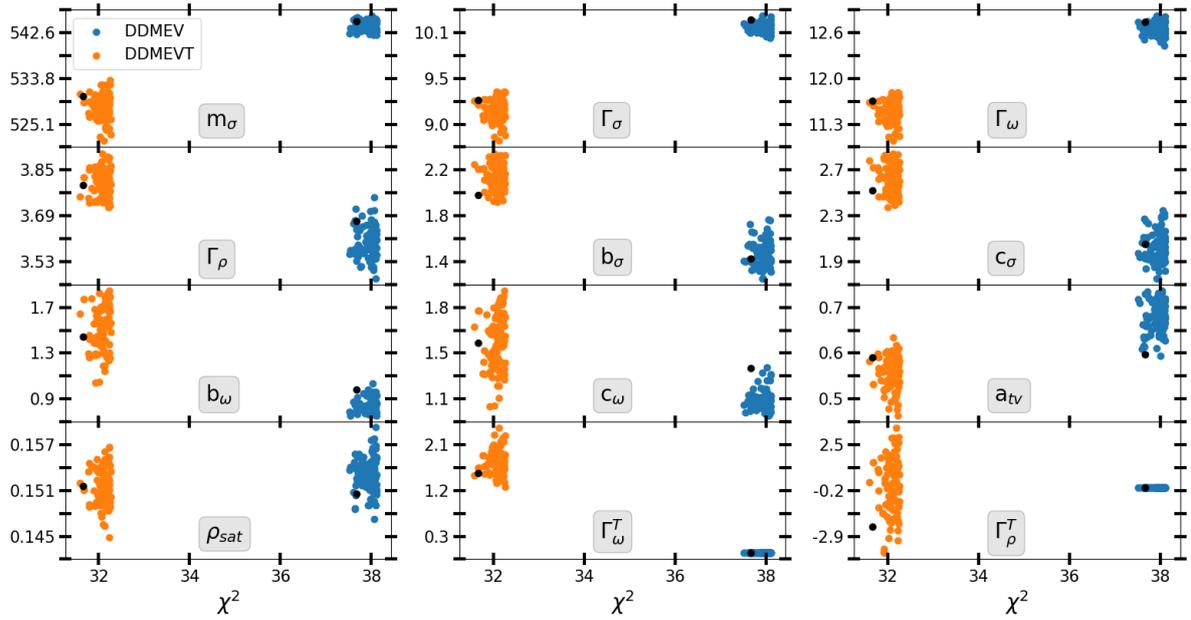


FIGURE 4.4 – Valeurs des paramètres des 100 calculs MCMC les plus convergés pour DD-MEV (bleu) et DD-MEVT (orange). Les points noirs représentent la paramétrisation qui est utilisée dans les sections suivantes pour les applications (voir le texte pour plus de détails). Les deux derniers graphiques montrent les constantes de couplage tensoriel, expliquant les valeurs constantes 0 de la paramétrisation DD-MEV pour ces paramètres.

satisfaisante.

Un autre comportement général se retrouve dans la dispersion des distributions. Les interactions impliquant les nouveaux termes tensoriels présentent une plus grande dispersion pour presque tous les paramètres. Ce résultat est directement lié au fait qu'un ajout de paramètres libres dans un modèle, sans modification du set de contraintes, permet une certaine liberté dans la procédure d'ajustement.

Un résultat important visible dans le sous-graphe inférieur droit de la Fig.4.4 est que la partie tensorielle ρ de l'interaction n'est pas contrainte par notre ensemble (Tab.4.2). Cette hypothèse se verra confirmer par l'étude des corrélations dans la sous-section suivante. Par conséquent, la partie tenseur du canal vecteur isovecteur de l'interaction semble n'apporter aucun contenu physique au niveau RHB, ou du moins pas sur les observables qui ont été utilisées ici.

4.3.2 Corrélations

Afin de comprendre les différences entre les interactions DD-MEV et DD-MEVT, il est très utile de tracer les matrices de corrélation. C'est ce qui est fait dans la Fig.4.5a et la Fig.4.5b où ces matrices sont définies comme suit

$$M_{\text{corr}}(x_i, x_j) = \frac{\sigma_{x_i x_j}}{\sigma_{x_i} \sigma_{x_j}} \quad (4.27)$$

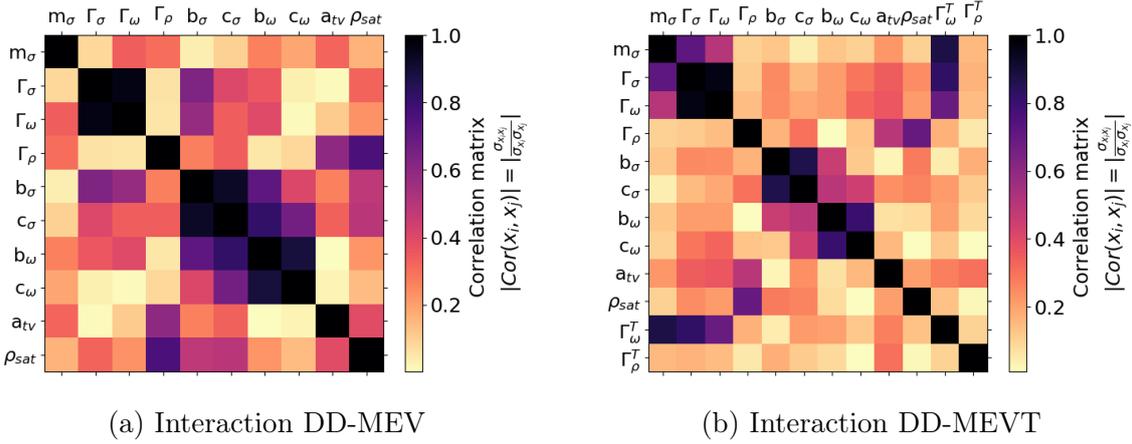


FIGURE 4.5 – Matrice de corrélation obtenue dans les calculs MCMC pour l’interaction DD-MEV (à gauche) et DD-MEVT (à droite).

où $\sigma_{x_i x_j}$ vaut pour la matrice de covariance entre la variable x_i et x_j et σ_{x_i} est un raccourci pour $\sqrt{\sigma_{x_i x_i}}$. Ici, nous nous intéressons uniquement à la valeur absolue de ces matrices.

Le premier résultat à noter est la très forte corrélation des variables m_σ , Γ_σ et Γ_ω pour l’interaction DD-MEVT. Ces trois variables encodent principalement l’énergie de liaison du système et par conséquent, une petite variation de l’une de ces variables peut être compensée par la modification des deux autres. Il est à noter que Γ_ω^T est également fortement corrélé à ces paramètres, ce qui montre l’importance du canal vecteur isoscalaire dans la reproduction des propriétés des énergies de liaison.

Il convient également de noter que dans le cas de l’interaction DD-MEV, la masse m_σ est beaucoup moins corrélée aux autres paramètres. Cela montre que la présence des termes tenseurs ω permet d’introduire beaucoup plus de corrélations dans la partie isoscalaire de l’interaction.

Le deuxième ensemble de paramètres fortement corrélés est celui qui code la dépendance de la densité de la partie isoscalaire de l’interaction, à savoir $b_{\sigma,\omega}$ et $c_{\sigma,\omega}$. Pour ces paramètres, cette tendance est suivie par les deux interactions DD-MEV et DD-MEVT.

Les paramètres codant les parties isovecteurs Γ_ρ et a_{tv} sont également très corrélés. Cependant, une forte corrélation entre la densité de saturation et Γ_ρ est également visible sur les graphiques. Ceci s’explique par la forme exponentielle de la dépendance de la densité du secteur isovecteur, qui renforce l’importance de ce paramètre.

Dans le cas du terme tensoriel ρ , il ne semble pas être corrélé à une quelconque variable. Ceci est consistant avec le résultat précédent (cf. Fig.4.4) concernant son évolution avec χ^2 : il n’est pas contraint par notre ensemble ou ne contribue presque pas.

Comme prévu, les différentes modifications de paramètres montrées dans la Fig.4.4 sont liées à la matrice de corrélation introduite précédemment. En particulier, le comportement du canal IS montre des valeurs décroissantes des paramètres m_σ , Γ_σ et Γ_ω

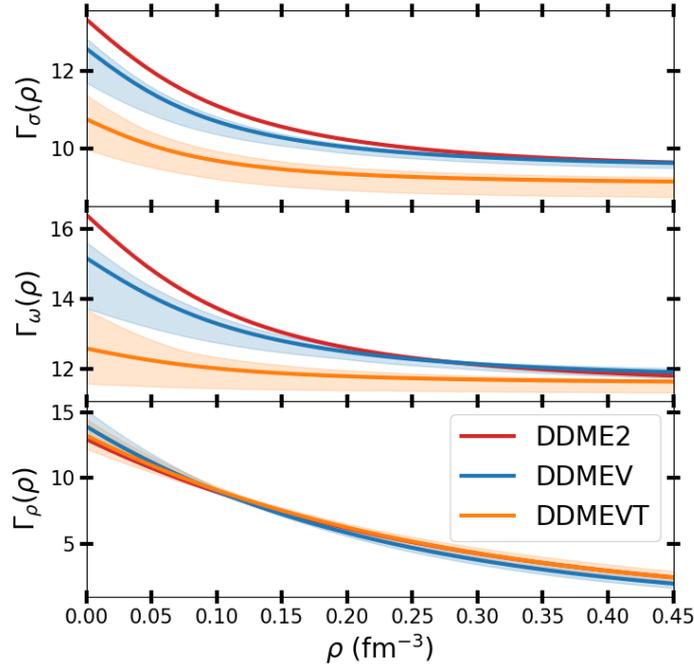


FIGURE 4.6 – Évolution des constantes de couplage dépendantes de la densité Γ_σ , Γ_ω and Γ_ρ en fonction de la densité ρ . Trois paramétrisations sont affichées : DD-ME2, DD-MEV and DD-MEVT. Les zones colorées correspondent aux déviations standards calculées dans l’approche MCMC (voir le texte pour plus de détails).

lorsque l’effet tenseur est considéré par rapport à l’interaction de type DD-ME2, tandis que Γ_ω^T prend une valeur positive.

Un décalage moins trivial se produit pour les paramètres b_i et c_i , qui sont liés à la paramétrisation de la dépendance en densité des constantes de couplage. La comparaison entre les deux dépendances de densité est représentée sur la Fig.4.6. Cependant, il reste difficile de tirer une conclusion sur un éventuel impact du terme tenseur sur les valeurs de b_i et c_i .

À l’exception de la valeur $\rho = 0$, l’évolution de $\Gamma_\sigma(\rho)$ n’est que peu impactée par les paramétrisations, bien que la valeur asymptotique à haute densité soit modifiée.

Dans le cas de $\Gamma_\omega(\rho)$, la fonction décroît plus lentement, mais commence également à une valeur plus faible avec DD-MEVT. Les valeurs à grand ρ sont peu modifiées par rapport aux interactions de type DD-ME2. On remarque aussi que $\Gamma_\omega(\rho)$ est presque constant avec la densité dans le cas d’une interaction tensorielle.

Le secteur isovecteur est également légèrement modifié avec l’augmentation de la constante de couplage Γ_ρ , tandis que le paramètre a_{tv} codant la dépendance de la densité prend une valeur plus petite par rapport à l’interaction de type DD-ME2. Cependant, au regard de la Fig.4.6, ces modifications ont un impact très faible sur le comportement de $\Gamma_\rho(\rho)$.

	DD-ME2	DD-MEV	DD-MEVT	Données empiriques
Masse de Dirac M^*/M	0.57	0.58 0.58 (0.01)	0.63 0.63 (0.01)	0.75 ± 0.1
Masse effective vectorielle M_V^*/M	0.65	0.66 0.65 (0.01)	0.71 0.71 (0.01)	0.75 ± 0.1
Densité de saturation ρ_{sat} (fm^{-3})	0.152	0.151 0.152 (0.002)	0.152 0.152 (0.002)	0.155 ± 0.005
Énergie de liaison par nucléon E_0 (MeV)	-16.14	-16.14 -16.14 (0.02)	-16.14 -16.16 (0.02)	-15.8 ± 0.3
Incompressibilité K_∞ (MeV)	250.9	238.5 238.2 (3.8)	236.7 235.1 (3.5)	230 ± 20
Skewness Q (MeV)	-478	-373 -345 (36)	-287 -257 (26)	-700 ± 500 [FPT97]
Énergie de symétrie J (MeV)	32.3	31.5 31.6 (0.3)	31.4 31.6 (0.3)	32 ± 2
Pente de l'énergie de symétrie L (MeV)	52.2	44.3 44.0 (3.4)	46.9 47.1 (3.7)	60 ± 15
Incompressibilité de l'énergie de symétrie K_{sym} (MeV)	-87	-57 -53 (10)	-72 -79 (6)	-100 ± 200

TABLE 4.4 – Propriété de la matière nucléaire infinie à densité de saturation (en gras). En dessous sont répertoriés les valeurs moyennes et écart-types (entre parenthèses) obtenus dans l'échantillonnage MCMC. Les données empiriques proviennent de [MHG18].

4.4 Applications et discussion

4.4.1 Matière nucléaire infinie

Le terme tenseur faisant intervenir des dérivées, il n'a pas d'impact sur les paramètres de la matière infinie. Cependant, comme nous l'avons montré précédemment, des ajustements d'interaction avec et sans terme tenseur possèdent des valeurs de paramètres très différentes, modifiant de fait les propriétés de la matière nucléaire. Les résultats sont présentés dans le Tab.4.4.

Quelques différences apparaissent entre les paramétrisations DD-ME2 et DD-MEV dans l'incompressibilité K_∞ , qui est diminuée de plus de 10 MeV et la pente de l'énergie de symétrie, qui est également diminuée de ~ 10 MeV. Cependant, ces valeurs sont similaires entre DD-MEV et DD-MEVT.

La principale différence entre DD-MEV et DD-MEVT réside dans la valeur de la masse de Dirac, définie comme $M^* = M - \Gamma_\sigma \sigma$. Ce résultat s'explique en partie par la plus petite valeur de Γ_σ entre les paramétrisations DD-MEV et DD-MEVT conduisant à une valeur croissante de la masse de Dirac. Cela confirme qu'un couplage tenseur permet d'obtenir une plus grande valeur de la masse de Dirac, ce qui est en meilleur

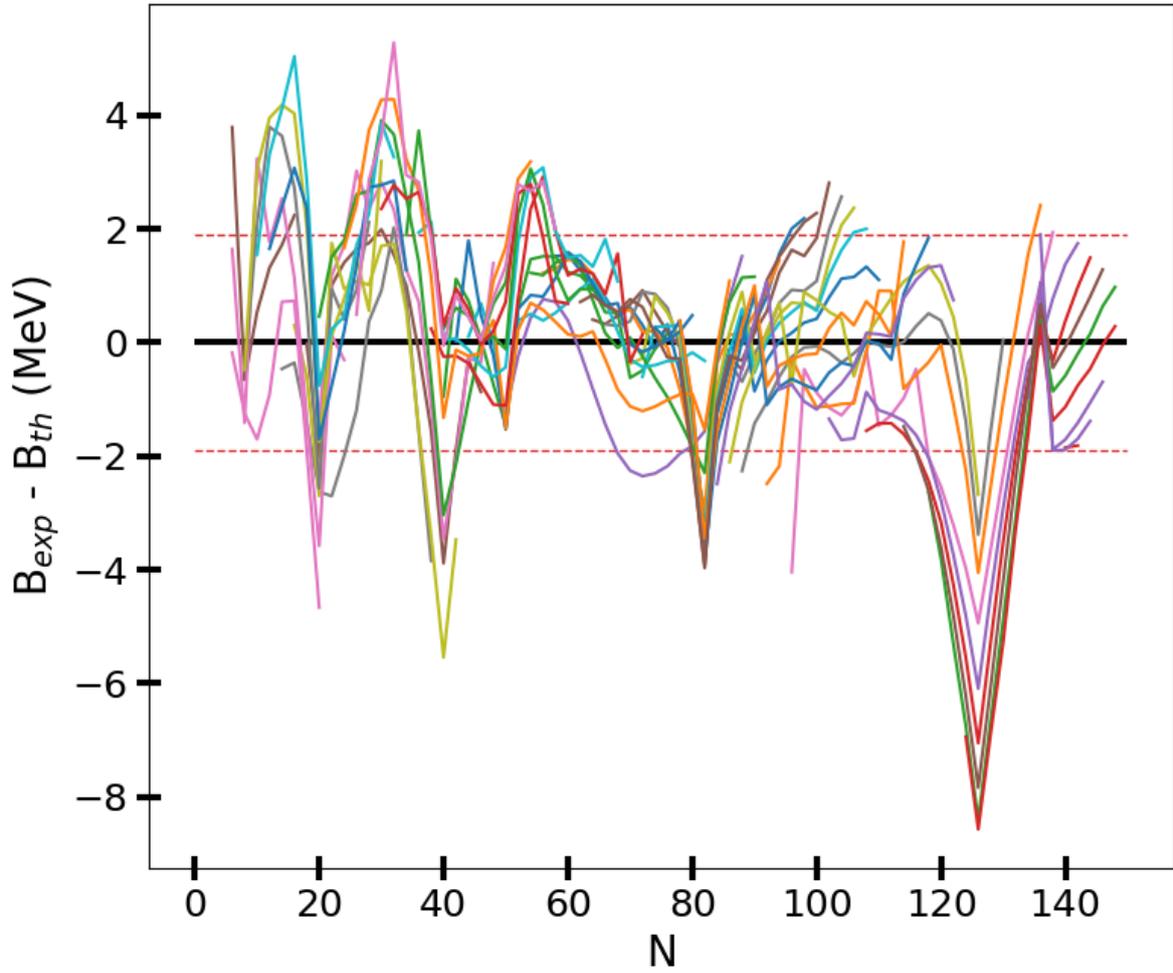


FIGURE 4.7 – Évolution de $B_{\text{exp}} - B_{\text{th}}$ avec le nombre de neutrons. Les lignes rouges horizontales représentent le RMS des énergies de liaisons.

accord avec l'expérience[TA20].

Il est possible de définir une autre masse effective reliée cette fois à la partie vectorielle de l'interaction définie comme

$$M_V^* = M - V \quad (4.28)$$

avec V le potentiel vectoriel. Il a été proposé[JM89; JM90] que ce soit cette masse qui soit comparée avec les masses effectives non-relativistes. De la même façon que pour la masse de Dirac, une valeur plus importante de cette masse effective vectorielle est obtenue étant donné que Γ_ω est plus faible que pour les interactions DD-ME2 et DD-MEV. Cette augmentation est en accord avec les précédents résultats incluant des termes tenseurs explicites, ainsi qu'avec les données expérimentales.

4.4.2 Énergie de liaison et rayons

Afin d'évaluer quantitativement les interactions ajustées, nous calculons ici les valeurs RMS des énergies de liaison et des rayons. Ces valeurs RMS sont calculées sur ~ 1000 noyaux avec un code axial pour tester les différentes paramétrisations et étudier l'impact

	DD-ME2	DD-MEV	DD-MEVT
$\overline{E_{exp} - E_{th}}$	2.0	0.1	-0.02
$\sigma(E_{exp} - E_{th})$	2.88	2.10	1.89
$\sigma(R_{exp} - R_{th})$	0.26	0.25	0.25

TABLE 4.5 – Valeurs moyennes et RMS des écarts aux énergies de liaison (lignes 1 et 2) et RMS des rayons (ligne 3) pour différentes paramétrisations.

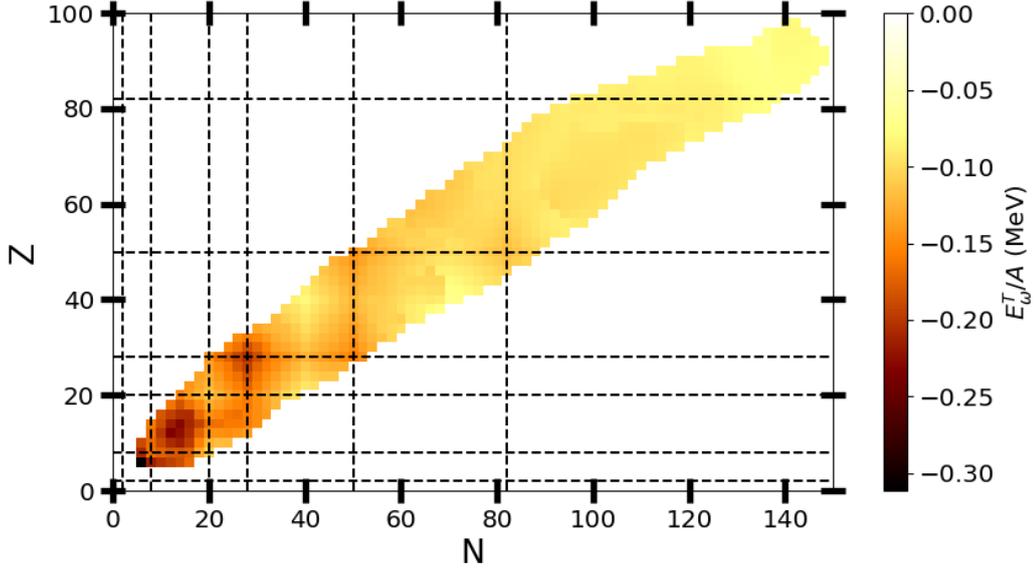


FIGURE 4.8 – Évolution de l'énergie tenseur par nucléon E_{ω}^T/A avec le nombre de neutrons et protons.

des termes tensoriels. Comme indiqué précédemment, la paramétrisation sélectionnée est celle qui minimise les valeurs RMS des quantités considérées. Les résultats sont présentés dans la Fig.4.7 où $B_{exp} - B_{th}$ sont tracés pour la chaîne isotopique jusqu'à l'Hassium ($Z = 108$) pour la meilleure paramétrisation.

Ces résultats montrent la tendance assez habituelle des dérives isotopiques et des pics à $N = 20, 40, 80, 126$ avec un désaccord très prononcé avec l'expérience à $N = 126$. Ces particularités se retrouvent dans l'ajustement d'autres fonctionnelles comme celle de Gogny D1S [Gor+16]. Les valeurs RMS sont résumées dans le Tab.4.5. Il apparaît que l'ancienne interaction DD-ME2 souffre d'une valeur importante de RMS sur les BE principalement due à un décalage moyen important de 2 MeV entre les prédictions théoriques et l'expérience. Afin de réduire la tendance de dérives isotopiques présentes ici, des contraintes sur la matière neutronique ont été ajoutées, comme indiqué dans le cas de l'ajustement de l'interaction de Gogny D1N [CGH08]. Cependant, cette procédure n'a pas permis d'obtenir de meilleurs résultats et dégradait même la reproduction des BE sur l'ensemble des noyaux.

Afin d'étudier plus en détail l'impact du terme tenseur, la Fig.4.8 montre les énergies tenseurs fonction du nombre de neutrons et de protons. Il est d'abord intéressant de noter que l'énergie tensorielle contribue principalement aux noyaux légers et devient

presque négligeable pour $N > 100$. Cette diminution de la contribution du terme tenseur à l'énergie totale avec l'augmentation du nombre de masse, qui devient négligeable pour les noyaux de masse élevée avec une contribution qui ne dépasse pas 0,05 MeV par nucléons, peut s'expliquer par la structure du terme tenseur. Ce dernier étant proportionnel à la dérivée des champs mésoniques, il correspond à un terme de surface. Il est donc logique que, une fois comparée au nombre de nucléons total, sa contribution diminue.

Une caractéristique spécifique apparaît pour les différents nombres de neutrons et de protons $N, Z = 8, 20$, où il est visible que la contribution tensorielle devient plus faible dans cette région. Cette propriété peut être comprise en termes d'effet de saturation de spin : en raison de la forme spécifique du terme tenseur, il ne devrait pas contribuer trop fortement pour un système saturé en spin. Plus précisément, les fermetures de couches à $N = 8, 20$ conduisent à une diminution de l'effet tenseur et donc à une contribution réduite à l'énergie totale. Cependant, la fermeture de la couche $N = 28$ ne semble pas avoir d'impact sur l'énergie. Cette caractéristique a déjà été constatée dans d'autres études où la comparaison entre les fonctions avec et sans termes tenseurs conduit à des résultats similaires pour ces isotones.

4.4.3 Impact de la déformation

Il peut également être intéressant d'étudier l'impact de la contribution tensorielle à la déformation. Tout d'abord, il a été vérifié que la déformation des états fondamentaux n'était que peu impactée par l'ajout d'un couplage tenseur. Ensuite, afin d'étudier plus en détails l'impact de la déformation, on se propose de contraindre la déformation de différents noyaux et d'étudier la PES qui en résulte.

La figure 4.9 montre quelques PES pour les noyaux ^{20}Ne , ^{120}Sn et ^{238}U qui ont été choisis pour étudier l'impact du terme tenseur sur les noyaux possédant une structure en clusters forte (^{20}Ne), et les barrières de fission (^{238}U). Tout d'abord, on retrouve le résultat précédemment discuté concernant le meilleur ajustement des fonctionnelles DD-MEV et DD-MEVT dont les minima sont plus proches des valeurs expérimentales.

Dans le cas du ^{20}Ne , la contribution du terme tenseur est constante entre $-0.2 < \beta_2 < 0.6$ mais subit une modification importante au-delà de ces valeurs, lorsque la pente de la PES devient plus abrupte. Il est cependant intéressant de remarquer qu'une telle modification de la partie tensorielle n'a pas l'air d'avoir d'influence sur l'énergie totale du système.

Dans le cas de l'étain, les différences sont négligeables sur l'ensemble de la PES. Cependant, le cas de l'Uranium pourrait être plus intéressant à étudier, car la barrière β_2 est légèrement modifiée. Tout d'abord, sa hauteur est diminuée de ~ 1 MeV, mais sa largeur est augmentée. Une telle diminution de la hauteur de la barrière avait déjà été remarquée lors de l'ajout du terme tensoriel dans une précédente étude [Tol+18]. Il reste assez difficile de tirer des conclusions de cette caractéristique, puisqu'une PES en β_2 et β_3 serait nécessaire pour vraiment comparer les énergies.

Comme déjà discuté précédemment dans la Fig.4.8, la contribution tensorielle à l'énergie totale est plus importante dans les noyaux légers. Son évolution avec la défor-

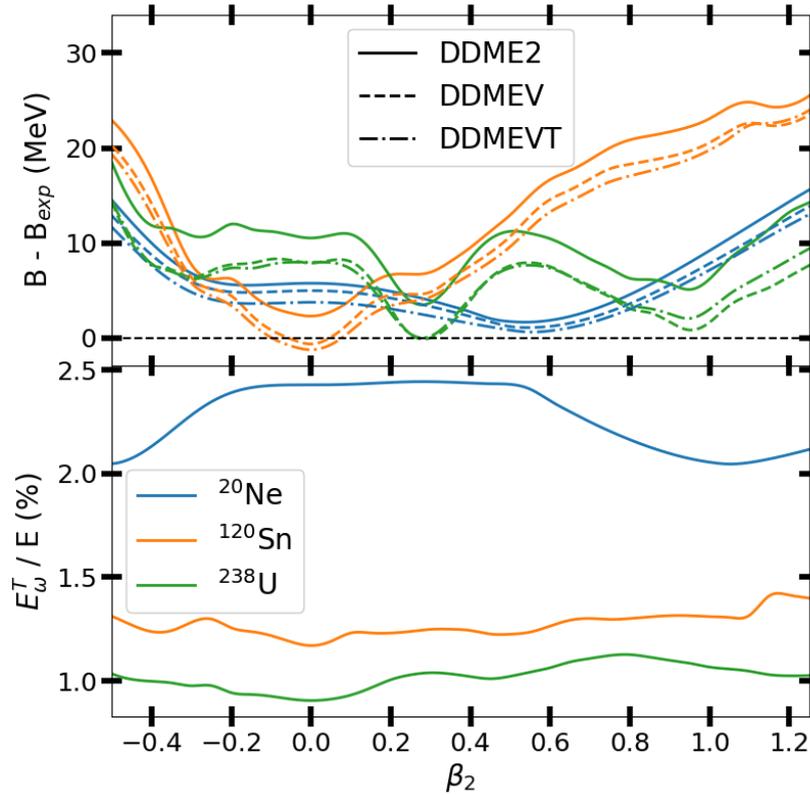


FIGURE 4.9 – PES 1D (en haut) pour le ^{20}Ne , ^{120}Sn et ^{238}U avec les paramétrisations DD-ME2, DD-MEV et DD-MEVT . Le rapport entre énergie tenseur et énergie totale est présenté dans le graphe du bas dans le cas de DD-MEVT.

mation reste assez difficile à suivre et dépend du détail du spectre.

4.4.4 Gaps

Les gaps et séparations spin-orbite sont souvent utilisés pour contraindre et tester l'effet des termes tensoriels. Dans la présente procédure d'ajustement, nous avons principalement utilisé des contraintes sur les gaps puisque différentes études ont mentionné précédemment que les termes tensoriels ont un effet moindre (voire nul) sur les séparations SO [Ren+95; Lon+07]. Ici, nous proposons d'étudier l'impact des termes tensoriels à la fois sur les séparations du SO et sur les gaps.

La table 4.6 affiche les valeurs RMS (comparées à l'expérience) des séparations SO, comparées aux valeurs expérimentales pour certains noyaux sphériques de la réf. [Lon+07]. L'écart-type associé a été calculé en utilisant les 1000 premiers calculs MCMC les plus convergés. Il convient de noter que, déjà pour l'interaction DD-MEV, qui possède les mêmes paramètres que DD-ME2, l'amélioration est assez importante ($\sim 20\%$). Les résultats sont encore améliorés d'un facteur de $\sim 15\%$ lorsque le terme tenseur est ajouté. Il a été vérifié que la partie ρ du terme tensoriel ne contribue pas à plus de 0,02 MeV pour chaque séparation SO. Par conséquent, le terme tensoriel ω est la contribution tensorielle dominante.

RMS	DD-ME2	DD-MEV	DD-MEVT
Séparations SO (MeV)	0.697	0.586 (0.026)	0.519 (0.014)
Gaps (MeV)	1.47	1.35 (0.01)	1.12 (0.02)

TABLE 4.6 – Valeurs RMS des séparations SO et gaps pour différentes interactions. Les écarts-types sont indiqués entre parenthèses.

Les écarts RMS sur les gaps ont été calculés en utilisant 17 écarts (11 d’entre eux étant dans l’ensemble des contraintes de l’onglet 4.2) de la Réf.[Mor+10]. Le RMS est réduit de $\sim 10\%$ entre DD-ME2 et DD-MEV. Cela est dû au fait que plus de 50% des écarts ont été utilisés dans l’ensemble de contraintes. Une deuxième diminution de 20% est observée en incluant le terme tenseur. Là encore, la présence du terme tenseur ρ n’a pas d’impact sur les valeurs des écarts.

Cette analyse montre que le terme tensoriel ω aide à diminuer les RMS sur les séparations SO et les gaps. Cependant, il reste assez difficile de statuer quant au lien direct entre cette amélioration et la structure des termes tensoriels. Une telle amélioration pourrait aussi être liée à l’ajout d’un nouveau terme dans le canal vecteur isoscalaire. Dans tous les cas, il est clair que le terme tensoriel ρ n’a pas d’impact sur les valeurs de ces RMS et ne contribue donc pas beaucoup au niveau de Hartree. Cependant, il a été montré que les termes du tenseur ρ ont une contribution non négligeable à ces termes au niveau Hartree-Fock [Jia+05 ; WDL13 ; Wan+18].

4.4.5 Densité

On s’intéresse ici à l’effet des termes tenseurs sur la densité du noyau. On s’attend, en raison de la nature dérivative du terme tenseur, à ce qu’il joue un rôle lorsque la densité change rapidement. En particulier, cela pourrait avoir des effets importants pour les structures en clusters, les noyaux à bulles ou les noyaux possédant une peau de neutrons.

La Fig.4.10 montre la densité et la différence de densité de ^{20}Ne entre les interactions DD-MEV et DD-MEVT. Les structures en clusters de l’état fondamental du ^{20}Ne rendent ce noyau particulièrement intéressant pour étudier l’impact du terme tenseur. Dans ce cas spécifique, une diminution de la densité ($\sim 5\%$) est visible principalement au centre, alors qu’une augmentation apparaît à la surface ($\sim 2\%$). Les structures en clusters semblent moins prononcées et la densité de saturation chute de 0,191 à 0,187.

La figure 4.11 montre les mêmes quantités pour le noyau ^{34}Si , qui est un noyau bulle[Mut+17]. La bulle dans la densité de protons ne semble pas être affectée par la contribution du terme tenseur. Cependant, nous voyons clairement des couches, commençant par une augmentation au centre ($\sim 2\%$) jusqu’à ~ 1 fm puis une diminution jusqu’à 2 fm etc.

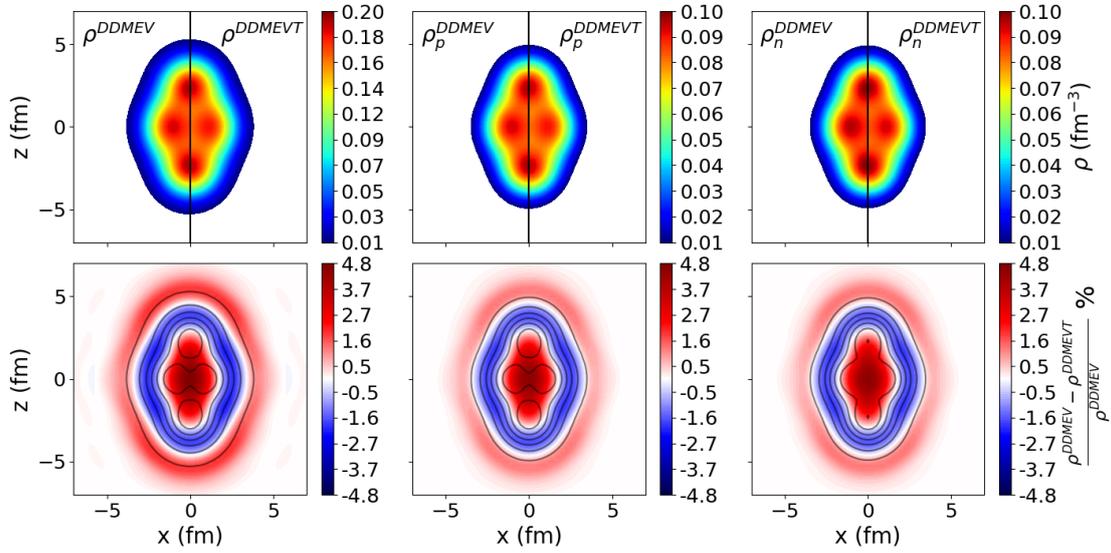


FIGURE 4.10 – Densités (en haut) totale (à gauche), de proton (au milieu) et de neutron (à droite) et différences de densités entre DVV et DD-MEVT (en bas) dans le cas du ^{20}Ne .

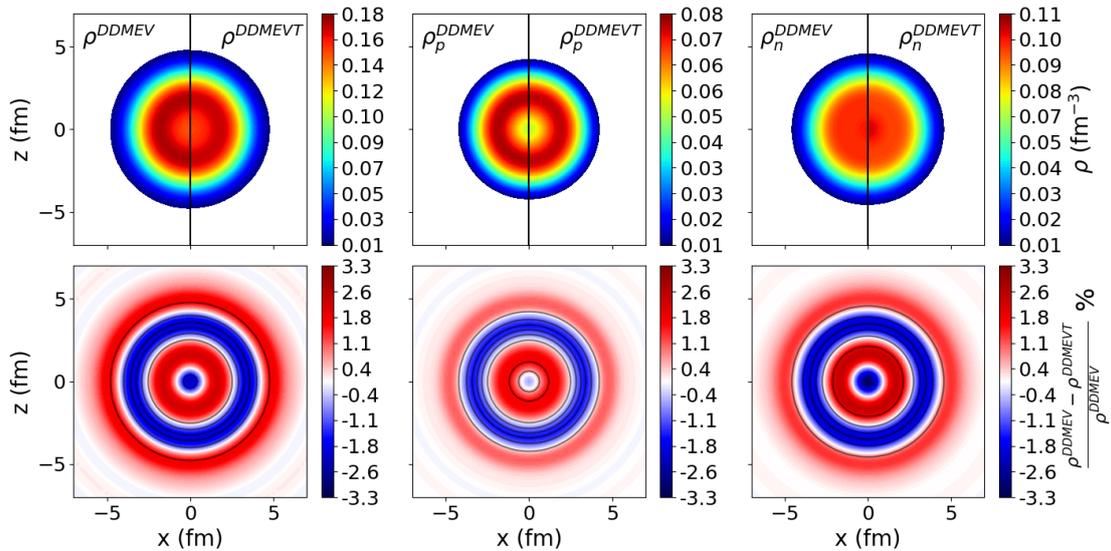


FIGURE 4.11 – Identique à Fig.4.10 mais pour le ^{34}Si .

4.5 Conclusion

Les effets de l'ajout d'un terme tensoriel au niveau RHB ont été étudiés en réajustant une fonctionnelle relativiste basée sur les échanges de mésons. À cette fin, des données de gaps ont été ajoutées à l'ensemble des contraintes afin d'ajuster au mieux les couplages tensoriels. Une première méthode d'échantillonnage MCMC a été utilisée afin d'obtenir des informations sur les minima locaux et de calculer des incertitudes fiables. Une deuxième étape de minimisation simplex a ensuite été mise en œuvre au-dessus des minima locaux trouvés par l'échantillonnage MCMC. Il s'est avéré qu'une paramétrisation minimisant le χ^2 lié à l'ensemble des contraintes n'était pas nécessairement favorable pour tester les propriétés des noyaux à une plus grande échelle sur la carte des noyaux.

Les résultats de cette minimisation montrent que le terme tenseur isoscalaire (canal ω) est bien contraint, alors que la partie isovecteur ne l'est pas. Ce résultat peut avoir deux causes : notre ensemble de contraintes ne permet pas de contraindre ce paramètre ou la partie tenseur isovecteur de l'interaction est trop négligeable au niveau de Hartree (un résultat qui a déjà été remarqué dans des études précédentes [Ruf+88]).

Concernant la description des noyaux, l'étude a été effectuée au niveau RHB dans un code axial, ce qui a permis d'étudier en détail l'impact des termes tenseurs sur la déformation. L'ajout d'un terme tensoriel dans la partie isoscalaire de l'interaction a permis de diminuer l'énergie de liaison, le RMS sur les gaps et les séparations SO de $\sim 10 - 20\%$. Il a été montré que le terme tensoriel est beaucoup plus fort dans les noyaux de faible masse, mais peut avoir des effets non négligeables sur la surface d'énergie potentielle des noyaux de masse élevée.

Concernant la matière infinie, le résultat principal tient dans l'augmentation de la valeur de la masse de Dirac, qui reste un résultat commun lors de l'inclusion de termes tensoriels. Cette augmentation s'explique par l'abaissement de la constante de couplage dans le canal scalaire isoscalaire, modifiant ainsi le potentiel scalaire utilisé dans le calcul de la masse de Dirac. Cet abaissement de la constante de couplage σ est nécessaire car les contributions tensorielles augmentent les séparations SO. La valeur accrue est en meilleur accord avec l'expérience.

D'autres études incluant la contribution de Fock au niveau relativiste montrent clairement que ce terme peut être non négligeable pour tenir compte des effets tenseurs. En particulier, il semble que les effets du méson ρ soient tout à fait négligeables au niveau Hartree alors que plusieurs études prenant en compte le terme Fock contraignent très bien ce paramètre et obtiennent une contribution non négligeable de cette partie de l'interaction. Cependant, au niveau relativiste, il reste numériquement compliqué d'effectuer des calculs RHFB dans des noyaux déformés.

Références

- [BM90] R. BROCKMANN et R. MACHLEIDT. « Relativistic nuclear structure. I. Nuclear matter ». In : *Physical Review C* 42.5 (1^{er} nov. 1990), p. 1965-1980. DOI : [10.1103/PhysRevC.42.1965](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.42.1965) (cf. p. 87).
- [CGH08] F. CHAPPERT, M. GIROD et S. HILAIRE. « Towards a new Gogny force parameterization : Impact of the neutron matter equation of state ». In : *Physics Letters B* 668.5 (23 oct. 2008), p. 420-424. ISSN : 0370-2693. DOI : [10.1016/j.physletb.2008.09.017](https://doi.org/10.1016/j.physletb.2008.09.017) (cf. p. 102).
- [DG80] J. DECHARGÉ et D. GOGNY. « Hartree-Fock-Bogolyubov calculations with the *D1S* effective interaction on spherical nuclei ». In : *Physical Review C* 21.4 (1^{er} avr. 1980), p. 1568-1593. DOI : [10.1103/PhysRevC.21.1568](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.21.1568) (cf. p. 84).
- [For+13] Daniel FOREMAN-MACKEY et al. « emcee : The MCMC Hammer ». In : *Publications of the Astronomical Society of the Pacific* 125.925 (mars 2013), p. 306-312. ISSN : 00046280, 15383873. DOI : [10.1086/670067](https://doi.org/10.1086/670067). arXiv : [1202.3665](https://arxiv.org/abs/1202.3665) (cf. p. 85, 92).
- [FPT97] Michel FARINE, J. M. PEARSON et F. TONDEUR. « Nuclear-matter incompressibility from fits of generalized Skyrme force to breathing-mode energies ». In : *Nuclear Physics A* 615.2 (24 mars 1997), p. 135-161. ISSN : 0375-9474. DOI : [10.1016/S0375-9474\(96\)00453-8](https://doi.org/10.1016/S0375-9474(96)00453-8) (cf. p. 100).
- [FRS98] R. J. FURNSTAHL, John J. RUSNAK et Brian D. SEROT. « The nuclear spin-orbit force in chiral effective field theories ». In : *Nuclear Physics A* 632.4 (30 mars 1998), p. 607-623. ISSN : 0375-9474. DOI : [10.1016/S0375-9474\(98\)00004-9](https://doi.org/10.1016/S0375-9474(98)00004-9) (cf. p. 84).
- [Gor+16] S. GORIELY et al. « The Gogny-Hartree-Fock-Bogoliubov nuclear-mass model ». In : *The European Physical Journal A* 52.7 (26 juill. 2016), p. 202. ISSN : 1434-601X. DOI : [10.1140/epja/i2016-16202-3](https://doi.org/10.1140/epja/i2016-16202-3) (cf. p. 102).
- [GS42] Edward GERJUOY et Julian SCHWINGER. « On Tensor Forces and the Theory of Light Nuclei ». In : *Physical Review* 61.3 (1^{er} fév. 1942), p. 138-146. DOI : [10.1103/PhysRev.61.138](https://doi.org/10.1103/PhysRev.61.138) (cf. p. 84).
- [HM87] B. Ter HAAR et R. MALFLIET. « Relativistic aspects of the nuclear mean field in high-energy nucleus-nucleus collisions ». In : *Physics Letters B* 196.4 (15 oct. 1987), p. 414-418. ISSN : 0370-2693. DOI : [10.1016/0370-2693\(87\)90792-1](https://doi.org/10.1016/0370-2693(87)90792-1) (cf. p. 87).
- [Jia+05] W. Z. JIANG et al. « Role of ρ tensor coupling and $2s_{1/2}$ occupation in light exotic nuclei ». In : *Physical Review C* 72.2 (18 août 2005), p. 024313. DOI : [10.1103/PhysRevC.72.024313](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.72.024313) (cf. p. 85, 105).
- [Jia+15] Li Juan JIANG et al. « Nuclear tensor interaction in a covariant energy density functional ». In : *Physical Review C* 91.3 (24 mars 2015), p. 034326. DOI : [10.1103/PhysRevC.91.034326](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.91.034326) (cf. p. 84).

- [JM89] M. JAMINON et C. MAHAUX. « Effective masses in relativistic approaches to the nucleon-nucleus mean field ». In : *Physical Review C* 40.1 (1^{er} juill. 1989), p. 354-367. DOI : [10.1103/PhysRevC.40.354](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.40.354) (cf. p. 101).
- [JM90] M. JAMINON et C. MAHAUX. « Fermi surface anomaly and depletion of the Fermi sea in the relativistic Brueckner-Hartree-Fock approximation ». In : *Physical Review C* 41.2 (1^{er} fév. 1990), p. 697-705. DOI : [10.1103/PhysRevC.41.697](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.41.697) (cf. p. 101).
- [JO91] Zhang JIAN-KANG et D. S. ONLEY. « Relativistic Hartree study of deformed nuclei ». In : *Nuclear Physics A* 526.2 (29 avr. 1991), p. 245-264. ISSN : 0375-9474. DOI : [10.1016/0375-9474\(91\)90286-F](https://doi.org/10.1016/0375-9474(91)90286-F) (cf. p. 84).
- [Kor+10] M. KORTELAJAINEN et al. « Nuclear energy density optimization ». In : *Physical Review C* 82.2 (13 août 2010), p. 024313. DOI : [10.1103/PhysRevC.82.024313](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.82.024313) (cf. p. 91).
- [Les+07] T. LESINSKI et al. « Tensor part of the Skyrme energy density functional : Spherical nuclei ». In : *Physical Review C* 76.1 (26 juill. 2007), p. 014312. DOI : [10.1103/PhysRevC.76.014312](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.76.014312) (cf. p. 84).
- [Lon+07] WenHui LONG et al. « Shell structure and ρ -tensor correlations in density dependent relativistic Hartree-Fock theory ». In : *Physical Review C* 76.3 (14 sept. 2007), p. 034314. DOI : [10.1103/PhysRevC.76.034314](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.76.034314) (cf. p. 84, 85, 104).
- [MHG18] Jérôme MARGUERON, Rudiney HOFFMANN CASALI et Francesca GULMINELLI. « Equation of state for dense nucleonic matter from metamodeling. I. Foundational aspects ». In : *Physical Review C* 97.2 (28 fév. 2018), p. 025805. DOI : [10.1103/PhysRevC.97.025805](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.97.025805) (cf. p. 89, 100).
- [Mor+10] M. MORENO-TORRES et al. « Tensor effects in shell evolution at Z, N=8, 20, and 28 using nonrelativistic and relativistic mean-field theory ». In : *Physical Review C* 81.6 (29 juin 2010), p. 064327. DOI : [10.1103/PhysRevC.81.064327](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.81.064327) (cf. p. 89, 105).
- [Mut+17] A. MUTSCHLER et al. « A proton density bubble in the doubly magic ^{34}Si nucleus ». In : *Nature Physics* 13.2 (fév. 2017), p. 152-156. ISSN : 1745-2481. DOI : [10.1038/nphys3916](https://doi.org/10.1038/nphys3916) (cf. p. 105).
- [Nea93] Radford M. NEAL. *Probabilistic inference using Markov chain Monte Carlo methods*. Department of Computer Science, University of Toronto Toronto, ON, Canada, 1993 (cf. p. 85).
- [NND] NNDC. *National Nuclear Data Center*. URL : <https://www.nndc.bnl.gov/ensdf/> (cf. p. 90).
- [Pre89] William H. PRESS, éd. *Numerical recipes in Pascal : the art of scientific computing*. Cambridge ; New York : Cambridge University Press, 1989. 759 p. ISBN : 978-0-521-37516-0 (cf. p. 85, 91).
- [Ren+95] Zhongzhou REN et al. « Spin-orbit splittings in the relativistic mean-field theory ». In : *Journal of Physics G : Nuclear and Particle Physics* 21.11 (nov. 1995), p. L83-L88. ISSN : 0954-3899. DOI : [10.1088/0954-3899/21/11/001](https://doi.org/10.1088/0954-3899/21/11/001) (cf. p. 84, 104).

- [RS41] William RARITA et Julian SCHWINGER. « On the Neutron-Proton Interaction ». In : *Physical Review* 59.5 (1^{er} mars 1941), p. 436-452. DOI : [10.1103/PhysRev.59.436](https://doi.org/10.1103/PhysRev.59.436) (cf. p. 84).
- [Ruf+88] M. RUFA et al. « Optimal parametrization for the relativistic mean-field model of the nucleus ». In : *Physical Review C* 38.1 (1^{er} juill. 1988), p. 390-409. DOI : [10.1103/PhysRevC.38.390](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.38.390) (cf. p. 84, 107).
- [SBF77] Fl. STANCU, D. M. BRINK et H. FLOCARD. « The tensor part of Skyrme's interaction ». In : *Physics Letters B* 68.2 (23 mai 1977), p. 108-112. ISSN : 0370-2693. DOI : [10.1016/0370-2693\(77\)90178-2](https://doi.org/10.1016/0370-2693(77)90178-2) (cf. p. 84).
- [Sca+21] Guillaume SCAMPS et al. « Skyrme-Hartree-Fock-Bogoliubov mass models on a 3D Mesh : Effect of triaxial shape ». In : *arXiv :2011.07904 [nucl-th]* (12 oct. 2021). arXiv : [2011.07904](https://arxiv.org/abs/2011.07904) (cf. p. 91).
- [TA20] Stefan TYPEL et Diana ALVEAR TERRERO. « Parametrisations of relativistic energy density functionals with tensor couplings ». In : *The European Physical Journal A* 56.6 (4 juin 2020), p. 160. ISSN : 1434-601X. DOI : [10.1140/epja/s10050-020-00172-2](https://doi.org/10.1140/epja/s10050-020-00172-2) (cf. p. 84, 85, 101).
- [Tar+08] Dimitar TARPANOV et al. « Mean-field study of single-particle spectra evolution in Z=14 and N=28 chains ». In : *Physical Review C* 77.5 (27 mai 2008), p. 054316. DOI : [10.1103/PhysRevC.77.054316](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.77.054316) (cf. p. 89).
- [Tol+18] S. V. TOLOKONNIKOV et al. « Influence of Effective Tensor Forces on the Fission Barriers of Nuclei in the Uranium Region ». In : *JETP Letters* 107.2 (1^{er} jan. 2018), p. 86-90. ISSN : 1090-6487. DOI : [10.1134/S0021364018020121](https://doi.org/10.1134/S0021364018020121) (cf. p. 103).
- [TW99] S. TYPEL et H. H. WOLTER. « Relativistic mean field calculations with density-dependent meson-nucleon coupling ». In : *Nuclear Physics A* 656.3 (6 sept. 1999), p. 331-364. ISSN : 0375-9474. DOI : [10.1016/S0375-9474\(99\)00310-3](https://doi.org/10.1016/S0375-9474(99)00310-3) (cf. p. 87).
- [Wan+18] Zhiheng WANG et al. « Quantitative analysis of tensor effects in the relativistic Hartree-Fock theory ». In : *Physical Review C* 98.3 (17 sept. 2018), p. 034313. DOI : [10.1103/PhysRevC.98.034313](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.98.034313) (cf. p. 105).
- [WDL13] Long Jun WANG, Jian Min DONG et Wen Hui LONG. « Tensor effects on the evolution of the N=40 shell gap from nonrelativistic and relativistic mean-field theory ». In : *Physical Review C* 87.4 (1^{er} avr. 2013), p. 047301. DOI : [10.1103/PhysRevC.87.047301](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.87.047301) (cf. p. 84, 105).

 Étude des excitations isoscalaires monopolaires de basse énergie

Ce chapitre est partiellement adapté des travaux décrits dans F. Mercier et al. (2021) [Mer+21] concernant les résultats dans les chaînes $N = Z$ et F. Mercier et al. (2022) [MEK22] pour l'extension aux noyaux riches en neutrons. Des résultats complémentaires sont aussi présentés.

Sommaire

5.1	Introduction	112
5.1.1	Au-delà du champ moyen	112
5.1.2	Excitations	114
5.2	Méthode des amplitudes finies	116
5.2.1	Méthode Hartree-Fock dépendant du temps	117
5.2.2	QRPA	118
5.2.3	QFAM	120
5.2.4	Fonction de réponse et lien avec la QRPA	122
5.2.5	Aspects numériques	124
5.3	Modes propres avec la FAM	125
5.3.1	Obtenir les probabilités de transition	126
5.3.2	Obtenir les amplitudes propres	127
5.3.3	Obtenir tous les pôles de la fonction de réponse	127
5.3.4	Procédure numérique	128
5.4	Excitations cluster	133
5.4.1	Exemple du ^{20}Ne	134
5.4.2	Fonction de réponse à déformation contrainte	137
5.4.3	Études d'autres noyaux $N = Z$	138
5.5	Excitations de neutrons	140

5.5.1	Chaînes isotopiques du Calcium et du Nickel	141
5.5.2	Généralisation	147
5.5.3	Impact de la déformation	148
5.6	Excitation de paires	152
5.6.1	Cas sphérique	154
5.6.2	Impact de la déformation	155
5.7	Conclusion	157
	Références	158

5.1 Introduction

Les systèmes nucléaires sont le siège de nombreux types d’excitations. Ces excitations peuvent être de nature très collectives (comme certaines résonances géantes) ou bien (quasi-) individuelles (comme certaines résonances pygmées) où un nombre très restreint de niveaux sont mis en jeu (voire un seul niveau parfois). Il est aussi possible de différencier des excitations vibrationnelles et rotationnelles, des mouvements en phase des neutrons/protons ou en opposition de phase, etc. La diversité de ces excitations rend leur étude aussi riche que complexe, aussi bien du point de vue expérimental que théorique.

Jusqu’à présent, les propriétés des noyaux ont été étudiées au niveau du champ moyen statique (Chap.2). Cette approximation nous a permis de comprendre de nombreuses propriétés des états fondamentaux des noyaux (énergie de liaison, rayon, déformation, ...). L’étude des excitations nécessite, quant à elle, l’élaboration d’un nouveau cadre théorique permettant de prendre en compte des effets au-delà du champ moyen.

5.1.1 Au-delà du champ moyen

Dans les chapitres précédents, le formalisme du champ moyen a été introduit et certaines propriétés des états fondamentaux des noyaux ont été étudiées. Cependant, les effets au-delà du champ moyen, présents dans la partie résiduelle de l’interaction (qui n’est donc pas prise en compte au niveau champ moyen), peuvent avoir un impact important sur les propriétés des noyaux. En effet, dans le cas où un noyau posséderait par exemple des minima locaux dans une surface d’énergie potentielle (PES pour Potential Energy Surface) associés à une famille d’états HFB générateurs $|\phi\rangle$ espacés de seulement quelques centaines de keV, il y a de fortes chances pour que ces minima locaux se mélangent pour donner des configurations plus complexes. Dans le traitement champ moyen présenté précédemment, l’état fondamental du système est pris comme celui minimisant l’énergie du système, il s’agissait donc d’un état unique. Le mélange de configurations peut être décrit avec la méthode des coordonnées génératrices (GCM pour Generator Coordinate Method) succinctement présentée ci-dessous.

De la même façon, le champ moyen ne permet pas d’étudier les propriétés d’excitations du système. La diagonalisation de l’Hamiltonien au niveau champ moyen ne nous donne des informations que sur les propriétés de l’état fondamental. Les propriétés d’excitations du système peuvent, quant à elles, aussi être étudiée au niveau GCM (pour les

faibles énergies) ou bien avec le formalisme de la RPA (Random Phase Approximation) qui fait l'objet du présent chapitre.

EDF multi-référence et GCM

Les formalismes permettant la prise en compte de plusieurs états de référence sont généralement regroupés sous l'acronyme générique de MR-EDF (Multi Reference EDF) et utilise le formalisme de la GCM. Cette méthode est très brièvement décrite ici, mais ne sera pas utilisée dans les travaux présentés ci-dessous.

L'idée de la méthode GCM revient à mélanger les états HFB afin d'obtenir une meilleure description des états fondamentaux des noyaux. Cette méthode permet de plus d'obtenir les états excités des systèmes nucléaires. On se propose ici de donner les éléments principaux de la dérivation sans pour autant rentrer dans les détails (voir par exemple [Won75; NVR11; VR20] pour les détails et applications actuelles). En supposant par simplicité qu'une seule coordonnée génératrice Q est étudiée ici, et en notant $|\phi_q\rangle$ les états champs moyens obtenus en contraignant le système à avoir une valeur moyenne $\langle Q \rangle = q$, alors l'état de mélange prendra la forme

$$|\psi\rangle = \int dq f(q) |\phi_q\rangle \quad (5.1)$$

Les inconnues de ce problème deviennent alors les fonctions de poids $f(q)$ qui peuvent être déterminées de manière variationnelle en utilisant cette fois-ci la fonctionnelle

$$\mathcal{E} = \frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (5.2)$$

avec \hat{H} l'Hamiltonien total du système. De la même façon que précédemment, on impose la normalisation des fonctions d'onde et la minimisation de cette fonctionnelle par rapport aux variables $f(q)$ prend alors la forme suivante

$$\int dq' \mathcal{H}(q, q') f(q') = E \int dq' \mathcal{I}(q, q') f(q') \quad (5.3)$$

avec H et I les noyaux définissant les recouvrements

$$\mathcal{H}(q, q') = \langle \phi_q | \hat{H} | \phi_{q'} \rangle \quad (5.4)$$

$$\mathcal{I}(q, q') = \langle \phi_q | \phi_{q'} \rangle \quad (5.5)$$

Ces quantités peuvent être calculées à partir des résultats du champs moyens même si elles représentent le coût numérique le plus important dans les calculs GCM. La résolution de l'équation Eq.(5.3) permet ensuite d'obtenir une famille de solution $f_i(q)$ dont $i = 0$ représente l'état fondamental et $i > 0$ les états excités du système.

Excitations particules-trous et RPA

Il est possible de procéder différemment en considérant cette fois un mélange non pas de configurations associées à une coordonnée collective, mais un mélange de configurations de la forme

$$|\Phi\rangle = C_0 |HF\rangle + \sum_{m,i} C_{m,i} a_m^\dagger a_i |HF\rangle + \sum_{m,n,i,j} C_{m,n,i,j} a_m^\dagger a_n^\dagger a_i a_j |HF\rangle + \dots \quad (5.6)$$

où $|HF\rangle$ représente un état HF, $a^{(\dagger)}$ représente les opérateurs d'annihilation du vide de particules et création et les coefficients C sont les inconnues à trouver. Les indices m, n et i, j couvrent respectivement les niveaux au-dessus et en dessous du niveau de Fermi. Écrit sous cette forme, l'état $|\Phi\rangle$ prend en compte les excitations particules-trous et permet donc d'inclure des corrélations absentes au niveau HF.

La RPA est une méthode permettant de prendre en compte ces corrélations particules-trous supplémentaires. Le formalisme associé et certaines applications sont présentés dans les sections suivantes de ce chapitre 5.2 et 5.3.

5.1.2 Excitations

Afin d'étudier ces excitations, la réponse des noyaux à une excitation externe est analysée. D'un point de vue expérimental, cela correspond à l'utilisation de différentes sondes (photon, particules, ...). Chaque sonde possède des propriétés particulières et son interaction avec le noyau est soumise à des règles précises. Par exemple dans le cas d'une interaction photon-noyau (photo-absorption), la règle de sélection concerne la modification du moment angulaire du noyau $\Delta L = 1$ ainsi qu'une sélection sur l'isospin $\Delta T = 1$. De façon plus générale, on classe les différents types d'excitations à l'aide de leur multipolarité L , leur spin S et leur isospin T . Par la suite, nous nous intéressons particulièrement au mode $\Delta L = 0$ (excitation monopolaire) où le moment angulaire reste constant, $\Delta S = 0$ excitation électrique où le spin n'est pas impacté et $\Delta T = 0$ (excitation isoscalaire) où les nucléons sont en phase. On dénote généralement ce type d'excitation par l'acronyme ISM (IsoScalar Monopole). Le caractère isoscalaire est imposé afin d'étudier les mouvements collectifs (et individuels) des protons et neutrons en phase, ce qui permet, à termes, d'étudier les structures en clusters dans les résonances.

Formellement, l'étude des excitations d'un noyau revient à calculer l'effet d'un opérateur \mathcal{O} sur l'état fondamental $|\psi_{GS}\rangle$ du système

$$|\psi_{EX}\rangle = \mathcal{O} |\psi_{GS}\rangle. \quad (5.7)$$

Cet opérateur dépend des quantités L , S et T discutées précédemment et, dans le cas d'une excitation électrique isoscalaire, prend la forme suivante

$$\mathcal{O}_K^L = \sum_{i=1}^A r_i^L Y_{L,K}(\Omega_i) \quad (5.8)$$

avec $|K| \leq L$, A le nombre de nucléons du système et Y les harmoniques sphériques. Il est alors possible de définir les moments multipolaires $\mathcal{M}(L, K)$ (au premier ordre[HY03])

$$\mathcal{M}(L, K) = \int \rho(\mathbf{r}) r^L Y_{LK}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (5.9)$$

où ρ représente la distribution spatiale des nucléons dans le noyau. Ces moments peuvent alors être utilisés pour calculer les probabilités de transition et les fonctions de réponse du système.

Les excitations très collectives que sont les résonances géantes (GR) ont attiré l'attention des physiciens nucléaires depuis plusieurs décennies[HW01]. Il s'agit de résonances

collectives inhérentes au problème quantique à N-corps que constitue les systèmes nucléaires. Ces résonances impliquent une grande partie, voire tous les nucléons du noyau dont le mouvement collectif s'apparente alors à une vibration autour de l'état fondamental du système. Les différents modes de vibrations sont schématisés sur la Fig.5.1. Ces modes se manifestent généralement à haute énergie (~ 10 MeV et plus), la position exacte ainsi que la largeur et l'amplitude de ces résonances étant dictées par les propriétés macroscopiques et microscopiques du système.

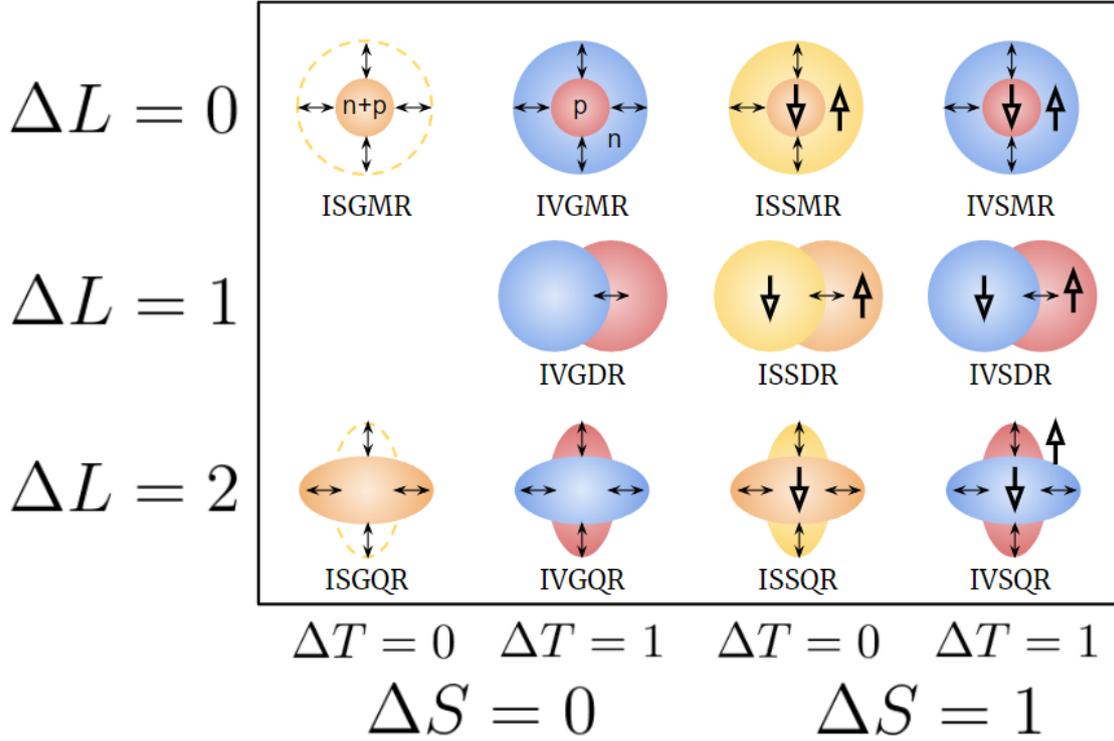


FIGURE 5.1 – Représentation schématique des différents modes de résonance géante. Les couleurs orange, rouge et bleue représentent respectivement un ensemble de protons + neutrons, protons seuls et neutrons seuls. Les flèches fines représentent un mouvement collectif. Les flèches pleines représentent les spins des particules impliquées dans le mouvement. Voir le texte pour plus de détails. Figure inspirée de [RS80].

Expérimentalement, la résonance géante isovecteur dipolaire (IVGDR) fut la première découverte en 1947 [BK47] dans des expériences de réactions photo-nucléaire. Sa position en énergie suit une loi empirique de la forme $E_{IVGDR} = 31.2 A^{-1/3} + 20.6 A^{-1/6}$ où A représente le nombre de nucléons composant un noyau [HY03]. La résonance géante isoscalaire quadrupolaire (ISGQR) fut ensuite découverte bien plus tard, en 1971-1972 [PW71; FT72; LB72; Ber76]. De la même façon, il est possible de déduire des expériences une loi empirique de sa position en énergie pour les noyaux $A > 90$ de la forme $E_{ISGQR}^{A>90} \approx 64.7 A^{-1/3}$. La découverte de la résonance géante isoscalaire monopolaire (ISGMR) arriva quelques années plus tard en 1977 [Har+77; You+77] avec une position empirique en énergie de $E_{ISGMR}^{A>90} \approx 80 A^{-1/3}$. Ce dernier mode a particulièrement attiré l'attention des physiciens nucléaires à cause de son lien avec le facteur de compressibilité nucléaire K [Bla+95].

Dans ce chapitre, on se propose d'étudier les résonances apparaissant à des énergies inférieures à celle des GR, principalement dans le canal isoscalaire monopolaire. Cette étude est motivée par des résultats expérimentaux montrant qu'une augmentation significative de la fonction de réponse monopolaire à des énergies inférieures de celle de la résonance géante dans des noyaux légers est observée [YLC97; YLC98; LCY01; YLC02; Yil+06; Van+14; Gup+15]. Ces résonances ont, pour certaines, été reliées à des modes dits de cluster décrits dans des approches de modèle cluster [TA78; Ueg+79; Kam81; DB87; SH89; Che+07; Ito11; Del+12; KS19] aussi bien qu'avec des modèles de dynamique moléculaire anti-symétrisé (AMD) couplées à de la GCM [Kim04; CK15; CKT16; Kan16; KO20]. Ces modes font l'objet de la section 5.4.

Dans les systèmes riches en neutrons, certains modes de basse énergie sont aussi associés à des résonances purement neutroniques. La plupart des études sur ces modes se sont concentrées sur les résonances dipolaires et/ou les systèmes sphériques (voir cependant la Réf. [Yos10; Van+14] pour une discussion sur les modes soft monopolaires dans les noyaux déformés riches en neutrons). Une compréhension globale de l'évolution de la partie basse énergie de la réponse monopolaire isoscalaire (ISM), avec asymétrie d'isospin et déformation, fait encore défaut. Ces modes font l'objet de la section 5.5.

Des modes de très basse énergie (~ 1 MeV) sont aussi observés expérimentalement et théoriquement [BB66; BB77; Vit+80; Kha+04; MMS05; YYM06] correspondant à des effets d'appariement. Généralement appelés vibrations de paires, ces modes d'excitations impliquent des contributions particule-particule, particule-trou et trou-trou. Ces modes sont brièvement étudiés à la fin de ce chapitre en section 5.6.

5.2 Méthode des amplitudes finies

Comme introduit précédemment, la (Q)RPA est une méthode permettant d'étudier la physique des systèmes nucléaires au-delà du champ moyen, en prenant en compte les excitations particules-trous dans la description du système. La (Q)FAM (Finite Amplitude Method) peut, quant à elle, être interprétée comme une reformulation des équations (Q)RPA où les champs sont linéarisés pour simplifier la résolution du problème. Cette section et la suivante présentent le cadre théorique de la QFAM et traite du lien avec la QRPA.

La RPA a d'abord été introduite comme une méthode permettant d'étudier la réponse des électrons à un potentiel électrique extérieur, dans le cadre de la matière condensée [BP51; PB52; BP53; EC59], puis quelques années plus tard pour l'étude des excitations dans des plasmas [Saw57; Saw+57]. Ces méthodes ont ensuite été adaptées à l'étude des excitations dans les systèmes nucléaires avec des interactions phénoménologiques [Saw61; SS61] puis rapidement étendues à des méthodes allant au-delà de la (Q)RPA [Saw62]. Une formulation plus moderne a été proposée à la fin des années 60 par Rowe [ROW68]. Les premiers calculs auto-cohérents apparaissent quelques années plus tard dans le cas de fonctionnelles de Skyrme [BT75; LV76; Kre+77] (voir [QF78] pour plus de détails). Les formulations relativistes de la RPA apparaissent dans la même période [JL76; Joh+80; SD80]. Finalement, les premiers calculs auto-cohérents au niveau HFB et QRPA verront le jour une vingtaine d'années plus tard [Eng+99;

Gia+03; Paa+03].

La formulation FAM des équations RPA a été proposée par Nakatsukasa en 2007 [NIY07] afin de simplifier la résolution numérique en linéarisant les champs. Cela permet de transformer le problème matriciel de la RPA en un système d'équations linéaires indépendantes. Cette formulation a rapidement été généralisée aux noyaux superfluides [AN11] puis déformés (et superfluides) [Sto+11; Nik+13].

Les équations QRPA (et donc QFAM par extension) peuvent être dérivées de différentes manières. Il est possible d'utiliser la méthode des équations du mouvement [ROW68] où la formulation est faite dans une approche statique. Une autre méthode revient à recourir au formalisme dépendant du temps en dérivant les équations HFB dépendantes du temps (TDHFB) puis de les linéariser (ce qui donne exactement les équations QRPA). Cette approche porte généralement le nom de théorie de la réponse linéaire, et est présentée dans les sous-sections suivantes.

5.2.1 Méthode Hartree-Fock dépendant du temps

Un point de départ possible pour la dérivation des équations (Q)RPA correspond aux équations Hartree-Fock(-Bogoliubov) dépendantes du temps (TDHF(B)). On se propose ici une dérivation simplifiée permettant de donner les idées principales en partant de l'évolution temporelle très générique d'une fonction d'onde quelconque

$$\psi(t) = e^{-iHt}\psi(0) \quad (5.10)$$

où H représente l'Hamiltonien du système. Il est alors possible d'introduire la densité dépendante du temps comme

$$\rho_{\alpha\beta}(t) = \langle \psi(t) | c_{\beta}^{\dagger} c_{\alpha} | \psi(t) \rangle \quad (5.11)$$

Les équations du mouvement sont obtenues en appliquant la dérivée temporelle

$$\begin{aligned} \partial_t \rho_{\alpha\beta} &= iH \langle \psi(t) | c_{\beta}^{\dagger} c_{\alpha} | \psi(t) \rangle - \langle \psi(t) | c_{\beta}^{\dagger} c_{\alpha} (-i)H | \psi(t) \rangle \\ \partial_t \rho_{\alpha\beta} &= \langle \psi(t) | [iH, c_{\beta}^{\dagger} c_{\alpha}] | \psi(t) \rangle, \end{aligned} \quad (5.12)$$

que l'on réécrit par convention

$$i\partial_t \rho_{\alpha\beta} = \langle \psi(t) | [c_{\beta}^{\dagger} c_{\alpha}, H] | \psi(t) \rangle \quad (5.13)$$

Il est ici intéressant de remarquer qu'en utilisant la forme à deux-corps dérivée dans le chapitre Chap.2 (que l'on rappelle par commodité ici)

$$H = \sum_{\alpha\beta} t_{\alpha\beta} c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta} + \frac{1}{4} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \bar{v}_{\alpha\beta\gamma\delta} c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta}^{\dagger} c_{\gamma} c_{\delta}, \quad (5.14)$$

et en l'insérant dans Eq.(5.13), on obtient

$$\begin{aligned}
i\partial_t\rho_{\alpha\beta} &= \langle\psi(t)| \left[c_\beta^\dagger c_\alpha, \sum_{\delta\gamma} t_{\delta\gamma} c_\delta^\dagger c_\gamma + \frac{1}{2} \sum_{\delta\gamma\epsilon\nu} \bar{v}_{\delta\gamma\epsilon\nu} c_\delta^\dagger c_\gamma^\dagger c_\nu c_\epsilon \right] |\psi(t)\rangle \\
&= \sum_{\delta\gamma} t_{\delta\gamma} \langle\psi(t)| \left[c_\beta^\dagger c_\alpha, c_\delta^\dagger c_\gamma \right] |\psi(t)\rangle + \frac{1}{2} \sum_{\delta\gamma\epsilon\nu} \bar{v}_{\delta\gamma\epsilon\nu} \langle\psi(t)| \left[c_\beta^\dagger c_\alpha, c_\delta^\dagger c_\gamma^\dagger c_\nu c_\epsilon \right] |\psi(t)\rangle \\
&= \sum_{\delta} (t_{\alpha\delta}\rho_{\delta\beta} - \rho_{\alpha\delta}t_{\delta\beta}) + \frac{1}{2} \sum_{\gamma\epsilon\nu} \langle\psi(t)| \left(\bar{v}_{\alpha\gamma\epsilon\nu} c_\beta^\dagger c_\gamma^\dagger c_\nu c_\epsilon - \bar{v}_{\epsilon\gamma\beta\nu} c_\epsilon^\dagger c_\gamma^\dagger c_\nu c_\alpha \right) |\psi(t)\rangle \\
i\partial_t\rho_{\alpha\beta} &= \sum_{\delta} (t_{\alpha\delta}\rho_{\delta\beta} - \rho_{\alpha\delta}t_{\delta\beta}) + \frac{1}{2} \sum_{\gamma\epsilon\nu} \left(\bar{v}_{\alpha\gamma\epsilon\nu} \rho_{\epsilon\nu\beta\gamma}^{(2)} - \bar{v}_{\epsilon\gamma\beta\nu} \rho_{\alpha\nu\epsilon\gamma}^{(2)} \right) \tag{5.15}
\end{aligned}$$

avec la densité à deux corps définie comme

$$\rho_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(2)} = \langle\psi(t)| c_\gamma^\dagger c_\delta^\dagger c_\beta c_\alpha |\psi(t)\rangle \tag{5.16}$$

En procédant comme précédemment il est possible d'utiliser le théorème de Wick pour décomposer la formule précédente

$$\rho_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(2)} = \rho_{\alpha\gamma}\rho_{\beta\delta} - \rho_{\alpha\delta}\rho_{\beta\gamma} + g_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(2)} \tag{5.17}$$

où le dernier terme représente toutes les contributions corrélées. En introduisant maintenant le potentiel Hartree-Fock, il est possible d'écrire

$$\Gamma_{\alpha\beta} = \sum_{\delta\gamma} \bar{v}_{\alpha\gamma\beta\delta} \rho_{\delta\gamma}, \tag{5.18}$$

et donc

$$i\partial_t\rho_{\alpha\beta} = [t + \Gamma, \rho]_{\alpha\beta} + \frac{1}{2} \sum_{\gamma\epsilon\nu} \left(\bar{v}_{\alpha\gamma\epsilon\nu} g_{\epsilon\nu\beta\gamma}^{(2)} - \bar{v}_{\epsilon\gamma\beta\nu} g_{\alpha\nu\epsilon\gamma}^{(2)} \right) \tag{5.19}$$

En négligeant les corrélations dans le système i.e. en supposant que $g^{(2)}$ est négligeable, on obtient la forme bien connue de l'équation TDHF

$$i\partial_t\rho_{\alpha\beta} = [t + \Gamma, \rho]_{\alpha\beta} \tag{5.20}$$

Ou bien sous forme plus compacte

$$i\dot{\rho} = [h, \rho] \tag{5.21}$$

avec $h = t + \Gamma$.

5.2.2 QRPA

La dérivation des équations de la QRPA à partir des équations TDHFB peut être faite de différentes façons : à partir de l'évolution temporelle de la matrice densité généralisée ou bien à partir de l'évolution de l'opérateur quasi-particule a_μ . Afin d'éviter d'inutiles répétitions, on se propose ici de dériver les équations de la QRPA à l'aide de la seconde méthode impliquant l'évolution temporelle de l'opérateur de quasi-particule $a_\mu^\dagger(t)$. On

considère donc un champ externe $F(t)$. L'évolution temporelle de l'opérateur a s'écrit simplement comme $a_\mu(t) = e^{-iHt} a_\mu$ et en prenant la dérivée temporelle on obtient

$$i\partial_t a_\mu(t) = [H(t) + F(t), a_\mu(t)] \quad (5.22)$$

Il est alors pertinent d'appliquer une transformée de Fourier aux différentes quantités

$$F(t) = \eta (F(\omega) e^{-i\omega t} + F^\dagger(\omega) e^{i\omega t}) \quad (5.23)$$

caractérisée par un paramètre η supposé petit. On écrit aussi

$$F(\omega) = \frac{1}{2} \sum_{\mu\nu} (F_{\mu\nu}^{20} a_\mu^\dagger a_\nu^\dagger + F_{\mu\nu}^{02} a_\nu a_\mu) + \sum_{\mu\nu} F_{\mu\nu}^{11} a_\mu^\dagger a_\nu \quad (5.24)$$

où le dernier terme ne contribue pas à la réponse linéaire du système et sera donc omis dans les étapes suivantes. On fait ensuite de même avec l'Hamiltonien

$$H(t) = H_0 + \eta (\delta H(\omega) e^{-i\omega t} + \delta H^\dagger(\omega) e^{i\omega t}) \quad (5.25)$$

$$\delta H(\omega) = \frac{1}{2} \sum_{\mu\nu} (\delta H_{\mu\nu}^{20} a_\mu^\dagger a_\nu^\dagger + \delta H_{\mu\nu}^{02} a_\nu a_\mu) \quad (5.26)$$

Puis avec l'opérateur de quasi-particule

$$a_\mu(t) = (a_\mu + \delta a_\mu(t)) e^{iE_\mu t} \quad (5.27)$$

$$\delta a_\mu(t) = \eta \sum_\nu a_\nu^\dagger (X_{\nu\mu}(\omega) e^{-i\omega t} + Y_{\nu\mu}^* e^{i\omega t}) \quad (5.28)$$

Étant donné le caractère fermionique des quantités décrites ici, l'équation précédente impose des contraintes sur les quantités X et Y qui doivent satisfaire des relations d'anti-commutation $\{a_\mu(t), a_\nu(t)\} = 0$ faisant de X et Y des quantités anti-symétriques.

L'équation précédente Eq.(5.22) peut être séparée en plusieurs contributions suivant leur ordre ce qui permet d'écrire

$$i\partial_t (\delta a_\mu(t) e^{iE_\mu t}) = [\delta H(t) + F(t), a_\mu] + [H_0, \delta a_\mu(t)] \quad (5.29)$$

En injectant les résultats précédents il vient

$$(\omega - E_\mu - E_\nu) X_{\mu\nu} = \delta H_{\mu\nu}^{20} + F_{\mu\nu}^{20} \quad (5.30)$$

$$-(\omega + E_\mu + E_\nu) Y_{\mu\nu} = \delta H_{\mu\nu}^{02} + F_{\mu\nu}^{02} \quad (5.31)$$

Finalement, afin d'obtenir les équations usuelles de la QRPA, il suffit juste de faire le développement de $\delta H_{\mu\nu}$ sur les variables $X_{\mu\nu}$ et $Y_{\mu\nu}$ ce qui permet d'écrire le système matriciel suivant

$$\left[\begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix} - \omega \begin{pmatrix} \mathbb{I} & 0 \\ 0 & -\mathbb{I} \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} X(\omega) \\ Y(\omega) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F^{20}(\omega) \\ F^{02}(\omega) \end{pmatrix} \quad (5.32)$$

où les éléments de matrices A et B peuvent s'écrire en fonction de l'Hamiltonien du système comme

$$A_{minj} = \langle 0 | \left[a_i^\dagger a_m, \left[\hat{H}, a_n^\dagger a_j \right] \right] | 0 \rangle \quad (5.33a)$$

$$B_{minj} = - \langle 0 | \left[a_i^\dagger a_m, \left[\hat{H}, a_j^\dagger a_n \right] \right] | 0 \rangle \quad (5.33b)$$

où $|0\rangle$ représente l'état de référence (ici un état RHB). Leurs expressions détaillées peuvent par exemple être retrouvées dans [RS80]. Elles font intervenir des dérivées secondes de la fonctionnelle énergie-densité choisie et le nombre de configurations 2-qp à calculer augmente rapidement¹. Dans de nombreux cas où des symétries sont brisées, cela empêche bien souvent d'effectuer des analyses systématiques.

5.2.3 QFAM

Afin de palier au problème discuté précédemment, une méthode permettant de linéariser δH a été proposée par Nakatsukasa[NIY07] dans ce que l'on appelle aujourd'hui la méthode des amplitudes finies (FAM). Comme indiqué précédemment, le formalisme FAM peut être étendu pour prendre en compte les corrélations d'appariement dans le cadre de la QFAM [AN11].

Fonction d'onde

Afin de dériver les équations QFAM, il est nécessaire de faire un changement de base pour retourner la base des états à une particule. Cette opération se fait simplement en utilisant les transformations de Bogoliubov

$$a_\mu(t) = \sum_k \left(U_{k\mu}^*(t) c_k + V_{k\mu}^*(t) c_k^\dagger \right) \quad (5.34)$$

Puis en utilisant Eq.(5.27)(5.28) il est possible d'écrire

$$\left(a_\mu + \eta \sum_\nu a_\nu^\dagger (X_{\nu\mu}(\omega) e^{-i\omega t} + Y_{\nu\mu}^* e^{i\omega t}) \right) e^{iE_\mu t} = \sum_k \left(U_{k\mu}^*(t) c_k + V_{k\mu}^*(t) c_k^\dagger \right) \quad (5.35)$$

En utilisant une fois de plus les transformations de Bogoliubov on obtient

$$\begin{aligned} \left(\sum_k \left(U_{k\mu}^* c_k + V_{k\mu}^* c_k^\dagger \right) + \eta \sum_\nu \sum_k \left(U_{k\nu} c_k^\dagger + V_{k\nu} c_k \right) (X_{\nu\mu}(\omega) e^{-i\omega t} + Y_{\nu\mu}^* e^{i\omega t}) \right) e^{iE_\mu t} \\ = \sum_k \left(U_{k\mu}^*(t) c_k + V_{k\mu}^*(t) c_k^\dagger \right) \end{aligned} \quad (5.36)$$

1. Le nombre d'états qp est proportionnel au carré du nombre de couches d'oscillateur N_{sh} dans le cas d'une symétrie sphérique (au cube dans le cas d'une symétrie axiale) et le nombre total d'états 2-qp croît donc comme $\sim N_{sh}^4$

Ainsi

$$U_{k\mu}(t) = U_{k\mu} e^{-iE_\mu t} + \eta e^{-iE_\mu t} \sum_{\nu} V_{k\nu}^* (X_{\nu\mu}^*(\omega) e^{i\omega t} + Y_{\nu\mu} e^{-i\omega t}) \quad (5.37)$$

$$V_{k\mu}(t) = V_{k\mu} e^{-iE_\mu t} + \eta e^{-iE_\mu t} \sum_{\nu} U_{k\nu}^* (X_{\nu\mu}^*(\omega) e^{i\omega t} + Y_{\nu\mu} e^{-i\omega t}) \quad (5.38)$$

Champ à une particule

La matrice densité est définie comme $\rho(t) = V^*(t) V^T(t)$ et peut donc être écrite comme

$$\begin{aligned} \rho(t) &= \rho_0 + \eta \left[V_{k\mu}^* \sum_{\nu} U_{k\nu}^{T*} (X_{\nu\mu}^{T*}(\omega) e^{i\omega t} + Y_{\nu\mu}^T e^{-i\omega t}) + \sum_{\nu} U_{k\nu} (X_{\nu\mu}(\omega) e^{-i\omega t} + Y_{\nu\mu}^* e^{i\omega t}) V_{k\mu}^T \right] \\ &= \rho_0 + \eta \left[V^* X^\dagger U^\dagger e^{i\omega t} + V^* Y^T U^\dagger e^{-i\omega t} + U X V^T e^{-i\omega t} + U Y^* V^T e^{i\omega t} \right] \\ \rho(t) &= \rho_0 + \eta \left[\delta\rho(\omega) e^{-i\omega t} + \delta\rho^\dagger(\omega) e^{i\omega t} \right] \end{aligned} \quad (5.39)$$

avec

$$\delta\rho(\omega) = V^* Y^T U^\dagger + U X V^T \quad (5.40)$$

À partir de ces expressions, il est alors possible d'obtenir l'Hamiltonien à un corps

$$\delta h(t) = \eta \left(\delta h(\omega) e^{-i\omega t} + \delta h^\dagger(\omega) e^{i\omega t} \right). \quad (5.41)$$

Il existe deux possibilités pour calculer $\delta h(\omega)$: numériquement ou explicitement. La différenciation numérique signifie simplement que l'on fait l'opération numérique suivante

$$\delta h = \lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{1}{\eta} [h(\rho_0 + \delta\rho) - h(\rho_0)] \quad (5.42)$$

avec η petit. En comparant les différentes études déjà disponibles, on remarque que l'influence de ce paramètre sur les résultats (Q)FAM[[NIY07](#); [INY11](#); [Sto+11](#); [AN11](#); [Lia+13](#)] reste mineur et la réponse est stable. L'inconvénient de cette méthode reste tout de même de devoir introduire un nouveau paramètre qui a potentiellement besoin d'être ajusté. Afin de palier ce problème, il est possible de procéder à une linéarisation explicite de l'hamiltonien. Dans le cas de l'interaction relativiste DD-PC1 qui sera utilisée pour les différentes études conduites ici, les détails de la linéarisation explicite peuvent être trouvés dans [[BN20](#)].

Champ d'appariement

Le tenseur d'appariement peut être calculé de façon quasi identique $\kappa(t) = V^*(t) U^T(t)$ menant à

$$\kappa(t) = \kappa_0 + \eta \left[\delta\kappa^{(+)}(\omega) e^{-i\omega t} + \delta\kappa^{(-)}(\omega) e^{i\omega t} \right] \quad (5.43)$$

avec

$$\delta\kappa^{(+)} = U X U^T + V^* Y^T V^\dagger \quad (5.44)$$

$$\delta\kappa^{(-)} = V^* X^\dagger V^\dagger + U Y U^T \quad (5.45)$$

Le champ d'appariement prend la forme suivante

$$\delta\Delta(t) = \eta [\delta\Delta^{(+)}(\omega) e^{-i\omega t} + \delta\Delta^{(-)}(\omega) e^{i\omega t}] \quad (5.46)$$

avec

$$\delta\Delta_{ab}^{(\pm)} = \frac{1}{2} \sum_{cd} \bar{v}_{abcd} \delta\kappa_{cd}^{(\pm)}(\omega) \quad (5.47)$$

où \bar{v}_{abcd} décrit la partie anti-symétrique de l'interaction d'appariement.

Equations QFAM

L'Hamiltonien perturbé étant désormais calculé en le linéarisant, les équations QFAM se résument à

$$X_{\mu\nu} = -\frac{F_{\mu\nu}^{20} + \delta H_{\mu\nu}^{20}}{E_\mu + E_\nu - \omega} \quad (5.48)$$

$$Y_{\mu\nu} = -\frac{F_{\mu\nu}^{02} + \delta H_{\mu\nu}^{02}}{E_\mu + E_\nu + \omega} \quad (5.49)$$

Ces équations sont ensuite résolues de manière itérative jusqu'à un critère de convergence défini à l'avance. Les composantes $\delta H_{\mu\nu}$ sont calculées dans la base des quasi-particules en appliquant une nouvelle fois les transformations de Bogoliubov

$$\delta H(\omega) = \mathcal{B} \begin{pmatrix} \delta h(\omega) & \delta\Delta^{(+)}(\omega) \\ -\delta\Delta^{(-)}(\omega) & \delta h^T(\omega) \end{pmatrix} \mathcal{B}^T \quad (5.50)$$

On écrit alors

$$\delta H^{20}(\omega) = U^\dagger \delta h(\omega) V^* - V^\dagger \delta h^T(\omega) U^* + U^\dagger \delta\Delta^{(+)}(\omega) U^* - V^\dagger \delta\Delta^{(-)*}(\omega) V^* \quad (5.51)$$

$$\delta H^{02}(\omega) = -V^T \delta h(\omega) U + U^T \delta h^T(\omega) V - V^T \delta\Delta^{(+)}(\omega) V + U^T \delta\Delta^{(-)*}(\omega) U \quad (5.52)$$

5.2.4 Fonction de réponse et lien avec la QRPA

Finalement, la fonction de réponse peut être écrite comme

$$\frac{dB}{d\omega}(\hat{F}, \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} S(\hat{F}, \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \text{Tr}(f^\dagger \delta\rho(\omega)) \quad (5.53)$$

avec f les éléments de matrice de l'opérateur \hat{F} . De même, la densité de transition prend la forme

$$\delta\rho_{\text{tr}}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}(\delta\rho(\mathbf{r})) \quad (5.54)$$

Cette fonction de réponse Eq.(5.53) diffère de celle que l'on obtient avec la QRPA. En effet, la QFAM ne nous permet pas d'obtenir les modes propres du système. Dans le cas de la RPA, les modes propres sont directement trouvés en diagonalisant la matrice RPA (dont ils sont états propres). Dans la FAM, l'intérêt est justement de ne pas avoir à procéder à cette opération coûteuse. Ainsi, les modes propres ne sont pas bien définis et une étape supplémentaire est nécessaire afin de les calculer. Pour comprendre comment

relier la fonction de réponse aux modes propres de QRPA, il est nécessaire de repartir des équations QRPA Eq.(5.32). On se propose ici d'adopter une formulation équivalente mais légèrement différente

$$\begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X & Y^* \\ Y & X^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X & Y^* \\ Y & X^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Omega & 0 \\ 0 & -\Omega \end{pmatrix} \quad (5.55)$$

où Ω représente une matrice diagonale avec toutes les N fréquences propres du système i.e. $\Omega = \text{diag}(\omega_1, \dots, \omega_N)$. Dans la suite on notera $\mathcal{M} = \begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix}$, $\mathcal{X} = \begin{pmatrix} X & Y^* \\ Y & X^* \end{pmatrix}$, $\mathcal{N} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ et $\mathcal{O} = \begin{pmatrix} \Omega & 0 \\ 0 & -\Omega \end{pmatrix}$. L'équation Eq.(5.55) se réécrit simplement comme

$$\mathcal{M}\mathcal{X} = \mathcal{N}\mathcal{X}\mathcal{O} \quad (5.56)$$

En introduisant le champ extérieur F on obtient alors les solutions QFAM

$$\begin{pmatrix} X(\omega_\gamma) \\ Y(\omega_\gamma) \end{pmatrix} = -R(\omega_\gamma) \begin{pmatrix} F^{20} \\ F^{02} \end{pmatrix} \quad (5.57)$$

où R est appelée fonction de réponse et peut s'écrire sous la forme

$$R(\omega_\gamma) = \mathcal{X}(\mathcal{O} - \omega_\gamma \mathcal{I})^{-1} \mathcal{N}\mathcal{X}^\dagger \quad (5.58)$$

Cette relation peut être retrouvée facilement en écrivant

$$\begin{aligned} \mathcal{M}\mathcal{X} &= \mathcal{N}\mathcal{X}\mathcal{O} \\ \Leftrightarrow \mathcal{M}\mathcal{X} &= \mathcal{N}\mathcal{X}\mathcal{O} - \omega_\gamma \mathcal{N}\mathcal{X} + \omega_\gamma \mathcal{N}\mathcal{X} \\ \Leftrightarrow \mathcal{M}\mathcal{X} &= \mathcal{N}\mathcal{X}(\mathcal{O} - \omega_\gamma \mathcal{I}) + \omega_\gamma \mathcal{N}\mathcal{X} \\ \Leftrightarrow (\mathcal{M} - \omega_\gamma \mathcal{N})\mathcal{X} &= \mathcal{N}\mathcal{X}(\mathcal{O} - \omega_\gamma \mathcal{I}) \\ \Leftrightarrow \mathcal{X}(\mathcal{O} - \omega_\gamma \mathcal{I})^{-1} &= (\mathcal{M} - \omega_\gamma \mathcal{N})^{-1} \mathcal{N}\mathcal{X} \\ \Leftrightarrow \mathcal{X}(\mathcal{O} - \omega_\gamma \mathcal{I})^{-1} \mathcal{N}\mathcal{X} &= (\mathcal{M} - \omega_\gamma \mathcal{N})^{-1} \end{aligned} \quad (5.59)$$

où a été utilisée la condition d'orthonormalisation

$$\mathcal{X}\mathcal{N}\mathcal{X}^\dagger = \mathcal{N} \quad (5.60)$$

Il est possible de détailler l'expression Eq.(5.58)

$$R_{\mu\nu\mu'\nu'}(\omega_\gamma) = \sum_i \left(\begin{array}{cc} \frac{X_{\mu\nu}^i X_{\mu'\nu'}^{i*}}{\Omega_i - \omega_\gamma} + \frac{Y_{\mu\nu}^i Y_{\mu'\nu'}^{i*}}{\Omega_i + \omega_\gamma} & \frac{X_{\mu\nu}^i Y_{\mu'\nu'}^{i*}}{\Omega_i - \omega_\gamma} + \frac{Y_{\mu\nu}^{i*} X_{\mu'\nu'}^i}{\Omega_i + \omega_\gamma} \\ \frac{Y_{\mu\nu}^i X_{\mu'\nu'}^{i*}}{\Omega_i - \omega_\gamma} + \frac{X_{\mu\nu}^{i*} Y_{\mu'\nu'}^i}{\Omega_i + \omega_\gamma} & \frac{Y_{\mu\nu}^i Y_{\mu'\nu'}^{i*}}{\Omega_i - \omega_\gamma} + \frac{Y_{\mu\nu}^{i*} Y_{\mu'\nu'}^i}{\Omega_i + \omega_\gamma} \end{array} \right) \quad (5.61)$$

En réinsérant ce résultat dans Eq.(5.57) il est possible d'écrire

$$\begin{aligned} X_{\mu\nu}(\omega_\gamma) &= - \sum_i \left\{ \sum_{\mu',\nu'} \left[\frac{X_{\mu\nu}^i X_{\mu'\nu'}^{i*}}{\Omega_i - \omega_\gamma} + \frac{Y_{\mu\nu}^i Y_{\mu'\nu'}^{i*}}{\Omega_i + \omega_\gamma} \right] F_{\mu'\nu'}^{20} + \sum_{\mu',\nu'} \left[\frac{X_{\mu\nu}^i Y_{\mu'\nu'}^{i*}}{\Omega_i - \omega_\gamma} + \frac{Y_{\mu\nu}^{i*} X_{\mu'\nu'}^i}{\Omega_i + \omega_\gamma} \right] F_{\mu'\nu'}^{02} \right\} \\ X_{\mu\nu}(\omega_\gamma) &= - \sum_i \left[\frac{X_{\mu\nu}^i \langle i | \hat{F} | 0 \rangle}{\Omega_i - \omega_\gamma} + \frac{Y_{\mu\nu}^{i*} \langle 0 | \hat{F} | i \rangle}{\Omega_i + \omega_\gamma} \right] \end{aligned} \quad (5.62)$$

où sont définies les probabilités de transitions

$$\langle i | \hat{F} | 0 \rangle = \sum_{\mu < \nu} (X_{\mu\nu}^{i*} F_{\mu\nu}^{20} + Y_{\mu\nu}^{i*} F_{\mu\nu}^{02}) \quad (5.63)$$

$$\langle 0 | \hat{F} | i \rangle = \sum_{\mu < \nu} (X_{\mu\nu}^i F_{\mu\nu}^{20} + Y_{\mu\nu}^i F_{\mu\nu}^{02}) \quad (5.64)$$

De la même façon pour Y ,

$$Y_{\mu\nu}(\omega_\gamma) = - \sum_i \left\{ \frac{Y_{\mu\nu}^i \langle i | \hat{F} | 0 \rangle}{\Omega_i - \omega_\gamma} + \frac{X_{\mu\nu}^{i*} \langle 0 | \hat{F} | i \rangle}{\Omega_i + \omega_\gamma} \right\} \quad (5.65)$$

La dernière étape consiste à réécrire la fonction de réponse en fonction du champ extérieur \hat{F} et des X, Y . Pour cela on utilise les résultats Eqs.(5.40-5.24) pour pouvoir écrire la fonction de réponse Eq.(5.53) comme

$$S(\hat{F}, \omega) = \frac{1}{2} \sum_{\mu, \nu} [F_{\mu\nu}^{20*} X_{\mu\nu} + F_{\mu\nu}^{02*} Y_{\mu\nu}] \quad (5.66)$$

En réinjectant ces résultats dans Eq.(5.66) il est alors possible d'écrire :

$$\begin{aligned} S(\hat{F}, \omega_\gamma) &= - \sum_{\mu < \nu} [F_{\mu\nu}^{20*} X_{\mu\nu} + F_{\mu\nu}^{02*} Y_{\mu\nu}] \\ &= - \sum_{\mu < \nu} \sum_i \left[F_{\mu\nu}^{20*} \left\{ \frac{X_{\mu\nu}^i \langle i | \hat{F} | 0 \rangle}{\Omega_i - \omega_\gamma} + \frac{Y_{\mu\nu}^{i*} \langle 0 | \hat{F} | i \rangle}{\Omega_i + \omega_\gamma} \right\} + F_{\mu\nu}^{02*} \left\{ \frac{Y_{\mu\nu}^i \langle i | \hat{F} | 0 \rangle}{\Omega_i - \omega_\gamma} + \frac{X_{\mu\nu}^{i*} \langle 0 | \hat{F} | i \rangle}{\Omega_i + \omega_\gamma} \right\} \right] \\ &= - \sum_i \left[\langle i | \hat{F} | 0 \rangle \sum_{\mu < \nu} \left(\frac{F_{\mu\nu}^{20*} X_{\mu\nu}^i}{\Omega_i - \omega_\gamma} + \frac{F_{\mu\nu}^{02*} Y_{\mu\nu}^i}{\Omega_i + \omega_\gamma} \right) + \langle 0 | \hat{F} | i \rangle \sum_{\mu < \nu} \left(\frac{F_{\mu\nu}^{02*} Y_{\mu\nu}^{i*}}{\Omega_i + \omega_\gamma} + \frac{F_{\mu\nu}^{20*} X_{\mu\nu}^{i*}}{\Omega_i - \omega_\gamma} \right) \right] \\ S(\hat{F}, \omega_\gamma) &= - \sum_i \left[\frac{|\langle i | \hat{F} | 0 \rangle|^2}{\Omega_i - \omega_\gamma} + \frac{|\langle i | \hat{F} | 0 \rangle|^2}{\Omega_i + \omega_\gamma} \right] \end{aligned} \quad (5.67)$$

Nous verrons dans les sections suivantes comment calculer directement les modes propres QRPA avec les résultats des fonctions de réponses QFAM.

5.2.5 Aspects numériques

Schéma de résolution des équations QFAM

Les équations QFAM présentées précédemment sont résolues de façon itérative en utilisant comme fonction d'onde d'entrée, le résultat d'un calcul RHB. Les étapes de résolution pour une certaine valeur de fréquence ω sont alors les suivantes :

1. initialisation : les X et Y sont initialisés à zéro
2. $\delta\rho$ et $\delta\kappa$ sont calculés à partir des X et Y et des éléments de la matrice de Bogoliubov (voir Eq.(5.40), Eq.(5.44) et Eq.(5.45))
3. les potentiels induits sont calculés

4. les champs induits δh et $\delta\kappa$ sont alors calculés à partir des potentiels induits
5. une procédure de mélange Broyden est utilisé ici pour améliorer la convergence et un critère de convergence est défini [Bar+08]
 - (a) si la convergence n'est pas atteinte, les nouveaux X et Y sont calculés à partir de Eq.(5.30) et Eq.(5.31) puis on retourne à l'étape 2
 - (b) si la convergence est atteinte, l'itération pour cette valeur de ω prend fin.

La fonction de réponse totale est obtenue en répétant ces étapes pour chaque ω . Le critère de convergence défini à l'étape 5 se fait directement sur les éléments des champs induits δh et $\delta\kappa$. Le mélange de configuration de Broyden se fait de la même façon sur les δh et $\delta\kappa$.

Stabilité de la réponse avec le nombre de couches d'oscillateurs

Il est important d'étudier la stabilité de la fonction de réponse avec le nombre de couches d'oscillateurs N_{sh} utilisées. En particulier pour les applications présentées dans cette thèse, la fonction de réponse à basse énergie (≤ 10 MeV) sera importante.

Les résultats dans le cas de la réponse ISM du ^{20}Ne sont présentés sur la Fig.5.2. On remarque que la partie basse en énergie reste très stable avec le nombre de couches, alors que la résonance géante présente à plus haute énergie présente des fluctuations non négligeables. Cependant, bien que les détails de la réponse soient modifiés, la position des centroïdes ne l'est pas et reste stable avec N_{sh} . Dans les études présentées dans les sections suivantes, nous nous intéressons particulièrement à la réponse de basse énergie qui n'est que très peu influencée par le nombre de couches.

5.3 Modes propres avec la FAM

Dans la section précédente a été montrée le lien entre la fonction de réponse obtenue dans la QFAM avec les probabilités de transition QRPA $\langle i | \hat{F} | 0 \rangle$ et $\langle 0 | \hat{F} | i \rangle$. Étant donné que la QFAM nous donne un moyen peu coûteux numériquement de calculer la fonction de réponse S en linéarisant les perturbations, on peut se demander s'il serait possible de retrouver les modes propres de la QRPA, et pour quel coût numérique.

Le point de départ pour ces dérivations se trouve dans l'équation Eq.(5.67). Dans le cas de calculs QFAM effectués sur des états proches² de l'état fondamental, toutes les fréquences propres Ω_i sont réelles. Cependant, dans le cas d'état loin du fondamental (avec une contrainte de déformation importante par exemple), ces fréquences peuvent devenir purement imaginaires. Ce cas de figure sera discuté plus en détail dans le chapitre traitant de la radioactivité dans le calcul des masses inertielles (Sec.6.3). L'implémentation des modes propres a été effectué dans le cadre de cette thèse dans un code cQFAM axial [BN20].

2. Dans le sens que l'on ne s'écarte pas trop de l'approximation harmonique.

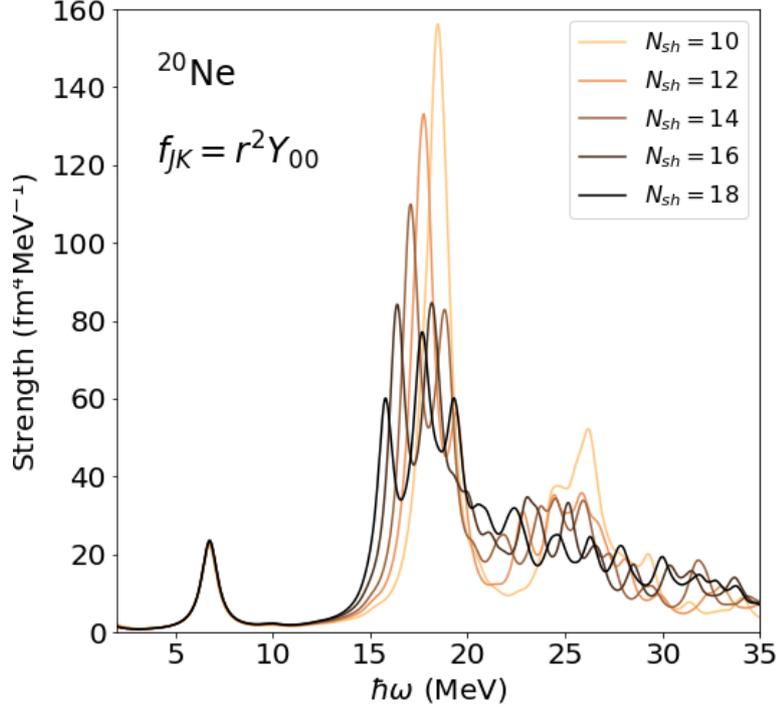


FIGURE 5.2 – Comparaison des réponses isoscalaires monopolaires dans le ^{20}Ne pour différent nombre de couches d’oscillateurs N_{sh} . Figure tirée de [Mer+21].

5.3.1 Obtenir les probabilités de transition

La structure de Eq.(5.67) nous permet d’écrire

$$S(\hat{F}, \omega) = - \sum_i \frac{|\langle i | \hat{F} | 0 \rangle|^2}{\Omega_i^2 - \omega_\gamma^2} \quad (5.68)$$

Il est alors possible d’utiliser le théorème de Cauchy pour écrire cette somme comme une intégrale dans le plan complexe

$$\oint_C S(\hat{F}, \omega_\gamma) d\omega_\gamma = 2\pi i \sum_{\Omega \in C} \text{Res}(S) \quad (5.69)$$

où $\text{Res}(S)$ correspond au résidu de la fonction de réponse. Supposons maintenant que le contour C n’encercle qu’un seul et unique pole Ω_i , alors

$$\oint_{C_i} S(\hat{F}, \omega_\gamma) d\omega_\gamma = 2\pi i \text{Res}_{\Omega_i}(S) = 2\pi i |\langle i | \hat{F} | 0 \rangle|^2 \quad (5.70)$$

On en conclut donc que

$$|\langle i | \hat{F} | 0 \rangle|^2 = \frac{1}{2\pi i} \oint_{C_i} S(\hat{F}, \omega_\gamma) d\omega_\gamma \quad (5.71)$$

Ainsi, il est possible de calculer l'ensemble des probabilités de transition entre le fondamental $|0\rangle$ et une excitation 2qp $|i\rangle$ en connaissant la position de tous les pôles de la fonction de réponse et en intégrant autour de ces pôles. Nous reviendrons sur la recherche des pôles dans les paragraphes suivants.

5.3.2 Obtenir les amplitudes propres

De la même façon, il est possible d'écrire

$$\oint_{C_i} X_{\mu\nu}(\omega_\gamma) d\omega_\gamma = 2\pi i \text{Res}_{\Omega_i}(X_{\mu\nu}) = 2\pi i X_{\mu\nu}^i \langle i | \hat{F} | 0 \rangle \quad (5.72)$$

où on a utilisé les résultats de (5.62). On en déduit donc

$$X_{\mu\nu}^i = \frac{1}{2\pi i} \frac{e^{i\theta}}{\langle i | \hat{F} | 0 \rangle} \oint_{C_i} X_{\mu\nu}(\omega_\gamma) d\omega_\gamma \quad (5.73)$$

$$Y_{\mu\nu}^i = \frac{1}{2\pi i} \frac{e^{i\theta}}{\langle i | \hat{F} | 0 \rangle} \oint_{C_i} Y_{\mu\nu}(\omega_\gamma) d\omega_\gamma \quad (5.74)$$

où une phase θ correspond au fait que seul le module des probabilités peut être calculé (cf. Eq.(5.71)). Cette phase ne peut pas être déterminée mais elle ne possède pas de sens physique étant donné que les contributions (les amplitudes) à la réponse totale sont fonctions de $|X|^2 - |Y|^2$ par exemple.

5.3.3 Obtenir tous les pôles de la fonction de réponse

Nous venons de voir qu'il était possible d'obtenir les probabilités de transition ainsi que les modes propres en intégrant sur tous les pôles de la fonction de réponse. Cependant, la tâche consistant à trouver tous les pôles n'est pas triviale. En effet, les pics dans la fonction de réponse nous donnent des informations importantes mais ne nous permettent pas de déterminer la position des modes propres avec certitude pour deux raisons :

- seule la partie imaginaire de la fonction de réponse est utilisée (voir Eq.(5.53))
- il est possible que deux pôles se trouvent à des énergies très proches et qu'ils ne soient pas résolus avec le pas $d\omega$ utilisé lors du calcul de la fonction de réponse

Le premier de ces problèmes entraîne généralement un décalage très faible dans la valeur exacte du pôle. Le second point en revanche est très important et il nous faut trouver un critère afin de déterminer avec précision si notre contour va encercler un seul et unique pôle.

Pour ce faire, nous utilisons le résultat précédent Eq.(5.71) réécrit ici par convenance

$$\left| \langle i | \hat{F} | 0 \rangle \right|^2 = \frac{1}{2\pi i} \oint_{C_i} S(\hat{F}, \omega_\gamma) d\omega_\gamma \quad (5.75)$$

Il est facile de montrer que $\oint_C z f(z) dz = 2\pi i z \text{Res}_C(f)$ et donc ici en particulier les moments (sur un contour particulier C) se calculent comme

$$m_k(C) = \oint_{C_i} \omega_\gamma^k S(\hat{F}, \omega_\gamma) d\omega_\gamma = 2\pi i \sum_{\Omega_i \in C} \Omega_i^k \left| \langle i | \hat{F} | 0 \rangle \right|^2 \quad (5.76)$$

Ainsi, dans le cas où un contour ne contient qu'un seul et unique pôle

$$\frac{m_{k+1}(C_i)}{m_k(C_i)} = \Omega_i, \quad (5.77)$$

qui est donc indépendant de k . En revanche, dans le cas où il contiendrait plusieurs pôles,

$$\frac{m_{k+1}(C)}{m_k(C)} = \frac{\sum_{\Omega_i \in C} \Omega_i^{k+1} \left| \langle i | \hat{F} | 0 \rangle \right|^2}{\sum_{\Omega_i \in C} \Omega_i^k \left| \langle i | \hat{F} | 0 \rangle \right|^2}, \quad (5.78)$$

ratio qui est cette fois dépendant de k . Il est alors possible d'utiliser un critère simple pour savoir si un ou plusieurs pôles sont présents dans un contour C :

- $\frac{m_{k+1}}{m_k} = \frac{m_{k'+1}}{m_{k'}}$ avec $k' \neq k$: alors les $\frac{m_{k+1}}{m_k}$ sont indépendants de k et un seul pôle est présent
- $\frac{m_{k+1}}{m_k} \neq \frac{m_{k'+1}}{m_{k'}}$ avec $k' \neq k$: alors les $\frac{m_{k+1}}{m_k}$ dépendent de k et plusieurs pôles sont encerclés.

5.3.4 Procédure numérique

Nous venons de voir comment il était possible d'obtenir les modes propres de la QRPA via la QFAM. Cette méthode, bien qu'extrêmement pratique, reste cependant coûteuse numériquement. En effet, en notant ω_{max} la fréquence la plus haute sondée, $d\omega$ le pas en fréquence, plusieurs étapes sont nécessaires :

1. identifier grossièrement les pôles en calculant la réponse sur une large plage de fréquences avec un pas relativement faible dont le coût numérique est de l'ordre de $N_1 \sim \frac{\omega_{max}}{d\omega}$
2. calculer l'intégrale de contour et vérifier qu'un seul pôle est présent
 - (a) si oui, calculer les modes propres
 - (b) si non, prendre des contours plus petits et reprendre l'étape 2

Cette étape, bien plus gourmande en temps de calcul, peut être estimée à $N_2 \sim N_{2qp} \times N_C$ avec $N_{2qp} \sim N_{sh}^2$ et N_C représente le nombre de points nécessaires pour chaque contour, généralement de l'ordre de la dizaine.

La première étape n'est généralement pas la plus coûteuse, sauf si l'on souhaite identifier directement tous les pôles (mais nous verrons que cette méthode est loin d'être optimale). Elle est généralement de l'ordre de 10^2 calculs. La seconde étape en revanche est directement proportionnelle au nombre de pôles présents (principalement à basse énergie). Avec une taille de base comprise entre 10 et 14, le nombre de calculs peut rapidement atteindre des milliers, voire dizaines de milliers de calculs. L'avantage, par rapport à une méthode QRPA usuelle, reste que ces calculs sont très facilement parallélisables.

La procédure décrite précédemment peut cependant être optimisée de plusieurs façons :

- en modifiant le contour d'intégration
- en optimisant le nombre de points pour chaque contour (possiblement en réutilisant d'anciens points)

- en analysant les données finales nécessaires (est-il nécessaire d’avoir une fonction de réponse complète (comme dans le présent chapitre) où seuls les pôles nous intéressent (voir Chap.6.3)?)

On se propose donc de discuter ces points dans les paragraphes suivants. Le dernier point ne sera cependant utile que dans le chapitre suivant Chap.6.

Choix du contour d’intégration

Le choix du contour d’intégration est une tâche importante afin de minimiser le nombre de calculs nécessaires tout en maximisant la précision numérique. Nous considérons ici deux contours simples : circulaire et rectangulaire. Nous verrons dans la suite que le contour rectangulaire peut s’avérer particulièrement utile lors de la recherche des pôles. Un second point important est celui de la précision numérique et concerne donc l’algorithme d’intégration utilisé. Nous considérons ici deux méthodes, celle de Simpson et celle des trapèzes.

Contour circulaire

Un contour circulaire sera paramétré très simplement par la transformation $\omega_\gamma = re^{i\theta} + \Omega$ avec r le rayon du cercle, θ l’angle paramétrisant la rotation et Ω la position du pôle. Les relations trigonométriques usuelles donnent $\omega = r\cos(\theta)$ et $\gamma = r\sin(\theta)$. Il est alors possible d’écrire

$$\oint_C S(\omega_\gamma) d\omega_\gamma = ir \int_0^{2\pi} S(\theta) e^{i\theta} d\theta \quad (5.79)$$

Les points ω_γ doivent donc être choisis le long d’un cercle de rayon r . Ce rayon peut être déterminé soit en le prenant constant, soit en le prenant comme étant égal à la moitié de la distance au pôle suivant (dans le cas où l’on connaît la position des pôles). La première méthode est plus simple mais la seconde permet de vérifier que tous les pôles ont bien été trouvés auparavant. Il est intéressant de remarquer ici que les propriétés de la fonction de réponse étudiée dans la sous-section précédente permettent de réduire le nombre de calculs nécessaires. Dans le cas d’un pôle réel, un des rayons du cercle est confondu avec une portion de l’axe réel ce qui permet de diviser par deux le nombre de points nécessaires en utilisant $\text{Im}(S(\omega, -\gamma)) = -\text{Im}(S(\omega, \gamma))$ et $\text{Re}(S(\omega, -\gamma)) = \text{Re}(S(\omega, \gamma))$.

Les résultats de convergence numérique sont donnés sur la Fig.5.3 pour une fonction test $f(z) = 1/(z - \omega)$ qui mime la forme des fonctions de réponses attendues. Le résidu de cette fonction étant 1 lorsque le pôle en ω est compris dans le contour, le résultat attendu est $\oint_C f(z) dz = 2\pi i$. Le contour choisi est circulaire de rayon $r = 1$ (courbe bleue sur Fig.5.3). La valeur du rayon n’impacte que peu la valeur du résultat de l’intégrale à partir du moment où le rayon n’est pas trop grand (les résultats sont stables à partir de $r \sim 1$ MeV). Les pôles étant généralement espacés de quelques centaines de keV au plus, la valeur du rayon ne sera pas un problème. Il est remarquable de voir qu’ici, même avec un faible nombre de points, le calcul converge avec une précision à 10^{-3} pour $N = 10$ dans le cas du contour circulaire.

Dans le cas du ratio des moments (à droite sur Fig.5.3) qui permet d'obtenir la position précise du pôle ω , la précision est de l'ordre de 10^{-2} pour $N = 10$. On remarque aussi que le ratio m_1/m_0 est plus précis que le ratio m_2/m_1 . C'est une propriété qui reste vraie pour les moments d'ordres plus élevés. Dans la suite, on privilégiera donc le ratio m_1/m_0 .

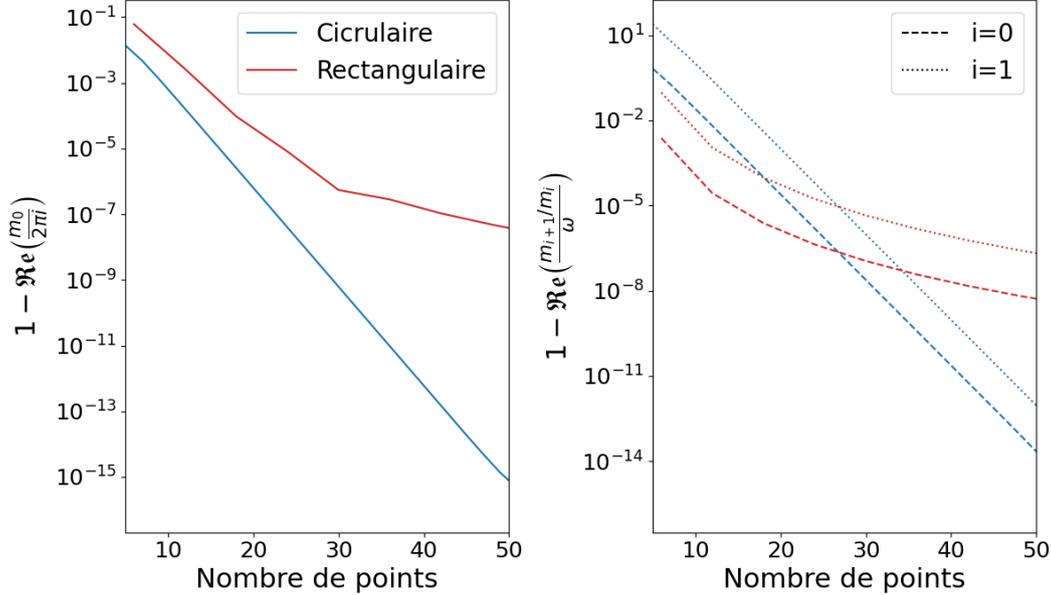


FIGURE 5.3 – Résultats de l'intégration numérique sur des contours circulaire et rectangulaire pour une fonction test $f(z) = \frac{1}{z-\omega}$ où ω représente le pôle à trouver. L'écart à la valeur attendue pour l'intégrale est présenté à gauche. L'écart à la valeur attendue pour le ratio des moments est présentée à droite. Les résultats sont présentés ici pour un rayon $r = 1$ et un pôle $\omega = 1$.

Il a été vérifié que les parties imaginaires des différentes quantités présentées sur les graphes Fig.5.3) convergent vers 0 avec une très grande précision (généralement de l'ordre de 10^{-14} ou moins).

Contour rectangulaire

Le contour rectangulaire est paramétré par morceaux autour d'un pôle Ω comme

$$\oint_C f(\omega_\gamma) d\omega_\gamma = i \int_{-L/2}^{L/2} f(\Omega - l/2, \gamma) d\gamma + \int_{\Omega-l/2}^{\Omega+l/2} f(\omega, L/2) d\omega \quad (5.80)$$

$$+ i \int_{L/2}^{-L/2} f(\Omega + l/2, \gamma) d\gamma + \int_{\Omega+l/2}^{\Omega-l/2} f(\omega, -L/2) d\omega \quad (5.81)$$

avec l et L la longueur (axe réel) et largeur (axe imaginaire) du rectangle choisi. Comme précédemment, ces paramètres doivent être choisis pour n'encercler qu'un seul pôle. De même, les propriétés de la fonction de réponse permettent de diviser par deux le nombre de calculs nécessaires.

Les propriétés de convergence sont données dans la Fig.5.3, en rouge. On remarque cette fois-ci qu'un contour rectangulaire donne une précision moins bonne à un nombre de points fixés. Pour $N = 10$ points, nous obtenons une précision de l'ordre de 10^{-2} contre 10^{-3} pour un contour circulaire.

Il est intéressant de remarquer que, concernant la recherche des pôles, le ratio des moments (à droite sur Fig.5.3) est plus précis dans le cas d'un contour rectangulaire par rapport à un contour circulaire pour des faibles valeurs de nombre de points avec une précision de 10^{-3} pour $N = 10$ points (contre 10^{-2} pour le contour circulaire). De la même façon que pour le contour circulaire, les ratios de moments faibles semblent donner une meilleure précision.

Recherche optimisée des pôles

Dans le cas où seule la position exacte des pôles est nécessaire, une méthode particulièrement efficace ici qui permet d'accélérer considérablement les calculs est de ne pas calculer la fonction de réponse sur toutes les fréquences (i.e. de ne pas faire le premier balayage) mais de procéder par dichotomie. Dans cette section, cette méthode n'est pas particulièrement utile, car nous souhaitons nous intéresser à la structure de la fonction de réponse en entier. En revanche, certains problèmes nécessitent de ne trouver que les pôles comme il sera question dans le chapitre suivant. La méthode par dichotomie peut se résumer comme suit :

1. Initialisation : on choisit 2^n fréquences uniformément espacées entre $\omega = 0$ et $\omega = \omega_{max}$
2. pour chaque fréquence, on choisit un contour de rayon $\omega_{i+1} - \omega_i$ pour scanner les pôles
3. pour chaque contour, les premiers moments sont calculés. Deux cas peuvent se présenter pour chaque contour :
 - (a) un seul pôle est présent (le ratio des moments est constant) : on s'arrête pour cette portion de fréquences
 - (b) plusieurs pôles sont présents : on divise l'espace en deux (i.e. une nouvelle fréquence à calculer est ajoutée)
4. si des fréquences ont été ajoutées, on retourne à l'étape 2

En procédant de cette manière, tous les pôles jusqu'à ω_{max} sont identifiés facilement avec une convergence très rapide. Cette méthode est graphiquement illustrée sur la Fig.5.4. Cette figure peut être décrit en 4 étapes :

1. lors de la première étape (en haut à gauche), un contour très large est choisi. Le critère sur les ratios des moments nous permet de conclure à la présence de plusieurs pôles, sans pour autant nous donner un nombre exact.
2. La deuxième étape (en haut à droite) revient à diviser l'espace de l'étape 1 en deux. L'espace de droite possède un unique pôle (contour vert), alors que l'espace de gauche en possède plusieurs.
3. Lors de la troisième étape (en bas à gauche), seul l'espace à gauche est subdivisé puisque tous les pôles ont été trouvés à droite. Nous voyons alors qu'un contour ne possède aucun pôle (en rouge) alors que l'autre en possède plusieurs.

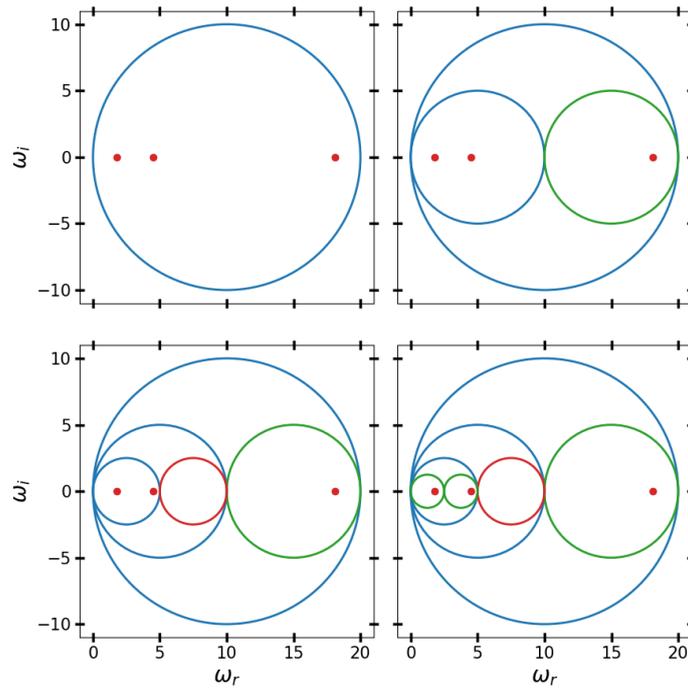


FIGURE 5.4 – Illustration de la procédure de recherche de pôles par dichotomie. Les étapes se déroulent de gauche à droite puis de haut en bas. Les points rouges représentent les pôles à trouver par l’algorithme. Les cercles représentent les contours calculés et leur couleur dépend du nombre de pôles présents à l’intérieur : plusieurs pôles (bleu), un pôle (vert) et aucun pôle (rouge).

4. Finalement, une dernière étape est nécessaire pour finir de trouver les deux derniers pôles suivants.

Il est facile de voir sur cette figure que le nombre d’itérations nécessaires reste faible aux vues de la convergence rapide des méthodes par dichotomie en $1/2^n$.

Cependant, cette méthode d’intégration sur des contours circulaires ne permet d’exploiter au maximum l’ensemble des calculs précédents. En effet, à chaque itération, des cercles plus petits sont calculés et quasiment aucun point précédent ne peut être réutilisé. En revanche, dans le choix de contours rectangulaires, un grand nombre de points peuvent être réutilisés à chaque itération. En effet, comme indiqué sur la Fig.5.5, seuls les points aux coins des rectangles ne peuvent pas être réutilisés.

Supposons que chaque rectangle soit composé de N_l points sur chaque côté i.e. $4(N_l - 1)$ points au total. Ainsi, deux rectangles adjacents partagent donc N_l points en communs, soit $\sim 25\%$ des points. De plus, à chaque nouvelle itération, les points situés sur les côtés parallèles à l’axe ω ne vont pas être recalculés. Ainsi, il est possible de montrer que le nombre de calculs nécessaires à chaque itération est de l’ordre de $2N_l$ dans le cas où chaque sous rectangle possède encore plusieurs pôles. Cela représente environ 50% de calculs en moins au début des itérations, puis le nombre de calculs nécessaires diminue de façon encore plus radicale. On voit alors très rapidement que l’approche par dichotomie de rectangles permet de grandement diminuer le nombre de calculs nécessaires de deux voire trois ordres de grandeurs. Dans la plupart des appli-

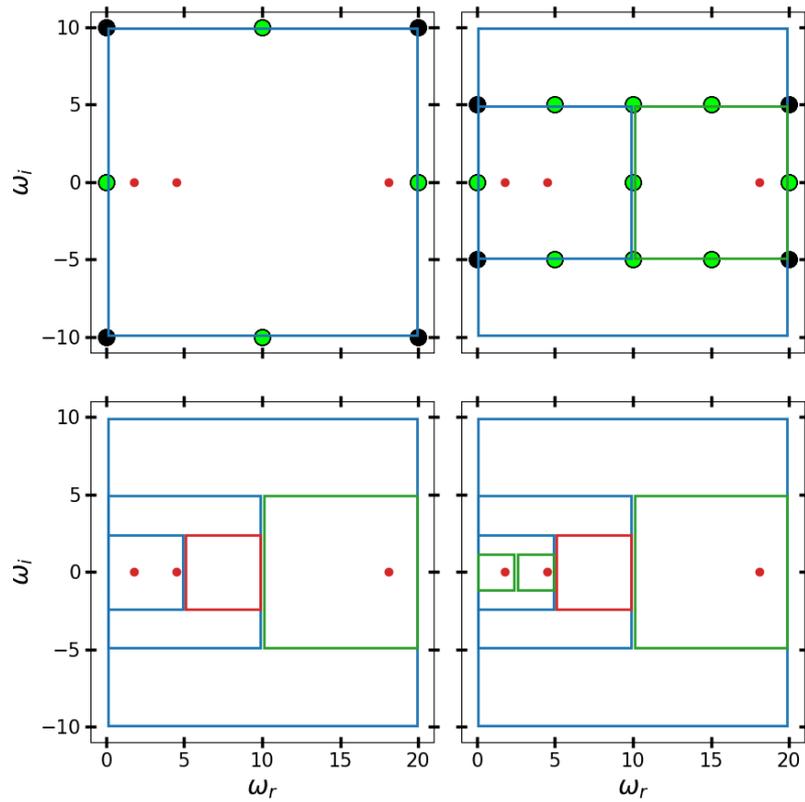


FIGURE 5.5 – Identique à Fig.5.4. Sont indiqués en plus sur les deux premières étapes (haut gauche et haut droite), les points utilisés pour le calcul du contour. Les points en noir sur ces deux figures représentent les points qui ne pourront être utiles qu'une seule fois. Ceux en vert représentent ceux qui pourront être utilisés plusieurs fois.

cations présentées dans le chapitre Chap.6, cette méthode a donc été privilégiée.

5.4 Excitations cluster

Les méthodes QRPA et QFAM ont été présentées dans les sections précédentes et nous proposons ici de les appliquer pour étudier différentes excitations de basses énergies. Cette étude est motivée par des résultats expérimentaux montrant qu'une augmentation significative de la fonction de réponse monopolaire à des énergies inférieures à celle de la résonance géante dans des noyaux légers est observée [YLC97; YLC98; LCY01; YLC02; Yil+06; Van+14; Gup+15]. Ces résonances ont, pour certaines, été reliées à des modes dits de cluster décrits dans des approches de modèle cluster [TA78; Ueg+79; Kam81; DB87; SH89; Che+07; Ito11; Del+12; KS19] aussi bien qu'avec des modèles de dynamique moléculaire anti-symétrisé (AMD) couplées à de la GCM [Kim04; CK15; CKT16; Kan16; KO20].

5.4.1 Exemple du ^{20}Ne

Nous entamons notre analyse avec le cas particulier du ^{20}Ne qui exhibe une forme prolata au niveau champ moyen ($\beta_2 \sim 0.5$) dans son état fondamental. La densité et la fonction de localisation³ sont tracées sur la Fig.5.6. La densité présente des structures en cluster aux extrémités de l'axe de symétrie avec un pic de densité à $\rho_{max} \approx 0.2 \text{ fm}^{-3}$. Le cœur possède une déformation oblate rappelant la structure $\alpha - ^{12}\text{C} - \alpha$. La fonction de localisation permet de comprendre que ces surdensités peuvent être interprétées comme des α bien localisés.

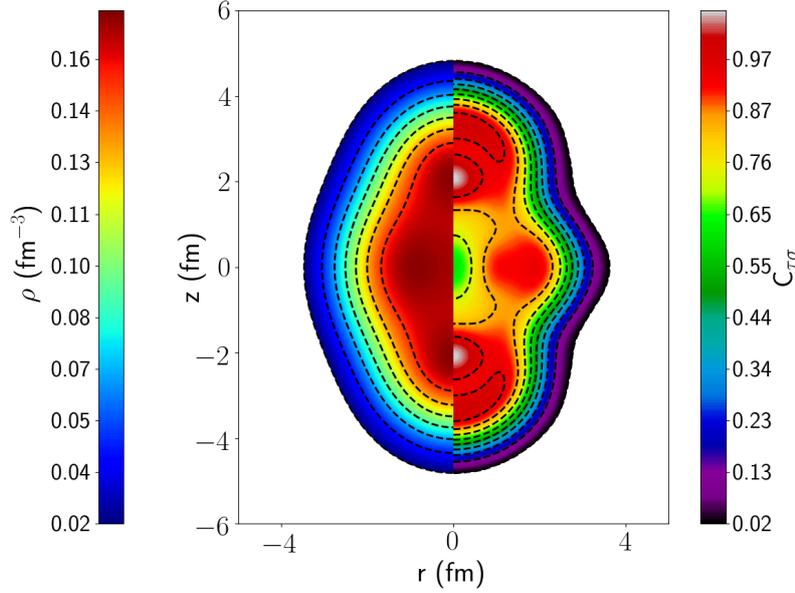


FIGURE 5.6 – Densité à l'équilibre du ^{20}Ne (à gauche) et fonction de localisation $C_{\tau\sigma}$ (à droite) obtenues dans un modèle RHB avec la fonctionnelle DD-PC1.

Les fonctions de réponses isoscalaires du ^{20}Ne sont tracées sur la Fig.5.7 pour les opérateurs isoscalaire monopolaire, dipolaire, quadrupolaire et octupolaire. En plus des composantes $K = 0$, pour les multipôles $\lambda = 1, 2, 3$, les projections $K > 0$ sont également tracées, ainsi que les réponses totales. Concernant la réponse quadrupolaire $K^\pi = 1^+$, on remarque l'apparition de l'état spurieux lié à la brisure de la symétrie rotationnelle. Bien que toutes les fonctions de réponses présentent une fragmentation prononcée dans la région $E \geq 10 \text{ MeV}$, une partie importante de la réponse est située à $E \approx 7 \text{ MeV}$. Comme montré dans les sections précédentes (Sec.5.2.5), il a été vérifié que pour tous les multipôles, ces pics de basse énergie sont stables par rapport au nombre de couches d'oscillateur harmonique utilisées.

Afin d'obtenir plus d'informations sur la nature de ces résonances basses énergies, il est pertinent d'utiliser la densité dépendante du temps $\rho(\mathbf{r}, t)$ définie comme

$$\rho(r_\perp, z, t) = \rho_{gs}(r_\perp, z) + 2\eta \text{Im} [e^{-i\omega t} \delta\rho(\omega, r_\perp, z)] \cos(K\phi), \quad (5.82)$$

3. La fonction de localisation a ici été renormalisée (voir par exemple [ZSN16]) comme $C \rightarrow C \times \frac{\rho}{\max(\rho)}$.

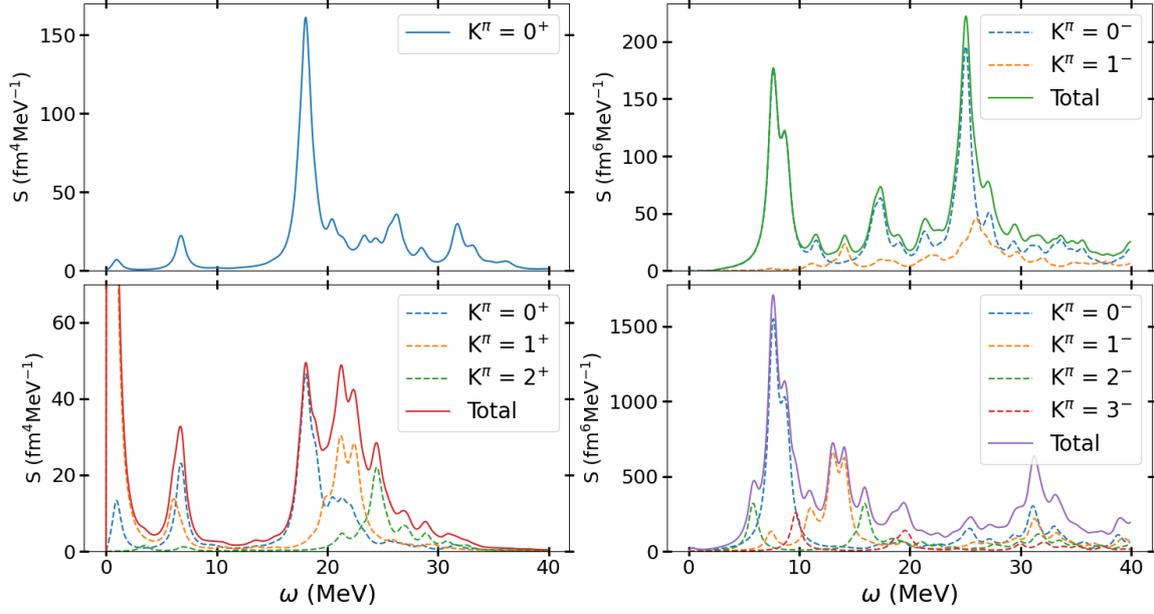


FIGURE 5.7 – Fonctions de réponses isoscalaires pour le ^{20}Ne pour les différentes multipolarités $J = 0, 1, 2, 3$. Les projections K sont présentées pour chaque multipolarité en pointillés. La réponse totale à un J fixé est présentée en traits pleins.

où $\rho_{gs}(r_{\perp}, z)$ représente la densité de l'état fondamental et $\delta\rho(\omega, r_{\perp}, z)$ la densité de transition à une énergie d'excitation ω donnée. Le facteur η correspond à un petit paramètre utilisé pour la linéarisation des équations QRPA (i.e. la magnitude du champ extérieur utilisé dans Eq.(5.23)). La définition de cette densité dépendante du temps se déduit à partir de la relation entre la fonction de réponse et la densité de transition Eq.(5.53). La Fig.5.8 montre l'évolution de cette densité dans le ^{20}Ne dans le cas d'une excitation monopolaire à une énergie d'excitation de $\hbar\omega = 6.75\text{MeV}$. On constate que les clusters présents à $t = 0$ s'éloignent tout d'abord du centre avant de se déplacer à nouveau vers le centre cette fois où ils sont dilués dans le cœur avant d'être reformés en cluster.

La fonction de localisation (introduite dans le cas statique dans le chapitre 3 mais dont la formulation au cas dépendant du temps est directe) nous permet de suivre précisément l'évolution des clusters α et en particulier, elle nous permet de justifier le terme d'oscillation de clusters. En effet, il apparaît bien sur ces résultats que les clusters α oscillent en phase sur un cœur de ^{12}C .

La densité apporte des informations essentielles à la compréhension de cette résonance de basse énergie, cependant elle ne permet pas d'expliquer le mécanisme d'apparition de ce mode à basse énergie. Pour comprendre plus en détail cette résonance, il est très instructif de décomposer l'excitation en termes de contributions à 2-qp [DPM17]. Cette décomposition peut être réalisée en utilisant la procédure d'intégration de contour présentée dans les sections précédentes 5.3. Les amplitudes QRPA individuelles correspondant aux modes d'excitation i sont données dans les équations Eq.(5.73) et

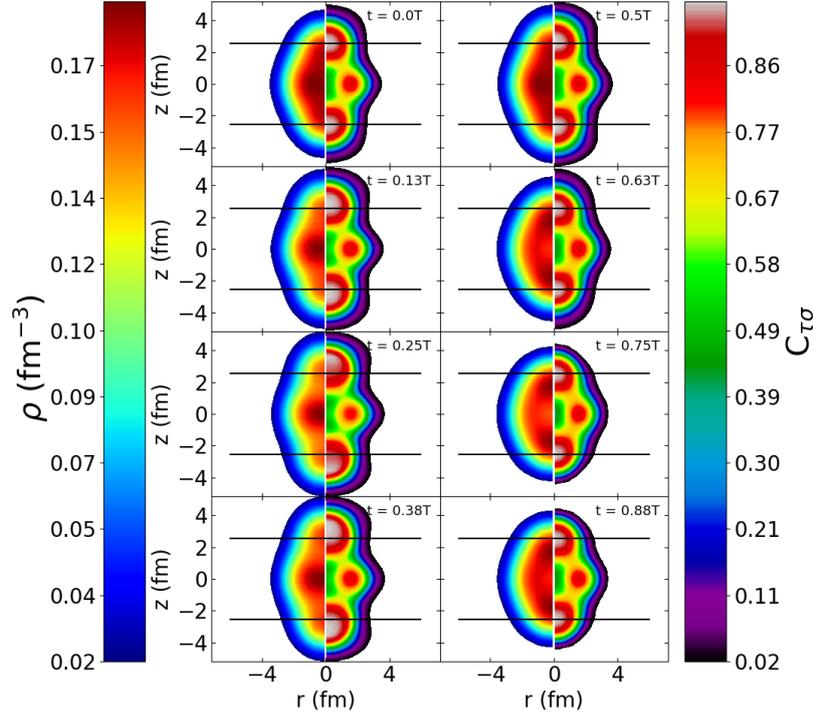


FIGURE 5.8 – Évolution de la densité et de la fonction de localisation dans le temps à une énergie $\hbar\omega = 6.75\text{MeV}$. Le temps évolue de haut en bas puis de gauche à droite et une période entière est montrée. Les lignes noires horizontales représentent la position du centre de masse des clusters dans l'état fondamental. Figure tirée de [Mer+21].

Eq.(5.74). L'observable d'intérêt ici est donnée par la quantité suivante[DPM17]

$$\xi_{2qp}^i = |X_{2qp}^i|^2 - |Y_{2qp}^i|^2. \quad (5.83)$$

qui permet de quantifier les contributions de chaque excitation 2-qp.

Les résultats de cette décomposition pour la résonance basse énergie du ^{20}Ne sont présentés sur la Fig.5.9. Les niveaux ainsi montrés correspondent aux éléments diagonaux de l'Hamiltonien à un corps dans la base canonique. Les nombres d'occupations correspondent pour leur part aux valeurs propres de la matrice densité. Les résultats sont montrés pour les neutrons et protons. On remarque que cette excitation n'est que très peu collective puisqu'elle implique principalement une unique transition. Cette dernière se fait entre deux états $1/2^+$. L'état d'origine à environ -12 MeV provient de la couche sphérique $1d_{5/2}$ qui s'est séparée en 3 contributions différentes à cause de la déformation. L'état final provient lui de la couche sphérique $2s_{1/2}$. Les résultats pour les protons et neutrons sont quasiment identiques (hormis un décalage en énergie pour les protons dû à la répulsion Coulombienne). La représentation des orbitales canoniques associées nous permet de comprendre plus en détail le schéma d'oscillations présenté sur la Fig.5.8 puisque la contribution principale à l'excitation montre bien une densité canonique excitée ($1/2+(3)$ qui représente le troisième état $1/2+$) avec des contributions plus loin du centre.

Une telle excitation 2-qp peut être interprétée dans le contexte de brisure de symétrie

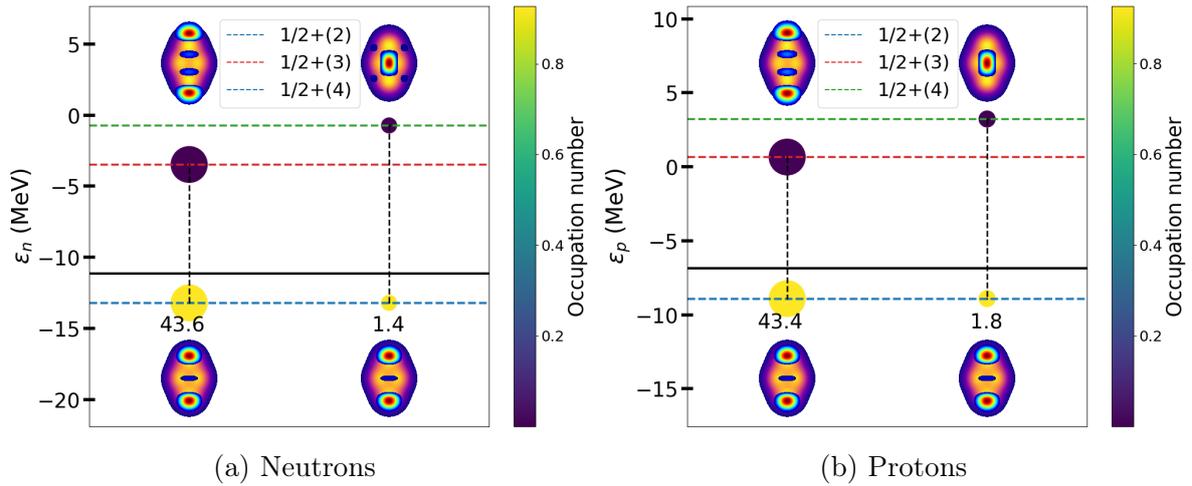


FIGURE 5.9 – Illustration schématique des contributions 2-qp les plus importantes à l’excitation ISM à $\hbar\omega = 6.7$ MeV dans le ^{20}Ne (à gauche pour les neutrons, à droite pour les protons). Les cercles et nombres associés représentent la fraction totale $|X|^2 - |Y|^2$ (voir Eq.5.83) emportée par l’excitation. Les densités partielles sont affichées pour chaque configuration ainsi que la configuration fondamentale en l’arrière-plan (que l’on retrouve aussi Fig.5.6). Le niveau de Fermi est représenté par un trait noir continu.

qui permet de décrire à moindre frais les corrélations non triviales comme source de comportement collectif du noyau. Cette brisure spontanée de symétrie rotationnelle conduit à l’apparition de nouveaux modes d’excitation, parfois appelés onde de densité [KH11]. Ces ondes de densité sont reliées à la variation du module du paramètre d’ordre de la symétrie brisée, ici β_2 .

5.4.2 Fonction de réponse à déformation contrainte

La discussion précédente suggère l’importance de la déformation dans l’apparition d’un tel mode de basse énergie. Il semble donc pertinent d’étudier l’évolution de la réponse ISM avec la déformation afin de mieux comprendre les détails de ce mode. Cette étude peut être faite en contraignant artificiellement les noyaux à avoir une déformation donnée. Cette méthode peut être appliquée de manière continue au paramètre de déformation β_2 et pour chaque déformation, le calcul QFAM contraint peut être réalisé. Sur la Fig.5.10 est tracée l’évolution de la fonction de réponse ISM en fonction de l’énergie pour certaines déformations contraintes. On remarque qu’une partie significative de la réponse se trouve dans la région $\hbar\omega \approx 5 - 10$ MeV à partir de $\beta_2 \sim 0.3$. De plus, cette excitation gagne en intensité lorsque la déformation augmente et se déplace vers des énergies plus élevées.

L’apparition de ce mode cluster peut être reliée à la structure des niveaux dans la base canonique. Dans la partie supérieure de Fig.5.11 sont tracées les composantes principales des décompositions 2-qp de ce mode cluster à certaines déformations. La partie inférieure montre l’évolution des énergies des particules individuelles (sp pour single particule) et du nombre d’occupations avec la déformation. Lorsque la déformation augmente, on voit que la couche sphérique $1d_{5/2}$ se sépare en trois niveaux distincts

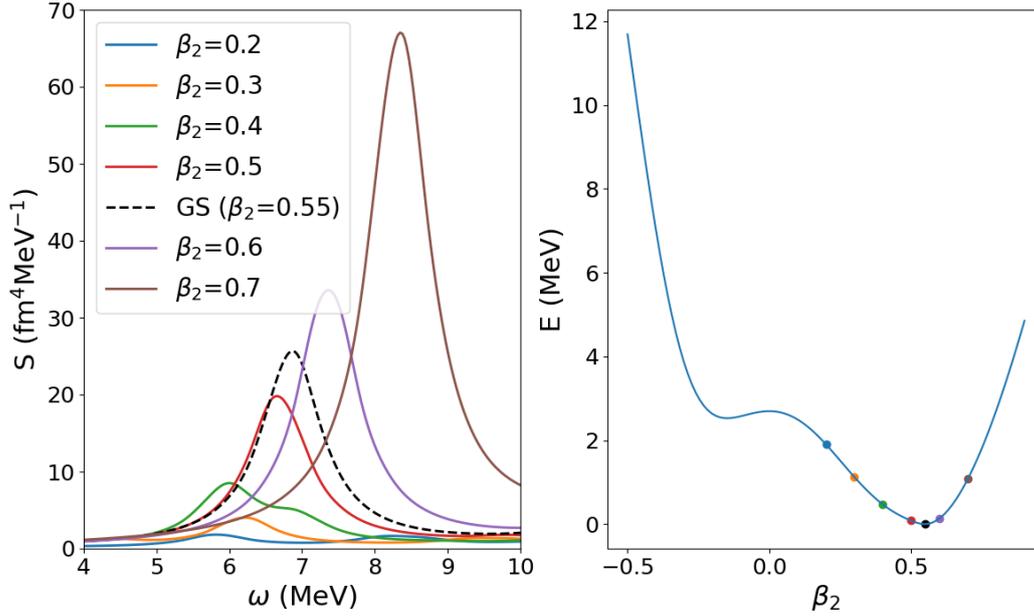


FIGURE 5.10 – Fonction de réponse ISM pour le ^{20}Ne à différentes déformations contraintes (à gauche). La surface d’énergie potentielle est tracée sur la figure de droite. Les points représentent les déformations pour lesquelles les fonctions de réponse sont affichées sur la figure de gauche.

$1/2^+$, $3/2^+$ et $5/2^+$. Plus précisément, le nombre d’occupation du niveau $1/2^+$ provenant des couches sphériques augmente avec la déformation, permettant une excitation particule-trou avec le niveau provenant des couches sphériques $2s_{1/2}$ et $1d_{3/2}$. Il est aussi important de noter que ce même niveau $1/2^+$ provenant de $1d_{5/2}$ est aussi responsable de la formation des clusters dans l’état d’équilibre du ^{20}Ne .

Comme montré sur le graphe en bas à gauche de la Fig.5.11, la déformation minimale correspondant à l’apparition d’une excitation de basse énergie se trouve environ à $\beta_2 \sim 0.2$ et il est intéressant de remarquer que cette déformation coïncide avec l’intersection du niveau $1/2^+(2)$ avec le niveau de Fermi. La contribution de ce niveau à l’excitation totale n’est alors que de $\sim 15\%$ mais augmente très rapidement avec la déformation pour atteindre plus de 40% dans l’état d’équilibre et continue d’augmenter après.

5.4.3 Études d’autres noyaux $N = Z$

L’étude précédente peut être généralisée à d’autres noyaux, aussi bien $N = Z$ qu’avec un excès de neutrons. Nous proposons ici de commencer par étudier le cas de quelques noyaux $N = Z$ avant de nous intéresser plus en détails à l’effet d’un excès de neutrons sur les résonances cluster de basse énergie.

Les fonctions de réponses pour 7 noyaux $N = Z$ sont affichées sur la Fig.5.12, du ^{12}C au ^{36}Ar . Le choix a été fait ici de tracer la fonction de réponse comme une fonction de la déformation β_2 et de l’énergie d’excitation ω . Cette visualisation permet de suivre plus facilement les effets de la déformation sur la fonction de réponse.

Un exemple intéressant, qui permet de compléter l’étude faite précédemment sur

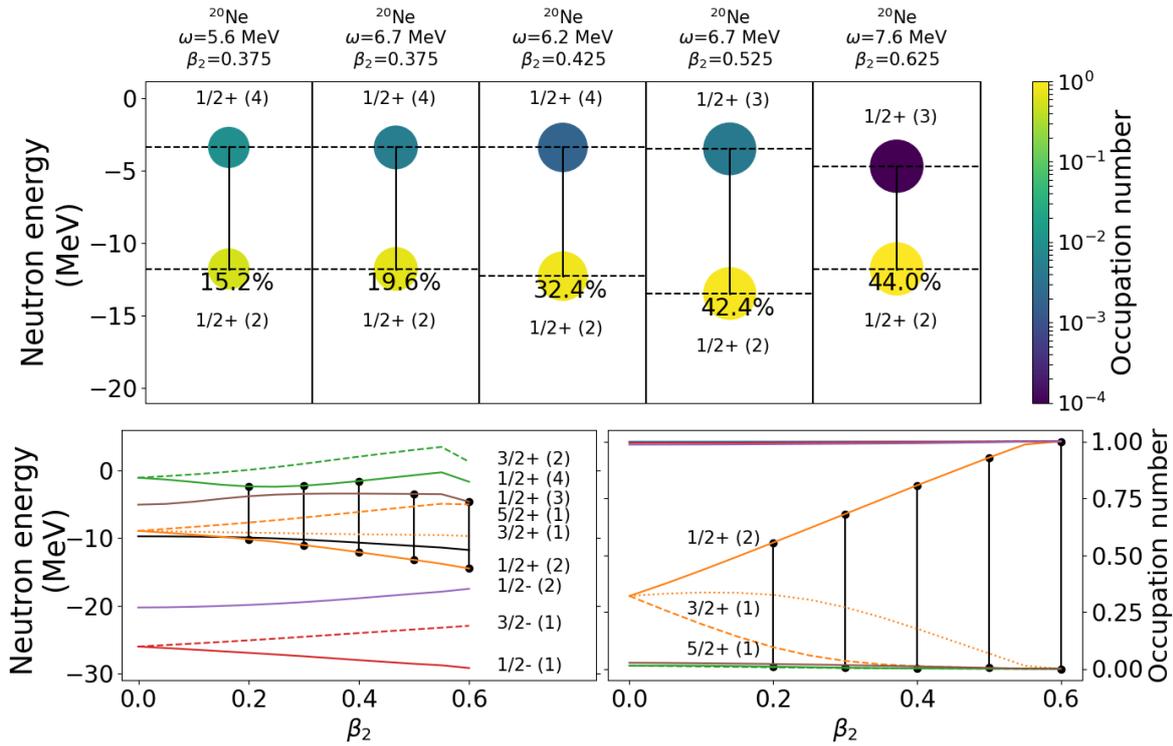


FIGURE 5.11 – Contribution dominante dans la décomposition 2-qp (partie supérieure) pour différentes valeurs de déformations dans le ^{20}Ne pour une excitation monopolaire. Spectre sp canonique et nombres d’occupations de certains niveaux canoniques à certaines déformations (partie inférieure). Les lignes noires verticales représentent les contributions principales pour quelques déformations. La ligne noire horizontale représente le niveau de Fermi.

le ^{20}Ne , est celui du ^{24}Mg . On remarque toujours autant la partie croissante de la fonction de réponse à basse énergie lorsque la déformation augmente. Cependant, cette partie à basse énergie comporte non pas une excitation, mais deux excitations bien distinctes à 7 MeV et 10 MeV respectivement, dans l’état d’équilibre du ^{24}Mg , qui ont été expérimentalement observée [Gup+16]. Le pic de plus basse énergie s’interprète de la même façon que celui du ^{20}Ne en termes de transition entre le niveau $1/2^+$ provenant de la couche sphérique $1d_{5/2}$ vers le niveau $1/2^+$ provenant de la couche sphérique $2s_{1/2}$.

L’ajout de deux protons et deux neutrons entraîne l’apparition du second mode qui s’explique en termes de transition entre le niveau $3/2^+$ provenant de la couche sphérique $1d_{5/2}$ vers le niveau $3/2^+$ provenant de la couche sphérique $1d_{3/2}$. Plus précisément, alors que pour le ^{20}Ne le niveau $3/2^+$ [301] n’était pas occupé, l’ajout de deux protons et deux neutrons a permis de remplir cette couche avec un nombre d’occupations proche de 1 pour $\beta_2 \sim 0.7$. Ainsi, le mécanisme qui conduit à l’apparition de ces résonances basse énergie est très général. La séparation des couches sphériques $1d_{5/2}$ et $1d_{3/2}$ avec la déformation permet l’apparition de transitions, une entre des niveaux $\Omega^\pi = 1/2^+$ et une autre entre des niveaux $\Omega^\pi = 3/2^+$.

Des études similaires peuvent être conduites pour les différents noyaux présentés sur

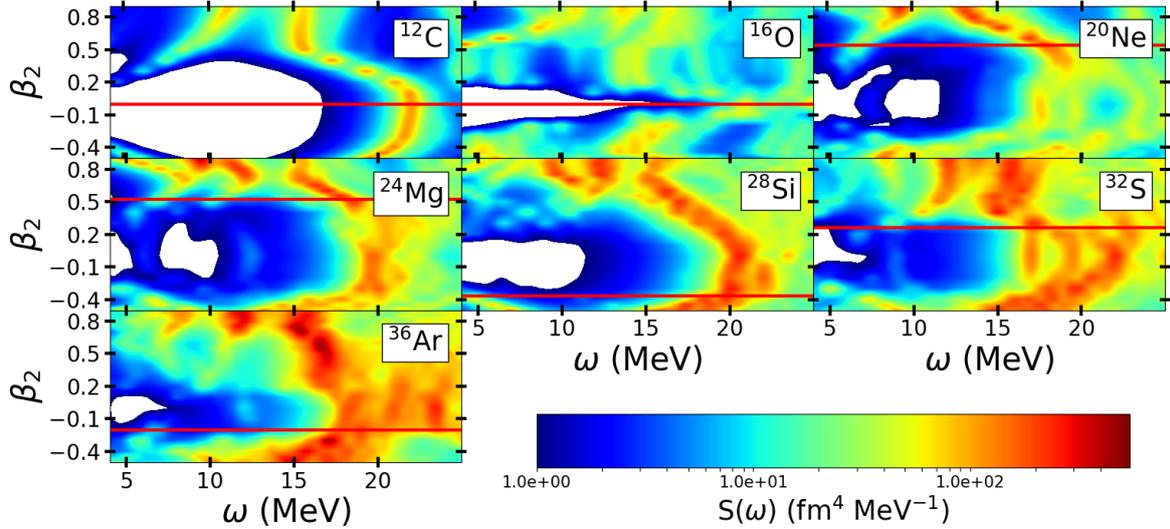


FIGURE 5.12 – Évolution de la fonction de réponse ISM pour différents noyaux $N = Z$ (^{12}C jusqu'au ^{36}Ar) en fonction de la déformation. Le trait rouge horizontal représente la déformation d'équilibre.

la Fig.5.12. Les structures de ces figures dépendent essentiellement du remplissage des couches (généralement autour du niveau de Fermi). Il reste intéressant de remarquer une structure assez similaire concernant la partie oblate sur ces figures. Pour le ^{20}Ne , cette résonance, que l'on voit apparaître sur la partie oblate, est liée au niveau $5/2+$ (de la couche sphérique $1d_{5/2}$) qui se remplit au détriment de la $1/2+$.

5.5 Excitations de neutrons

Afin d'étudier en détail les excitations de basse énergie dans les systèmes avec ou sans excès de neutrons, il est plus simple de commencer par l'étude de noyaux sphériques dans leur état d'équilibre. De plus, de nombreux résultats expérimentaux existent pour ce type de noyaux, permettant une meilleure comparaison théorie-expérience.

On se propose ici de commencer l'étude par les chaînes isotopiques du Calcium $Z = 20$ et du Nickel $Z = 28$. On montrera qu'un modèle générique d'émergence des modes ISM de faible énergie, lorsque le rapport entre le nombre de neutrons et le nombre de protons augmente, peut être attribué à l'inadéquation entre les énergies de Fermi des neutrons et des protons. Cette dernière est principalement due aux dernières orbitales occupées des neutrons qui se rapprochent du continuum. Par conséquent, les neutrons de valence se découplent des autres nucléons et participent à des excitations de nature plutôt peu collective. En d'autres termes, l'émergence de nouveaux modes ISM de faible énergie, liée à l'augmentation du nombre de neutrons, peut être comprise à partir de la structure en sp, i.e. à partir du spectre sp de l'état RHB de référence sur lequel la réponse QRPA est construite. L'apparition d'un pic coïncide avec le remplissage d'une orbitale avec des nombres quantiques sphériques n, j, l, m , à partir de laquelle une configuration 2qp supplémentaire $[njl m; (n+1)jlm]^{J=0}$ devient disponible. La fonction de réponse ISM reflète donc le modèle énergétique du spectre sp : i) apparition de résonances

de faible énergie chaque fois qu’une orbitale inaugurant une nouvelle couche majeure commence à être remplie, et ii) augmentation de la fonction de réponse dans une petite fenêtre d’énergie, tant que les orbitales de la même couche majeure sont remplies. La diminution de l’énergie d’excitation correspondante, lorsqu’on passe d’une couche majeure à la suivante, provient principalement de l’affaiblissement des énergies de liaison des neutrons de valence, c’est-à-dire de la réduction de l’écart entre les orbitales occupées n et vides $n + 1$, impliquées dans la transition ISM. Ce schéma spécifique sera illustré sur les chaînes isotopiques $Z = 20$ et $Z = 28$, dans les deux prochaines sous-sections.

5.5.1 Chaînes isotopiques du Calcium et du Nickel

Calcium

La répartition de la fonction de réponse ISM calculée dans les isotopes pairs $^{40-62}\text{Ca}$ est présentée dans la Fig.5.13. Alors que la GMR ($\omega \sim 18$ MeV) reste assez stable le long de la chaîne isotopique, la structure de basse énergie change avec l’excès de neutrons. Ceci peut être compris à l’aide des spectres canoniques des neutrons dans la chaîne des Calciums tracés sur la Fig.5.14. Dans le ^{42}Ca , deux neutrons remplissent l’orbitale $1f_{7/2}$, rendant la transition $1f_{7/2} \rightarrow 2f_{7/2}$ (ces deux niveaux sont séparés par un écart d’énergie de 30 MeV) comme une contribution possible à la réponse.

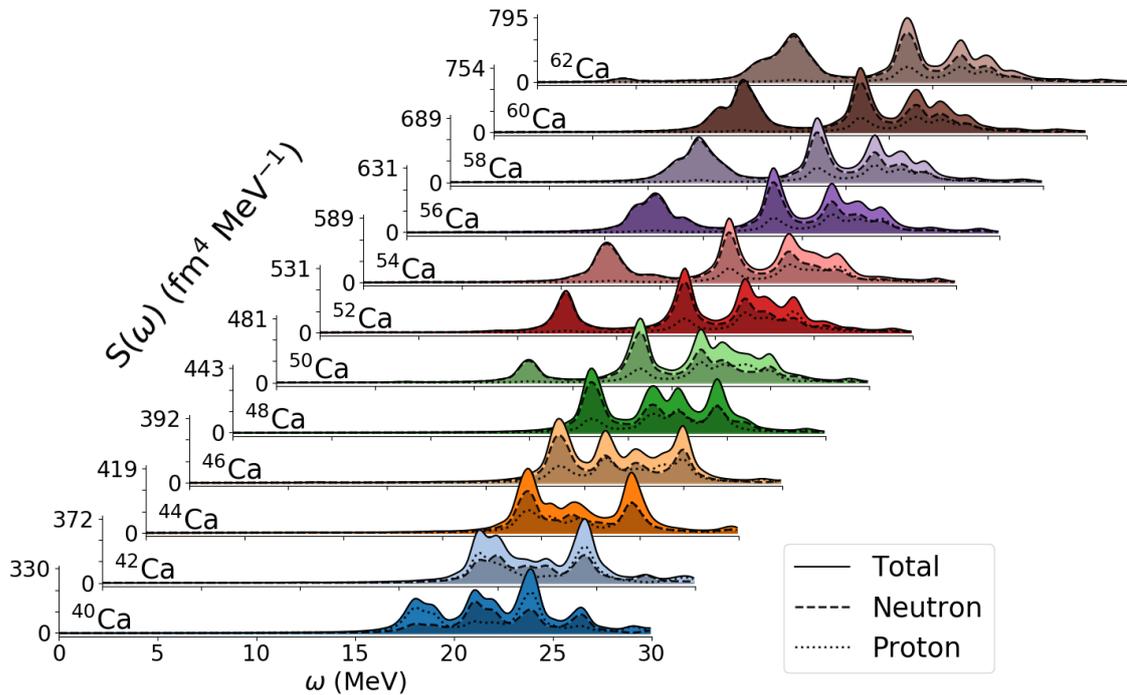


FIGURE 5.13 – Fonction de réponse ISM dans la chaîne isotopique du Calcium. La fonction de réponse totale (trait plein) est séparée en ses contributions de neutrons (en tiret) et de protons (en pointillé). Figure tirée de [MEK22].

Une décomposition de l’excitation basse énergie dans le ^{42}Ca en composantes 2-qp montre que la transition $1f_{7/2} \rightarrow 2f_{7/2}$ contribue principalement à un pic situé à

$\omega \sim 20$ MeV, c'est-à-dire dans la GMR. Comme nous l'avons vu plus haut, le passage à la couche majeure suivante, c'est-à-dire l'ajout de deux neutrons dans l'orbitale $2p_{3/2}$, après le remplissage de l'orbitale $1f_{7/2}$ (donc le ^{50}Ca), devrait générer une résonance de faible énergie. Le remplissage des orbitales à l'intérieur de la même couche principale, c'est-à-dire des niveaux $2p_{3/2}$ à $1g_{9/2}$, devrait générer des contributions à la réponse dans une même gamme d'énergie. En effet, le remplissage de chacune des orbitales, de $2p_{3/2}$ à $1g_{9/2}$, donne lieu à des excitations proches en énergie (voir Fig.5.14), chacune d'entre elles étant dominée par une seule configuration 2qp. En particulier, dans le ^{50}Ca , on trouve un mode d'excitation à 12,8 MeV (voir Fig.5.13 et Tab.5.1) pour lequel la contribution 2qp dominante (portant 40% des contributions 2qp totales) est $2p_{3/2} \rightarrow 3p_{3/2}$, en accord avec les résultats des Refs.[HSZ97 ; Pie17 ; GGS19]. Dans le ^{54}Ca , un pic de faible intensité apparaît à 14,7 MeV, correspondant à la transition $2p_{1/2} \rightarrow 3p_{1/2}$. Ensuite, dans le ^{56}Ca , une résonance à 11,5 MeV émerge, due au remplissage de l'orbitale $1f_{5/2}$ et de la transition $1f_{5/2} \rightarrow 2f_{5/2}$. Finalement, dans le ^{62}Ca , le remplissage de l'orbitale $1g_{9/2}$, permet alors la transition $1g_{9/2} \rightarrow 2g_{9/2}$ et donc l'apparition d'une nouvelle résonance à 12 MeV. Cette dernière excitation n'est cependant pas dominante, et n'est pas facilement visible dans la fonction de réponse. En revanche, les détails des contributions qp indiquent que cette transition est responsable d'environ 10% de la réponse entre 10 et 13 MeV. Il faut noter qu'une autre résonance est visible autour de 4 MeV dans le ^{62}Ca , dont la nature sera discutée dans la section 5.6.

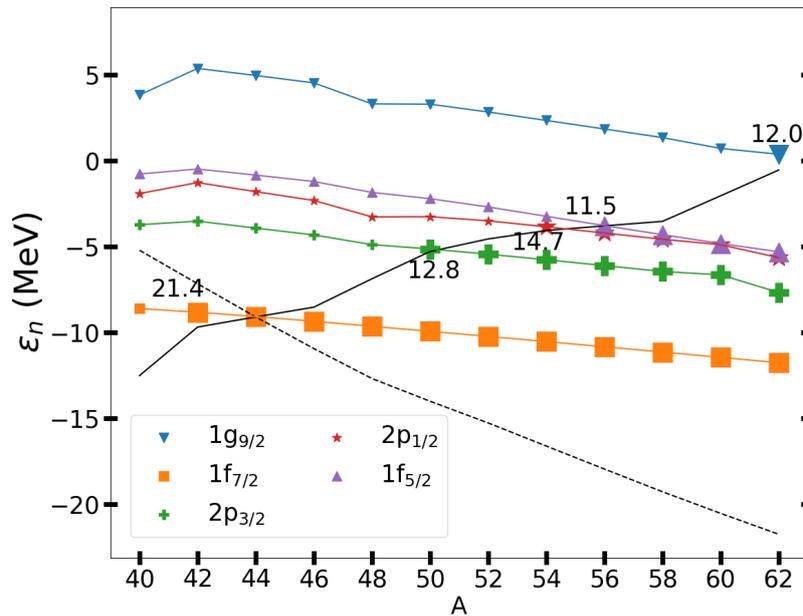


FIGURE 5.14 – Spectre canonique dans la chaîne isotopique du Calcium. L'énergie de Fermi neutron (proton) est représentée par une ligne noire solide (en trait). Les orbitales vides (pleines) sont représentées par des petits (grands) symboles. Les nombres indiquent l'énergie de la résonance associée au remplissage de la couche.

De la même façon que dans le cas des résonances clusters, l'étude des densités de transition permet de compléter les propriétés de la résonance. Ces densités sont tracées en 1D sur la Fig.5.15. Les détails liés à chaque excitation sont donnés dans Tab.5.1. À des fins de comparaison, le premier cadran (en haut à gauche) représente la densité de

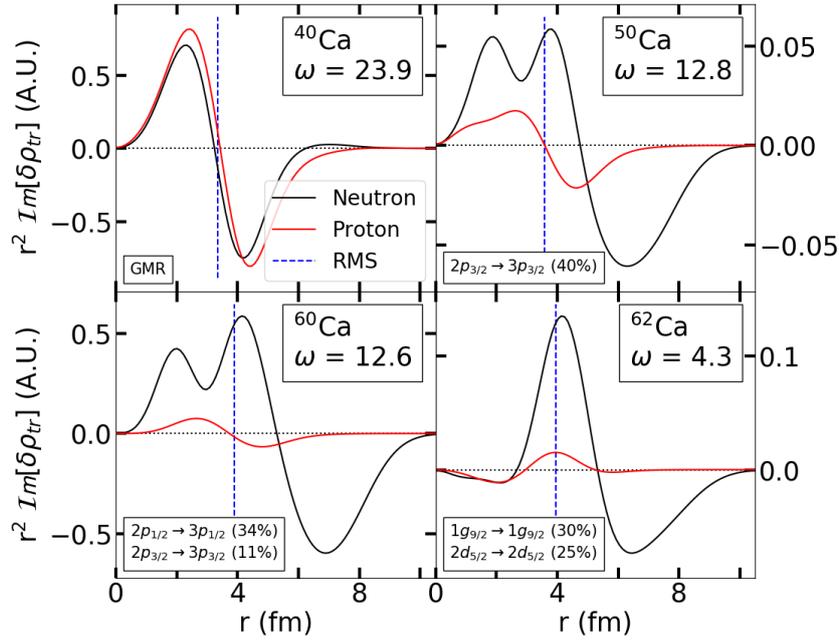


FIGURE 5.15 – Densités de transition neutron (noir) et proton (rouge) pour les noyaux $^{40,50,60,62}\text{Ca}$. Les énergies d'excitation ω sont données en MeV. Les lignes bleues verticales représentent les rayons r.m.s. des noyaux dans leur état fondamental respectifs.

transition pour la GMR dans le ^{40}Ca . On retrouve le mouvement d'oscillation en phase propre à la GMR. Les densités de transition associées aux modes de basses énergies à $\omega = 12.8$ MeV dans ^{50}Ca et à $\omega = 12.6$ MeV dans ^{60}Ca , montrent un comportement très différent comparé à celui de la GMR dans le ^{40}Ca . Comme décrit dans la Réf. [GG19], les neutrons de valence semblent être découplés des protons avec des excitations neutroniques qui s'étendent sur tout le volume du noyau. La contribution des protons diminue avec l'excès de neutrons, passant de 15% pour ^{50}Ca , à moins de 5% dans le cas de ^{62}Ca . Le mode à 4.3 MeV dans le ^{62}Ca , dû aux corrélations d'appariement, sera discuté dans la section 5.6.

Nickel

Le modèle d'émergence des résonances de basse énergie lié aux excès de neutrons précédemment discuté peut également être testé dans la chaîne isotopique du nickel. La Fig.5.16 montre la réponse ISM de la chaîne isotopique $^{46-86}\text{Ni}$. En nous concentrant tout d'abord sur les isotopes de Ni riches en neutrons, nous nous attendons à ce que de nouvelles structures de basses énergies émergent à $N = 30$ et $N = 52$, où les orbitales qui inaugurent les nouvelles couches majeures commencent à être remplies, c'est-à-dire les états $2p_{3/2}$ et $2d_{5/2}$, respectivement. Comme l'illustre la Fig.5.17, le remplissage des orbitales $2p_{3/2}$ à $1g_{9/2}$, donne lieu à des résonances avec des énergies autour de 18 MeV, tandis que l'occupation des états $2d_{5/2}$ et $3s_{1/2}$, donne lieu à des excitations monopolaires autour de 11 MeV.

Pour mieux comprendre l'évolution de la fonction de réponse dans les isotopes de Ni

Noyau	ω (MeV)	Transition $\alpha \rightarrow \beta$	$E_\beta + E_\alpha$ (MeV)	$ X_{\alpha\beta} ^2 - Y_{\alpha\beta} ^2$
^{50}Ca	12.8	$2p_{3/2} \rightarrow 3p_{3/2}$	14.2	0.4
^{60}Ca	12.6	$2p_{1/2} \rightarrow 3p_{1/2}$	12.4	0.34
		$2p_{3/2} \rightarrow 3p_{3/2}$	13.8	0.11
		$1f_{5/2} \rightarrow 2f_{5/2}$	14.2	0.05
^{62}Ca	4.3	$1g_{9/2} \rightarrow 1g_{9/2}$	2.6	0.30
		$2d_{5/2} \rightarrow 2d_{5/2}$	5.4	0.25
		$2s_{1/2} \rightarrow 2s_{1/2}$	5.3	0.19

TABLE 5.1 – Propriétés des modes ISM dans les isotopes du Calcium aux énergies d’excitation ω . La décomposition 2-qp (colonne transition $\alpha \rightarrow \beta$) contribue à la réponse totale à hauteur de $|X_{\alpha\beta}|^2 - |Y_{\alpha\beta}|^2$ et avec une énergie $E_\beta + E_\alpha$ où E_μ représente l’énergie de la quasi-particule μ . Les transitions contribuant pour moins de 5% de la réponse ISM ne sont pas affichées.

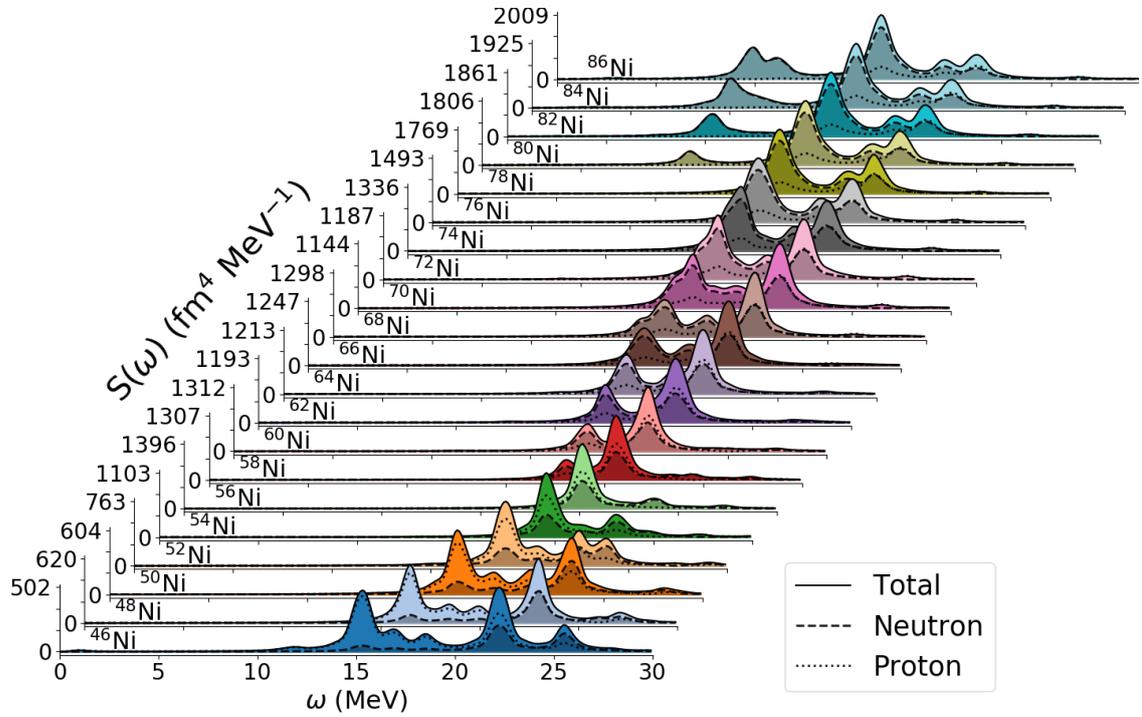


FIGURE 5.16 – Identique à Fig.5.13 mais pour les isotopes du Nickel.

riches en neutrons $^{58,68,79,80,86}\text{Ni}$, la Fig.5.18 relie chaque mode de basse énergie à ses contributions 2-qp dominantes, tandis que la Table 5.2 détaille l’écart d’énergie entre les deux états qp de la transition, ainsi que le poids de la configuration 2-qp. Ainsi, une nouvelle couche majeure, inaugurée par l’orbitale $2p_{3/2}$, est remplie en passant du ^{56}Ni au ^{58}Ni . En conséquence, un nouveau mode de basse énergie émerge à $\omega = 18,1$ MeV, dominé par la transition $2p_{3/2} \rightarrow 3p_{3/2}$ (42%, voir Tab. 5.2). De même, dans les $^{62,68,70}\text{Ni}$, l’occupation des orbitales $2f_{5/2}$, $2p_{1/2}$ et $1g_{9/2}$ s’accompagne de nouvelles résonances, situées à $\omega = 19,9$ MeV, $\omega = 15,6$ MeV et $\omega = 18$ MeV, respectivement. Leurs contributions 2-qp dominantes proviennent respectivement des transitions $1f_{5/2} \rightarrow 2f_{5/2}$, $2p_{3/2} \rightarrow 3p_{3/2}$ et $1g_{9/2} \rightarrow 2g_{9/2}$. L’ajout de neutrons supplémentaires dans les orbitales

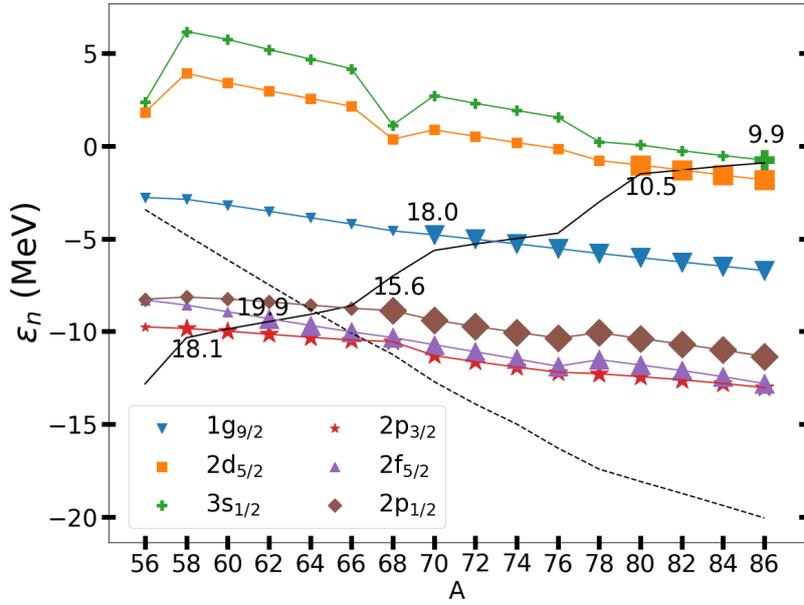


FIGURE 5.17 – Identique à Fig.5.14 mais pour les isotopes du Nickel.

$2d_{5/2}$ et $3s_{1/2}$ ouvre une nouvelle couche majeure et de nouveaux pics apparaissent donc dans les $^{80,86}\text{Ni}$ à $\omega = 10, 5$ MeV, et $\omega = 9, 9$ MeV. Leurs contributions 2-qp dominantes proviennent de la $2d_{5/2} \rightarrow 3d_{5/2}$ (32%) dans le premier cas, et sont plus uniformément distribuées entre la $2d_{5/2} \rightarrow 3d_{5/2}$ (12%) et la $3s_{1/2} \rightarrow 4s_{1/2}$ (14%), dans le second.

D'un point de vue général, l'évolution de la réponse monopolaire, dans les deux chaînes isotopiques Ca et Ni, est assez similaire et s'interprète facilement en termes de caractéristiques du spectre canonique. Il a de plus été vérifié que ces similitudes sont également présentes au niveau des densités de transition. Il est intéressant de noter que la partie basse énergie de la réponse dans le ^{68}Ni est en accord avec les résultats expérimentaux rapportés dans la Réf. [Van+14], où un pic autour de 15 MeV est mesuré. De même, la structure de la réponse obtenue dans les isotopes $^{68-78}\text{Ni}$ est en accord avec les calculs rapportés dans la Réf. [HS14], où le couplage au continuum a été considéré. Par conséquent, ce dernier effet n'a pas d'impact sur les caractéristiques qualitatives de la force du monopole. Cependant, le couplage au continuum a un impact important sur la largeur des résonances de basse énergie, et augmente (parfois grandement) la collectivité des excitations.

Enfin, la contrepartie protonique des modes de basse énergie peut être observée dans les Ni déficitaires en neutrons (voir Fig.5.16), avec le même mécanisme d'émergence. La diminution du nombre de neutrons entraîne l'énergie de Fermi des protons vers le continuum, décorrélant les protons qui étaient liés. En conséquence, la contribution des neutrons à la réponse monopolaire entre 15 et 20 MeV diminue, et de nouveaux modes purement protoniques émergent, par exemple dans le ^{46}Ni à 15.5 MeV et dans le ^{46}Ni à 17.3 MeV.

Nucleus	ω (MeV)	Transition $\alpha \rightarrow \beta$	$E_\beta + E_\alpha$ (MeV)	$ X_{\alpha\beta} ^2 - Y_{\alpha\beta} ^2$
^{58}Ni	18.1	$2p_{3/2} \rightarrow 3p_{3/2}$	16.0	0.42
		$2p_{1/2} \rightarrow 3p_{1/2}$	15.4	0.02
^{68}Ni	15.6	$2p_{1/2} \rightarrow 3p_{1/2}$	11.8	0.33
		$2p_{3/2} \rightarrow 3p_{3/2}$	10.0	0.13
^{70}Ni	18.0	$2p_{3/2} \rightarrow 3p_{3/2}$	7.0	0.22
		$1g_{9/2} \rightarrow 2g_{9/2}$	15.9	0.19
^{80}Ni	10.5	$2d_{5/2} \rightarrow 3d_{5/2}$	9.5	0.32
		$3s_{1/2} \rightarrow 4s_{1/2}$	9.0	0.06
		$2d_{3/2} \rightarrow 3d_{3/2}$	9.1	0.04
^{86}Ni	9.9	$3s_{1/2} \rightarrow 4s_{1/2}$	8.4	0.14
		$2d_{3/2} \rightarrow 3d_{3/2}$	8.0	0.12

TABLE 5.2 – Identique à Tab. 5.1 mais pour les isotopes du Nickel.

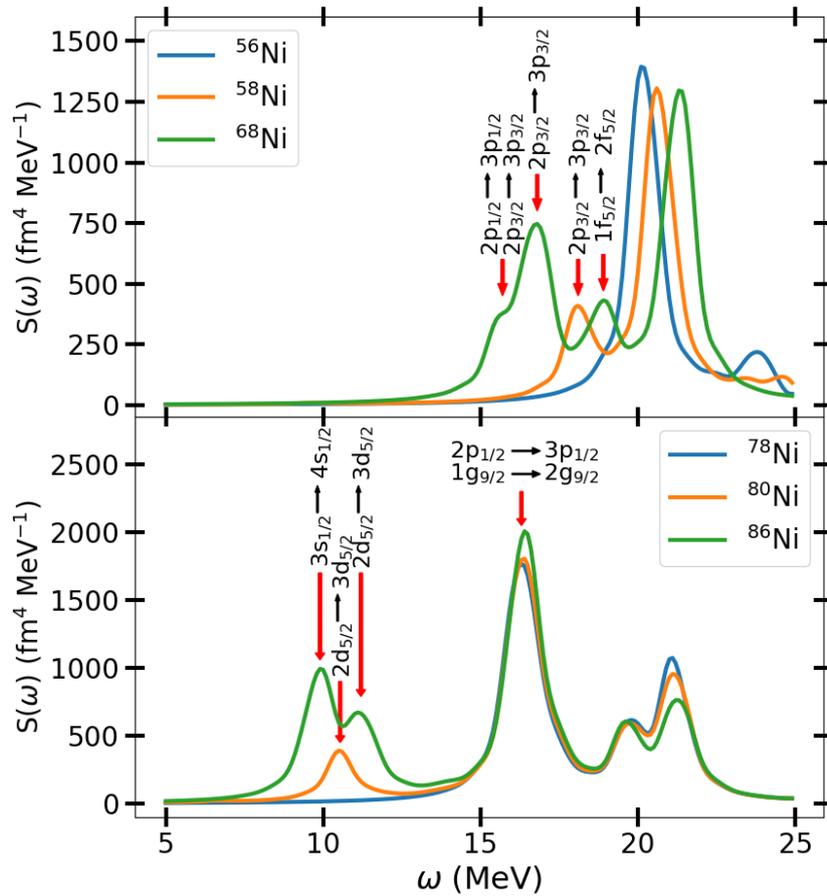


FIGURE 5.18 – Réponse monopolaire des $^{56,58,68,79,80,86}\text{Ni}$. La contribution 2-qp dominante est indiquée pour chaque mode de basse énergie.

5.5.2 Généralisation

Une façon possible de quantifier l'évolution de ces modes créée par l'asymétrie d'isospin, est d'évaluer leur contribution globale à la réponse totale. Cette évolution est affichée sur la Fig.5.19 qui montre l'évolution du rapport entre les réponses intégrées des modes de basse énergie et la réponse totale :

$$R \equiv \frac{\int_0^{\omega_{\text{sm}}} d\omega S(\omega)}{\int_0^{\omega_{\text{tot}}} d\omega S(\omega)}, \quad (5.84)$$

avec ω_{sm} l'énergie du dernier mode de basse énergie et $\omega_{\text{tot}} = 30$ MeV qui correspond à l'énergie où la GMR devient très faible. Ce ratio est tracé pour diverses chaînes isotopiques, allant du Ne au Ge. Il est à noter que les noyaux déformés ont été contraints à une forme sphérique afin d'éviter de mélanger les effets liés à l'excès de neutrons et ceux liés à la déformation. L'impact de la déformation est traité dans la partie suivante.

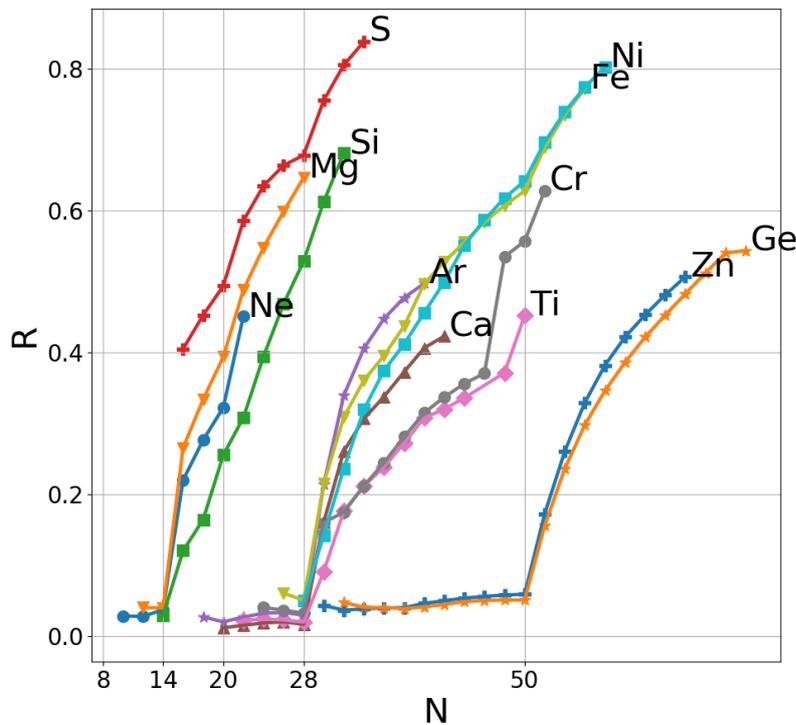


FIGURE 5.19 – Évolution du ratio (5.84), avec le nombre de neutrons N pour différentes chaînes isotopique. L'intégration sur les modes de basse énergie est faite jusqu'à $\omega_{\text{sm}} \sim 14 - 18$ MeV suivant la position de la GMR pour chacun des noyaux pris en compte.

La tendance générale semble s'aligner sur une augmentation systématique de la proportion du mode de basse énergie dans la réponse monopolaire avec l'excès de neutrons. Ce rapport peut atteindre près de 80% de la réponse totale pour les noyaux très riches en neutrons dans le cas du Nickel, Fer ou Soufre. Ici encore, la relation entre l'ouverture d'une couche majeure et l'émergence de modes neutroniques de basse énergie est visible, c'est-à-dire que l'ajout de neutrons sur des configurations $N = 14, 28, 50$ entraîne une augmentation soudaine de la contribution des modes de basse énergie. D'autre part,

l'ajout de neutrons au-dessus de la fermeture de couche $N = 20$ semble avoir peu d'impact, bien qu'une inflexion dans l'évolution de la proportion de ces modes peut être observée dans la chaîne isotopique du soufre et du néon (Fig.5.19). Dans le cas des isotopes de l'argon et du calcium, le décalage entre les énergies de Fermi du proton et du neutron n'est pas suffisamment important pour déclencher une résonance de faible énergie à $N = 22$.

Une autre caractéristique réside dans le faible impact lié à l'ouverture de sous-couches qui ont des effets négligeables dans l'évolution du rapport (5.84) : lorsque l'occupation d'une orbitale ouvre une nouvelle transition monopolaire possible, ce rapport étudié n'est pas impacté au-delà d'une augmentation constante. Cependant, l'orbitale $2s_{1/2}$ fait exception : son remplissage donne lieu à la première apparition du mode de basse énergie neutronique dans le Néon, le Magnésium, le Silicium et le Soufre à $N = 16$. Cela pourrait être lié au fait que $N = 14$ est considérée comme une forte fermeture de sous-couche [Bec+06].

5.5.3 Impact de la déformation

Nous souhaitons maintenant étudier l'impact de la déformation sur la structure de la partie basse énergie de la réponse monopolaire. Nous avons déjà vu précédemment dans la partie sur les excitations cluster (Sec.5.4) que la déformation pouvait être responsable à elle seule de l'apparition de nouveaux modes. Il est de plus connu que la déformation entraîne la fragmentation de la GMR (et d'autres résonances géantes dans d'autres multipolarités [HW01]). Concernant les modes de basse énergie qui apparaissent avec les excès de neutrons, certaines études ont déjà montré qu'une telle fragmentation existait aussi [AKR09].

Afin d'évaluer l'impact de la déformation sur la structure de la réponse monopolaire, nous procédons comme dans la section précédente concernant les résonances clusters en effectuant des calculs QFAM sur des états de référence RHB contraints à différentes déformations. Cette dernière est paramétrée par le paramètre β_2 de déformation quadrupolaire axiale et prend des valeurs comprises entre $\beta_2 \in [-0.2, 0.8]$. Cela permet de suivre les différentes résonances monopolaires lorsque la déformation du système est modifiée.

L'évolution des modes de basse énergie avec la déformation et l'asymétrie d'isospin peut être comprise de manière générique et sera illustrée dans le cas spécifique des isotopes de Mg. Nous commençons par examiner l'évolution de la réponse monopolaire dans les isotopes de Mg lorsque la déformation quadrupolaire de l'état de référence RHB varie de $\beta_2 = -0,2$ à $\beta_2 = +0,8$ (Fig.5.20). L'évolution de la réponse avec l'excès de neutrons, dans les isotopes de Mg contraints à être sphérique (tranche de $\beta_2 = 0$ dans chaque panneau de la Fig.5.20), est en accord avec la discussion précédente sur l'émergence des modes neutroniques de basse énergie. À savoir, un mode de basse énergie apparaît dans le ^{28}Mg vers 16 MeV, lié au remplissage des orbitales $2s_{1/2}$. Ensuite, la largeur de ce pic augmente dans le ^{30}Mg , en raison d'une excitation supplémentaire de $1d_{3/2}$ vers $2d_{3/2}$. Dans les noyaux $^{34,36}\text{Mg}$, un nouveau mode à $\omega \approx 13.5$ MeV émerge, provenant du remplissage de l'orbitale $1f_{7/2}$.

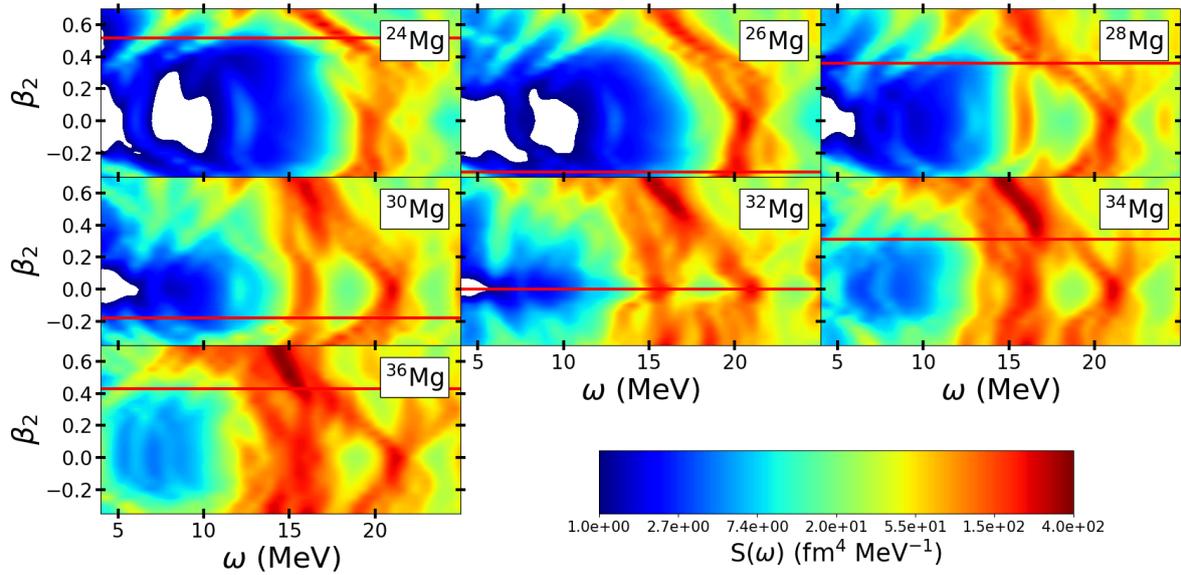


FIGURE 5.20 – Évolution de la réponse monopolaire dans les isotopes du Magnésium à déformations contraintes. Les lignes rouges représentent les déformations correspondantes aux déformations de l'état d'équilibre pour chaque noyau.

L'impact de la déformation dans la partie basse énergie monopolaire peut être étudié en suivant les modes de neutrons lorsque la déformation augmente. En se concentrant sur le ^{32}Mg (voir le panneau correspondant dans la Fig.5.20 ainsi que dans la Fig.5.21), une faible déformation provoque une division de ces modes de manière similaire à ce qui est connu pour la GMR. Par exemple, la résonance trouvée à $\omega = 15,5$ MeV, dans le ^{32}Mg sphérique, se divise en quatre composantes dans le cas déformé $\beta_2 = 0, 1$, situées à $\omega = 14,0, 15,4, 16,5$ et $17,5$ MeV, respectivement. Une cinquième composante est visible à $\omega \approx 11,8$ MeV, cette dernière acquérant plus de force à mesure que la déformation augmente. Ces différentes excitations proviennent directement des couches sphériques qui se séparent par l'effet de la déformation.

En raison de la nature non collective de ces modes, il est possible d'établir une correspondance entre le fractionnement de la réponse monopolaire et le fractionnement induit par la déformation axiale au niveau du spectre canonique (Fig.5.22). Par exemple, les contributions 2-qp dominantes du mode monopole à $15,7$ MeV du ^{32}Mg à $\beta_2 = 0$ (voir Fig.5.21) sont $2s_{1/2} \rightarrow 3s_{1/2}$ et $1d_{3/2} \rightarrow 2d_{3/2}$. Lorsque $\beta_2 \neq 0$, l'orbitale sphérique $1d_{3/2}$ se divise en états non dégénérés $\Omega^\pi = 1/2^+$ et $\Omega^\pi = 3/2^+$, où Ω représente la projection du moment angulaire total J sur l'axe de symétrie (choisi pour être l'axe (Oz)) et π la parité de l'état. Avec la rupture de la symétrie de rotation, ces états n'appartiennent pas à une représentation irréductible du groupe $SU(2)$ pouvant être associé aux valeurs propres de J^2 , mais mélangent plutôt la composante $m = \Omega$ des orbitales sphériques de parité positive (à condition que la symétrie de réflexion reste intacte) : l'état $\Omega^\pi = 1/2^+$ axialement symétrique résulte du mélange de la composante $m = 1/2$ des orbitales s, d, g , etc

Pour le ^{32}Mg , lorsque l'orbitale $1d_{3/2}$ se divise en un état $\Omega^\pi = 1/2^+$ et un état

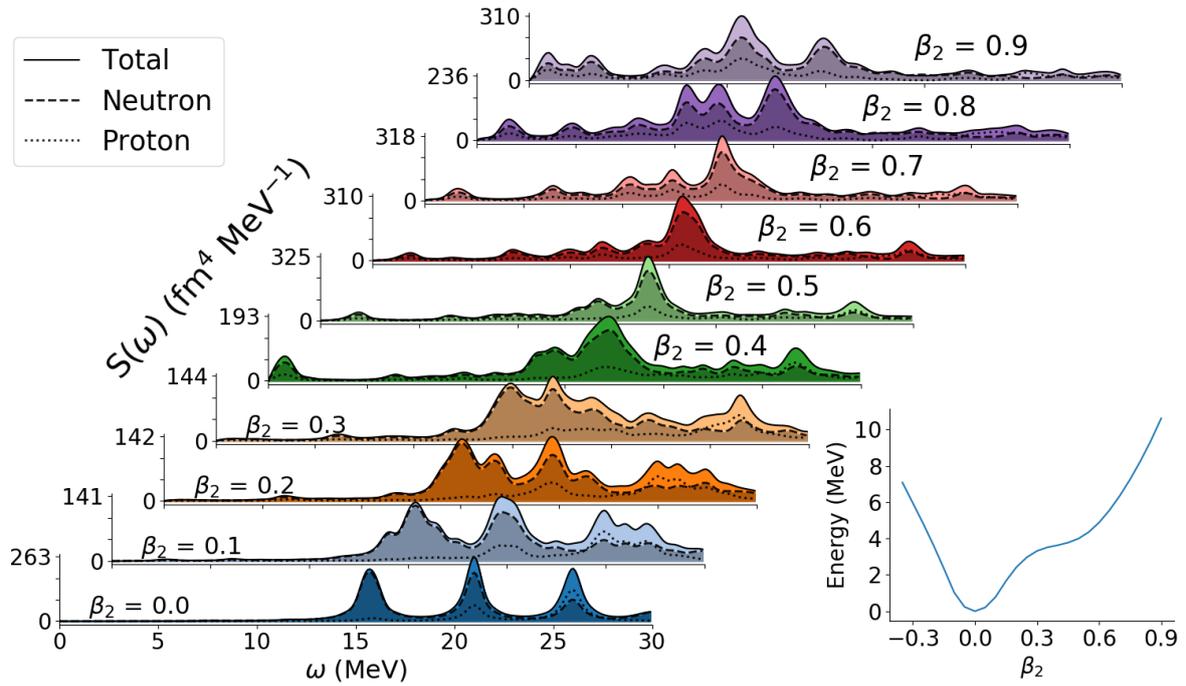


FIGURE 5.21 – Évolution de la réponse monopolaire totale (courbes pleines) dans le ^{32}Mg avec la déformation séparée en contribution de neutrons (traits pleins) et protons (pointillés). L’encart en bas à droite représente l’évolution de l’énergie du ^{32}Mg avec le paramètre de déformation β_2 .

$\Omega^\pi = 3/2^+$, de nouvelles transitions ont lieu entre le $1/2^+$ (resp. $3/2^+$) occupé et tous les autres $1/2^+$ (resp. $3/2^+$) inoccupés engendrés par la rupture de symétrie $SU(2)$. Par conséquent, beaucoup plus de transitions sont disponibles, par rapport au cas sphérique, ce qui entraîne une augmentation de la collectivité des résonances de basse énergie. Par exemple, dans le cas de ^{32}Mg à $\beta_2 = 0, 1$, entre $\omega = 11$ MeV et $\omega = 16$ MeV, presque 10 transitions sont impliquées et portent une partie non négligeable de la réponse (plus de 5% de la réponse totale chacune). Il apparaît que ce que l’on appelle un mode monopolaire, dans un tel cadre déformé, doit être compris comme un mélange entre des transitions monopolaires, quadrupolaires, etc.

Dans le cas d’une déformation plus importante, la Fig.5.21 montre que la GMR est déplacée vers une énergie plus faible, comme prévu, et commence à fusionner avec les modes de basse énergie. Cependant, la distinction entre les modes de basse énergie et la GMR peut être faite en examinant la contribution des protons à la réponse totale (lignes pointillées sur la Fig.5.21). Lorsque cette dernière est non nulle, il y a une excitation cohérente à la fois des protons et des neutrons, correspondant à la GMR. Sur la base de ce critère, nous déduisons que les modes de basse énergie disparaissent pour $\beta_2 > 0, 7$, en raison de la propagation de la GMR (Fig.5.21).

Les densités de transition sont représentées sur la Fig.5.23, pour le mode situé à $\omega = 15.7$ MeV dans le ^{32}Mg sphérique, ainsi que pour les modes à $\omega = 11.8, 14.2, 15.1, 16.8$ MeV dans le ^{32}Mg , contraint à $\beta_2 = 0.2$. La déformation génère une localisation sur les densités de transition, comme le montre celle du proton au cœur du noyau, et celle du

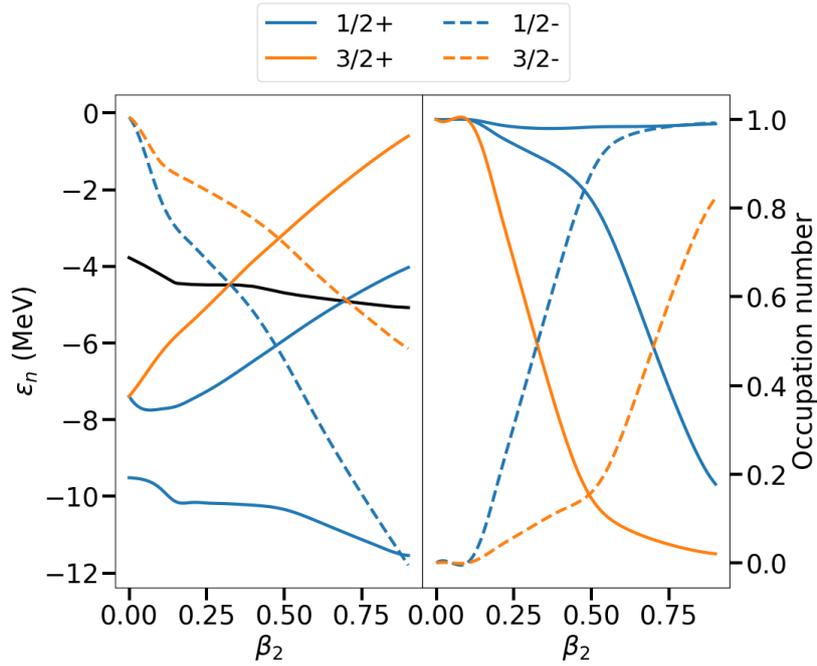


FIGURE 5.22 – Énergies canoniques (gauche) de certains niveaux de neutrons du ^{32}Mg et facteur d’occupation correspondant (droite) en fonction du paramètre de déformation β_2 . La ligne noire montre l’énergie de Fermi neutron.

neutron à la fois au cœur et à la surface du ^{32}Mg .

Les propriétés spatiales des densités de transition, présentées dans la Fig. 5.23, peuvent être analysées plus en détail en termes de contributions 2-qp aux modes correspondants, ainsi que de la forme des orbitales canoniques impliquées dans les transitions monopôles.

La première colonne de la Fig. 5.24 correspond au mode monopole à $\omega = 15,7$ MeV, dans le cas sphérique du ^{32}Mg . Il présente les états canoniques participant à la configuration 2-qp dominante, c’est-à-dire les orbitales 2 et 3 $s1/2$, ainsi que les orbitales 1 et 2 $d3/2$. Les configurations correspondantes contribuent à environ 50% de la force réponse. La deuxième colonne de la Fig. 5.24 correspond à l’excitation à $\omega = 11,8$ MeV dans ^{32}Mg , contrainte à $\beta_2 = 0,2$. La principale contribution 2-qp à ce mode implique l’état $1/2+(4)$, qui coïncide avec la composante $m = 1/2$ du $1d3/2$ dans la limite $\beta_2 = 0$. Ici, seules certaines caractéristiques de la densité de transition peuvent être reliées à la configuration 2-qp, à savoir la localisation de la densité de transition des neutrons sur l’axe radial, visible sur la 4ème orbitale $1/2+$. Il convient de noter que l’on ne peut pas s’attendre à une correspondance complète entre les principales configurations 2-qp et les densités de transition, puisque la contribution de la première n’est d’environ que de 30%.

Les troisième et quatrième colonnes de la Fig. 5.24 correspondent aux modes monopolaires de $\omega = 14,2$ MeV et $\omega = 15,1$ MeV, présents dans le ^{32}Mg contraint à $\beta_2=0,2$. Ces deux modes sont légèrement plus collectifs que ceux situés à $\omega = 11.8$ MeV et $\omega = 16.8$ MeV. La principale contribution 2-qp à la résonance située à 14,2 MeV provient de la transition $1/2+(3) \rightarrow 1/2+(5)$, où l’état $1/2+(3)$ coïncide avec l’orbitale

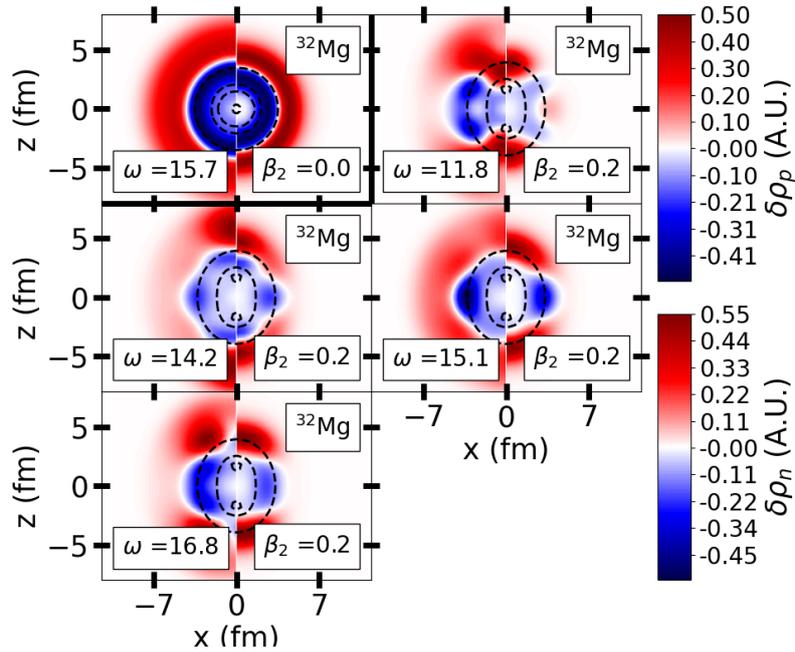


FIGURE 5.23 – Densités de transition neutron (à gauche sur chaque encart) et proton (à droite) associées à différentes résonances aux énergies ω (en MeV) du ^{32}Mg contraint aux déformations β_2 . Les lignes en noir représentent le contour de la densité totale non perturbée (i.e. la densité statique au niveau RHB) autour de laquelle le noyau oscille sous la perturbation monopolaire.

$2s_{1/2}$, dans la limite $\beta_2 = 0$. Dans ce cas encore, la forme des densités partielles associées à cette seule transition permet de comprendre les principales propriétés spatiales de la densité de transition correspondante dans la Fig.5.23, et d'interpréter ce mode comme une vibration de clusters. D'autre part, l'excitation trouvée à $\omega = 15,1$ MeV est dominée par la transition $3/2+(2) \rightarrow 3/2+(5)$, où l'état $3/2+(2)$ coïncide avec la composante $m = 3/2$ de l'orbitale $1d_{3/2}$ dans la limite $\beta_2 = 0$, ainsi qu'une contribution provenant de la transition $1/2+(4) \rightarrow 1/2+(9)$. Dans ce cas également, on peut retrouver les propriétés spatiales de la densité de transition neutronique correspondante (Fig.5.23), à savoir une contribution prononcée sur l'axe horizontal, à la forme des densités partielles canoniques. Enfin, la dernière colonne de la Fig.5.24 montre le mode à $\omega=16,8$ MeV, où l'état correspondant à la composante $1/2$ de la $2s_{1/2}$, dans la limite $\beta_2 \rightarrow 0$, est impliqué. La principale contribution 2-qp correspondante, provient de la transition $1/2+(3) \rightarrow 1/2+(7)$, avec à nouveau une forme de densité de transition, qui peut être comprise en analysant les densités partielles canoniques.

5.6 Excitation de paires

Comme mentionné dans le cas du ^{62}Ca , un autre type de mode de basse énergie apparaît en dessous de 5 MeV, dû aux corrélations d'appariement. De telles excitations ont été discutées à la fois de façon théorique et expérimentale, voir par exemple [BB66 ; BB77 ; Vit+80]. Les modes d'appariement font référence aux excitations cohérentes

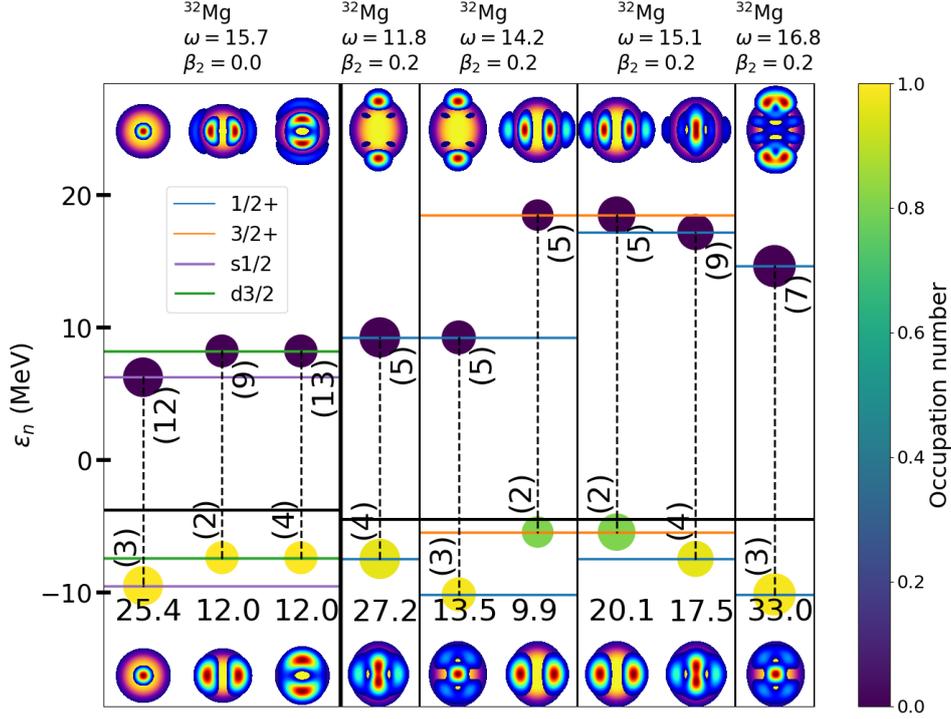


FIGURE 5.24 – Orbitales canoniques de neutrons impliquées dans les transitions monopolaires contribuant aux modes d’excitation d’énergie ω (en MeV) dans ^{32}Mg à déformation contrainte β_2 . Le pourcentage de contribution à la réponse totale est indiquée par les nombres et cercles au-dessus de chaque niveau. La couleur de ces cercles renvoie au facteur d’occupation de l’orbitale. Les nombres entre parenthèses montrent le nombre quantique principal de chaque niveau. Finalement, les densités partielles de chaque orbitale sont aussi tracées avec, en fond, la densité totale des nucléons.

impliquant des contributions particule-particule, particule-trou et trou-trou. Leurs propriétés ont été analysées dans le cadre du QRPA pour les noyaux sphériques [Kha+04; MMS05; SM11] et déformés [YYM06].

Dans la présente section, nous proposons d’étudier ces modes plus en détail en modifiant directement la force d’appariement afin de mieux comprendre les mécanismes d’émergence. La façon dont les corrélations d’appariement influencent la fonction de réponse monopolaire peut être étudiée de la même façon que dans le cas déformé, c’est-à-dire en limitant la quantité de corrélation d’appariement capturée par l’état RHB de référence et en calculant ensuite la réponse monopolaire, lorsque les corrélations d’appariement augmentent. Suivant la Réf. [DR20], la contrainte sur l’appariement est mise en œuvre en faisant varier la force de l’interaction d’appariement, de 0 à deux fois sa valeur normale, à la fois aux niveaux RHB et QFAM. Nous définissons l’énergie totale d’appariement par nucléon (E_{pair}/A) comme un paramètre d’ordre acceptable pour la transition de phase normale à superfluide et nous traçons notre résultat par rapport à cette dernière.

5.6.1 Cas sphérique

Nous nous concentrons d'abord sur l'évolution de la distribution de la réponse ISM avec les corrélations d'appariement à déformation nulle. Dès que l'énergie d'appariement atteint une valeur seuil, les dernières orbitales occupées commencent à se vider, permettant des excitations de paires à basse énergie.

Ce comportement typique est illustré dans le cas du ^{54}Ca . La Fig.5.25 montre l'évolution de la fonction de réponse avec l'énergie d'appariement par nucléon associée à l'état de référence RHB (l'énergie d'appariement totale dans l'état fondamental RHB étant de 7,6 MeV). Avec l'augmentation des corrélations d'appariement, un nouveau mode apparaît en dessous de 1 MeV, provenant du fait que l'orbitale $2p_{1/2}$ devient partiellement occupée. Ce mode apparaît déjà dans la réponse du ^{54}Ca construite sur l'état fondamental du RHB, mais avec une contribution négligeable : l'intensité maximale du ^{54}Ca , correspondant au GMR, est de $\sim 600 \text{ fm}^4 \text{ MeV}^{-1}$, alors que ce mode de basse énergie a un pic de seulement $\sim 5 \text{ fm}^4 \text{ MeV}^{-1}$. Pour d'importantes valeurs de corrélations d'appariement, cette excitation est de plus en plus forte, jusqu'à $\sim 100 \text{ fm}^4 \text{ MeV}^{-1}$ dans la gamme considérée pour les calculs contraints.

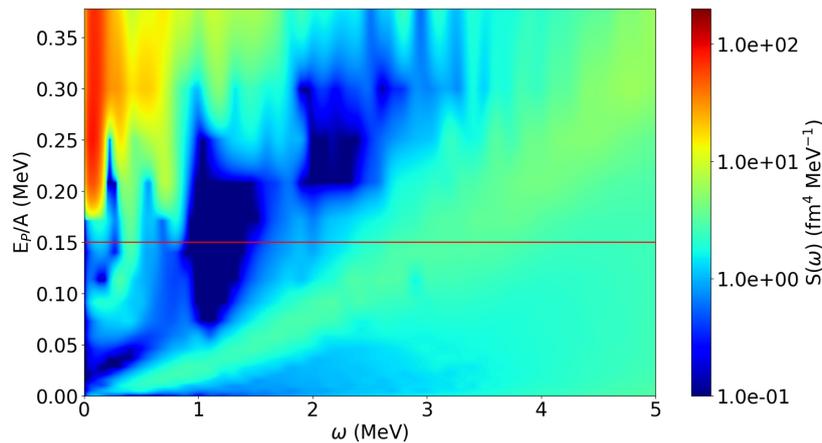


FIGURE 5.25 – Évolution de la réponse monopolaire du ^{54}Ca avec l'énergie d'appariement. La ligne rouge horizontale représente l'énergie d'appariement de l'état fondamental du ^{54}Ca .

Ce comportement typique est général et sa présence a été vérifiée dans plusieurs noyaux, à la fois dans les chaînes isotopiques du Calcium et du Nickel. La contribution des excitations de type appariement à la réponse totale reste très faible, mais augmente si l'appariement est contraint à des valeurs plus élevées. Puisque cette résonance peut être considérée comme un mode d'appariement pur : l'énergie de l'excitation devrait alors être de l'ordre de $\sim 2\Delta$, où Δ représente le gap d'appariement, ce qui explique pourquoi l'énergie d'excitation du mode d'appariement augmente avec l'énergie d'appariement elle-même. Une densité de transition typique est tracée sur la Fig.5.15 dans le coin inférieur droit pour le ^{62}Ca . L'état correspondant est également visible sur la fonction de réponse du ^{62}Ca dans la Fig. 5.13. Alors que la contribution du proton est négligeable, la partie neutronique présente un comportement similaire à ce qui a été observé pour les modes neutroniques purs à plus haute énergie, c'est-à-dire une très large oscillation de peau neutronique.

5.6.2 Impact de la déformation

L'apparition d'un mode d'appariement de très basse énergie dans les noyaux déformés et riches en neutrons a déjà été discutée dans la Réf. [YYM06] pour les excitations quadrupolaires. Dans le cas des excitations monopolaires dans les noyaux déformés, un mélange avec les modes quadrupolaires est attendu et conduira à des résultats similaires. Puisque l'apparition de corrélations d'appariement est susceptible de diminuer la déformation, cette dernière est fixée pendant le calcul afin de se concentrer sur l'effet de l'appariement seulement, en présence de structures clusterisées.

En prenant le ^{34}Mg comme représentant des noyaux légers déformés et superfluides, la Fig. 5.26 montre l'évolution de la réponse ISM correspondante avec l'énergie de corrélation et un paramètre de déformation quadrupolaire fixé à la valeur de l'état fondamental ($\beta_2 = 0.31$).

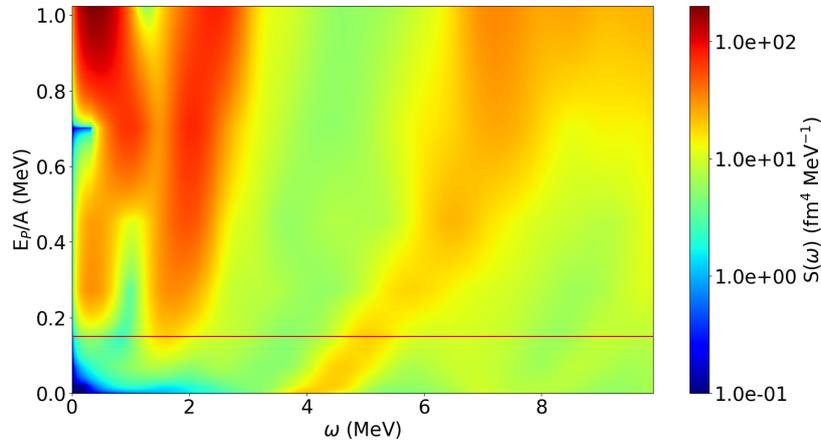


FIGURE 5.26 – Évolution de la réponse ISM du ^{34}Mg avec l'énergie d'appariement. La déformation est fixée à $\beta_2 = 0.31$ qui correspond à la déformation de l'état fondamental du noyau. La ligne rouge horizontale représente l'énergie d'appariement de l'état fondamental du ^{34}Mg .

À une énergie d'appariement nulle, quelques pics sont déjà visibles, principalement autour de 4 MeV. Cette excitation correspond à l'excitation cluster étudiée précédemment, où protons et neutrons se comportent de manière cohérente, générant des oscillations en cluster autour d'un noyau. Deux autres excitations en cluster, à 7 MeV et 9 MeV, sont présentes mais beaucoup moins fortes et à peine visibles sur la figure.

L'augmentation de l'énergie d'appariement déclenche de nouvelles résonances à très basse énergie, en dessous de 2 MeV. Elles correspondent à une excitation de paire pure. Il est intéressant de noter que ces transitions impliquent à la fois des protons et des neutrons. Un calcul de la réponse libre (sans l'interaction résiduelle) montre que la réponse proton, à ces très basses énergies, est négligeable. Par conséquent, l'interaction résiduelle joue un rôle important pour l'excitation des paires dans les noyaux riches en neutrons en impliquant les protons. Cependant, il ne s'agit pas d'une propriété générale, puisque pour la chaîne isotopique du calcium par exemple, aucune contribution des protons à la réponse n'a été trouvée.

Dans le cas du ^{34}Mg , l'origine de ces excitations peut être comprise en termes, encore une fois, d'orbitales. Pour une énergie d'appariement totale inférieure à 10 MeV, les excitations de basse énergie sont dominées par les états canoniques $3/2^+(2)$ et $1/2^-(3)$ pour les neutrons, et l'état $3/2^+(1)$ pour les protons. Pour des énergies d'appariement plus importantes, la contribution des neutrons aux modes d'appariement est dominée par les orbitales $1/2^-(3)$ et $3/2^-(2)$, tandis que la contribution des protons est dominée par les orbitales $3/2^+(1)$ et $1/2^+(2)$.

Les densités de transition des modes monopolaires de faible énergie dans le ^{34}Mg sont représentées sur la Fig.5.27. Les neutrons et les protons contribuent de manière similaire à la densité de transition pour les deux modes de plus faible énergie, c'est-à-dire les modes d'appariement ($\omega = 1,6$ MeV) et cluster ($\omega = 5$ MeV), tandis que les neutrons dominent la densité de transition dans les modes $\omega = 14$ MeV et $\omega = 16,8$ MeV, correspondant à la GMR et à sa queue de faible énergie.

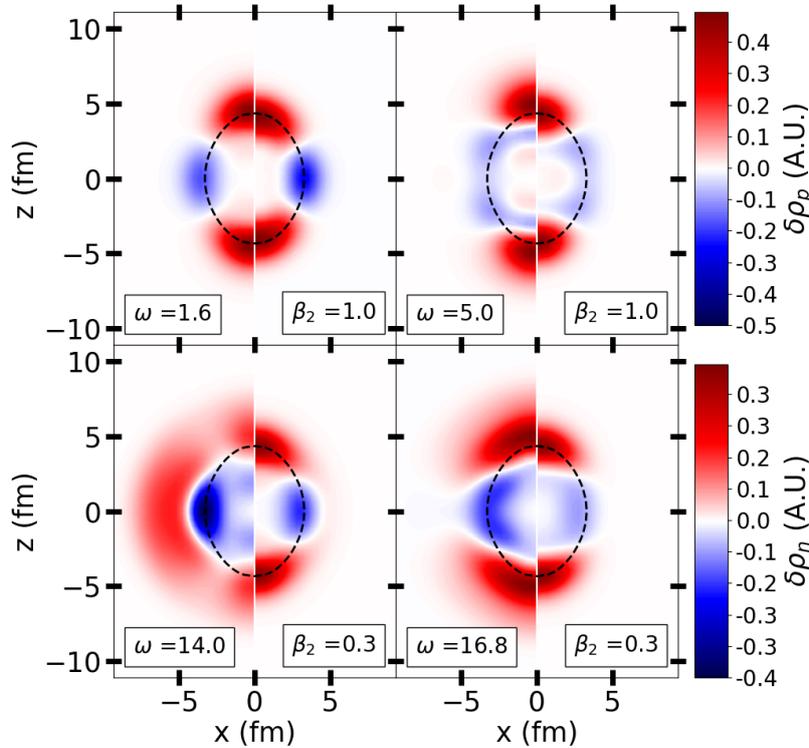


FIGURE 5.27 – Densités de transition du ^{24}Mg dans le canal ISM. Les énergies d'excitation sont données en MeV. La densité de transition en haut à gauche correspond à une excitation d'appariement, celle en haut à droite à une résonance cluster. En bas à gauche il s'agit d'une résonance de neutrons et en bas à droite d'une résonance géante. La déformation est indiquée en bas à droite de chaque graphique. La densité des neutrons est indiquée à gauche de chaque graphique, et celle des protons à droite. Les lignes noires pointillées représentent le rayon RMS pour l'état fondamental neutron et proton.

En ce qui concerne l'interaction entre les modes d'appariement et cluster, nous observons une modification de la structure de l'excitation cluster (située à $\omega = 5$ MeV dans la réponse non contrainte de l'ISM) lorsque les corrélations d'appariement deviennent

plus fortes. À partir de la décomposition du mode cluster en composantes 2-qp, nous observons une transition entre un mélange de transitions particule-trou et d'excitation de paires vers une excitation de paires pures, qui domine en raison de l'appauvrissement partiel des orbitales occupées près du niveau de Fermi.

5.7 Conclusion

L'étude des systèmes au-delà du champ moyen a été ici entreprise en utilisant le formalisme de la QRPA et en particulier de l'implémentation QFAM des équations QRPA. Cette implémentation permet, en linéarisant les champs, de considérablement réduire le coût numérique d'une approche QRPA classique. La description d'une méthode permettant de retrouver les états propres QRPA au moyen de calculs supplémentaires QFAM en intégrant les pôles de la fonction de réponse a été discutée. L'implémentation numérique de cette méthode a été détaillée et sera réutilisée dans le chapitre suivant.

L'application de cette méthode au cas des résonances de basses énergies a été entreprise dans le cas d'excitations de nature bien différentes amenant à une séparation d'échelles des différentes excitations :

- résonance de neutrons ($10 \sim 15$ MeV) : ce type de résonance est lié à l'excès de neutrons qui permet une décorrélation entre les protons et neutrons. Les neutrons proches du niveau de Fermi peuvent alors être facilement excités. Les chaînes isotopiques $Z \leq 50$ ont été étudiées et l'influence de la structure en couches et sous-couches apparaît clairement dans ces résultats. Les densités de transition de ces résonances montrent une peau de neutrons dans la plupart des cas.
- résonance cluster ($5 \sim 10$ MeV) : ce type de résonance apparaît dans les noyaux déformés à basse énergie (< 10 MeV). Du point de vue de la densité de transition, elle correspond à la vibration d'un (ou plusieurs) clusters sur un cœur. Son étude a été rendue explicite en contraignant des états RHB à différentes déformations et en calculant la réponse QFAM sur ces états.
- résonance d'appariement ($0 \sim 3$) : ce type de résonance concerne des excitations de nature particule-particule et trou-trou. L'étude de systèmes contraints à une certaine énergie d'appariement a permis d'étudier leur mécanisme d'apparition. Cependant, parmi les noyaux étudiés, très peu pourraient être de potentiels candidats dans leur état fondamental.

Ces différentes excitations sont résumées sur la Fig. 5.28.

La méthode QRPA possède des applications au-delà du seul calcul des fonctions de réponses. En particulier, le calcul des masses inertielles, quantités capturant en partie la dynamique d'un noyau, peut se faire à l'aide des modes propres QRPA. Le calcul de ces derniers, généralement extrêmement coûteux numériquement, est rendu possible dans l'implémentation QFAM. Cette méthode est présentée dans le prochain chapitre.

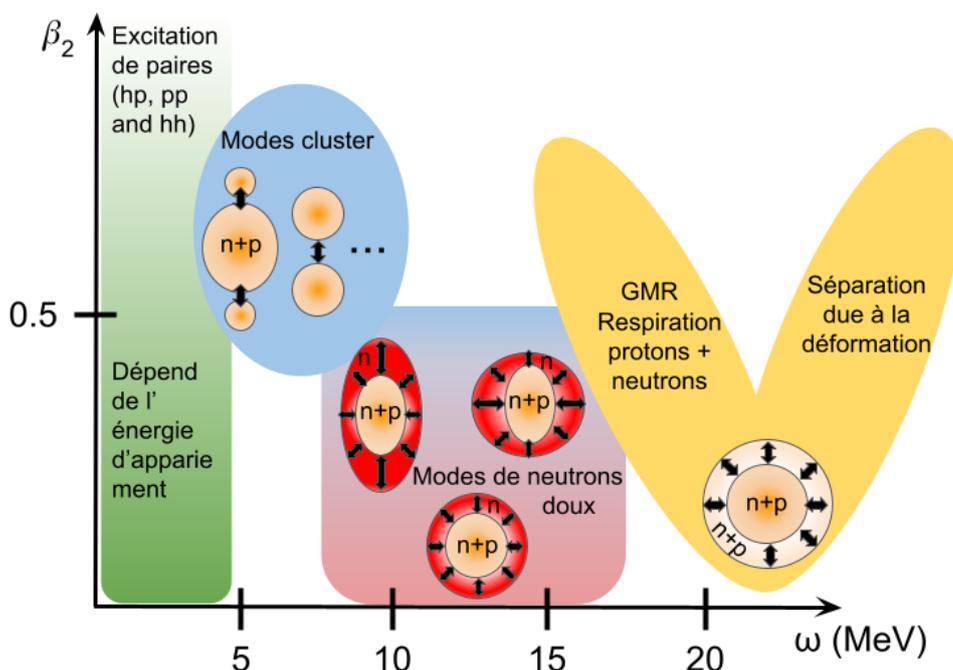


FIGURE 5.28 – Vue schématique de la fonction de réponse ISM pour les noyaux de faible masse ($N < 120$). Voir le texte pour plus de détails.

Références

- [AKR09] D. Peña ARTEAGA, E. KHAN et P. RING. « Isovector dipole strength in nuclei with extreme neutron excess ». In : *Physical Review C* 79.3 (mars 2009), p. 034311. DOI : [10.1103/PhysRevC.79.034311](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.79.034311) (cf. p. 148).
- [AN11] Paolo AVOGADRO et Takashi NAKATSUKASA. « Finite amplitude method for the quasiparticle random-phase approximation ». In : *Physical Review C* 84.1 (15 juill. 2011), p. 014314. DOI : [10.1103/PhysRevC.84.014314](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.84.014314) (cf. p. 117, 120, 121).
- [Bar+08] Andrzej BARAN et al. « Broyden's method in nuclear structure calculations ». In : *Physical Review C* 78.1 (24 juill. 2008), p. 014318. DOI : [10.1103/PhysRevC.78.014318](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.78.014318) (cf. p. 125).
- [BB66] D. R. BÈS et R. A. BROGLIA. « Pairing vibrations ». en. In : *Nuclear Physics* 80.2 (mai 1966), p. 289-313. ISSN : 0029-5582. DOI : [10.1016/0029-5582\(66\)90090-3](https://doi.org/10.1016/0029-5582(66)90090-3) (cf. p. 116, 152).
- [BB77] R. A. BROGLIA et D. R. BES. « High-lying pairing resonances ». en. In : *Physics Letters B* 69.2 (août 1977), p. 129-133. ISSN : 0370-2693. DOI : [10.1016/0370-2693\(77\)90625-6](https://doi.org/10.1016/0370-2693(77)90625-6) (cf. p. 116, 152).
- [Bec+06] E. BECHEVA et al. « $N = 14$ Shell Closure in ^{22}O Viewed through a Neutron Sensitive Probe ». In : *Physical Review Letters* 96.1 (jan. 2006), p. 012501. DOI : [10.1103/PhysRevLett.96.012501](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.96.012501) (cf. p. 148).

- [Ber76] F E BERTRAND. « Excitation of Giant Multipole Resonances through Inelastic Scattering ». In : *Annual Review of Nuclear Science* 26.1 (1976), p. 457-509. DOI : [10.1146/annurev.ns.26.120176.002325](https://doi.org/10.1146/annurev.ns.26.120176.002325) (cf. p. 115).
- [BK47] G. C. BALDWIN et G. S. KLAIBER. « Photo-Fission in Heavy Elements ». In : *Physical Review* 71.1 (1^{er} jan. 1947), p. 3-10. DOI : [10.1103/PhysRev.71.3](https://doi.org/10.1103/PhysRev.71.3) (cf. p. 115).
- [Bla+95] J. P. BLAIZOT et al. « Microscopic and macroscopic determinations of nuclear compressibility ». In : *Nuclear Physics A* 591.3 (1995), p. 435-457. ISSN : 0375-9474. DOI : [10.1016/0375-9474\(95\)00294-B](https://doi.org/10.1016/0375-9474(95)00294-B) (cf. p. 115).
- [BN20] A. BJELČIĆ et T. NIKŠIĆ. « Implementation of the quasiparticle finite amplitude method within the relativistic self-consistent mean-field framework : The program DIRQFAM ». In : *Computer Physics Communications* 253 (2020), p. 107184. ISSN : 0010-4655. DOI : [10.1016/j.cpc.2020.107184](https://doi.org/10.1016/j.cpc.2020.107184) (cf. p. 121, 125).
- [BP51] David BOHM et David PINES. « A Collective Description of Electron Interactions. I. Magnetic Interactions ». In : *Physical Review* 82.5 (1951), p. 625-634. DOI : [10.1103/PhysRev.82.625](https://doi.org/10.1103/PhysRev.82.625) (cf. p. 116).
- [BP53] David BOHM et David PINES. « A Collective Description of Electron Interactions : III. Coulomb Interactions in a Degenerate Electron Gas ». In : *Physical Review* 92.3 (1^{er} nov. 1953), p. 609-625. DOI : [10.1103/PhysRev.92.609](https://doi.org/10.1103/PhysRev.92.609) (cf. p. 116).
- [BT75] G. F. BERTSCH et S. F. TSAI. « A study of the nuclear response function ». In : *Physics Reports* 18.2 (1975), p. 125-158. ISSN : 0370-1573. DOI : [10.1016/0370-1573\(75\)90003-4](https://doi.org/10.1016/0370-1573(75)90003-4) (cf. p. 116).
- [Che+07] M. CHERNYKH et al. « Structure of the Hoyle State in ^{12}C ». In : *Physical Review Letters* 98.3 (jan. 2007), p. 032501. DOI : [10.1103/PhysRevLett.98.032501](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.98.032501) (cf. p. 116, 133).
- [CK15] Y. CHIBA et M. KIMURA. « Cluster states and isoscalar monopole transitions of ^{24}Mg ». In : *Physical Review C* 91.6 (juin 2015), p. 061302. DOI : [10.1103/PhysRevC.91.061302](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.91.061302) (cf. p. 116, 133).
- [CKT16] Y. CHIBA, M. KIMURA et Y. TANIGUCHI. « Isoscalar dipole transition as a probe for asymmetric clustering ». In : *Physical Review C* 93.3 (mars 2016), p. 034319. DOI : [10.1103/PhysRevC.93.034319](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.93.034319) (cf. p. 116, 133).
- [DB87] P. DESCOUVEMONT et D. BAYE. « Microscopic theory of the $^8\text{Be}\alpha, \gamma^{12}\text{C}$ reaction in a three-cluster model ». In : *Physical Review C* 36.1 (juill. 1987), p. 54-59. DOI : [10.1103/PhysRevC.36.54](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.36.54) (cf. p. 116, 133).
- [Del+12] D. S. DELION et al. « Shell model plus cluster description of negative parity states in ^{212}Po ». In : *Physical Review C* 85.6 (juin 2012), p. 064306. DOI : [10.1103/PhysRevC.85.064306](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.85.064306) (cf. p. 116, 133).

- [DPM17] I. DELONCLE, S. PÉRU et M. MARTINI. « Electromagnetic dipole and Gamow-Teller responses of even and odd ${}_{40}^{90-94}\text{Zr}$ isotopes in QRPA calculations with the D1M Gogny force ». en. In : *The European Physical Journal A* 53.8 (août 2017), p. 170. ISSN : 1434-601X. DOI : [10.1140/epja/i2017-12354-x](https://doi.org/10.1140/epja/i2017-12354-x) (cf. p. [135](#), [136](#)).
- [DR20] T. DUGUET et W. RYSSENS. « Zero-pairing and zero-temperature limits of finite-temperature Hartree-Fock-Bogoliubov theory ». In : *Physical Review C* 102.4 (27 oct. 2020), p. 044328. DOI : [10.1103/PhysRevC.102.044328](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.102.044328) (cf. p. [153](#)).
- [EC59] H. EHRENREICH et M. H. COHEN. « Self-Consistent Field Approach to the Many-Electron Problem ». In : *Physical Review* 115.4 (1959), p. 786-790. DOI : [10.1103/PhysRev.115.786](https://doi.org/10.1103/PhysRev.115.786) (cf. p. [116](#)).
- [Eng+99] J. ENGEL et al. « β decay rates of r-process waiting-point nuclei in a self-consistent approach ». In : *Physical Review C* 60.1 (16 juin 1999), p. 014302. DOI : [10.1103/PhysRevC.60.014302](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.60.014302) (cf. p. [116](#)).
- [FT72] S. FUKUDA et Y. TORIZUKA. « Giant Multipole Resonances in ${}^{90}\text{Zr}$ Observed by Inelastic Electron Scattering ». In : *Physical Review Letters* 29.16 (16 oct. 1972), p. 1109-1111. DOI : [10.1103/PhysRevLett.29.1109](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.29.1109) (cf. p. [115](#)).
- [GGs19] D. GAMBACURTA, M. GRASSO et O. SORLIN. « Soft breathing modes in neutron-rich nuclei with the subtracted second random-phase approximation ». In : *Physical Review C* 100.1 (juill. 2019), p. 014317. DOI : [10.1103/PhysRevC.100.014317](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.100.014317) (cf. p. [142](#), [143](#)).
- [Gia+03] G. GIAMBRONE et al. « Collective excitations in superfluid nuclei with finite-range interactions ». In : *Nuclear Physics A* 726.1 (6 oct. 2003), p. 3-36. ISSN : 0375-9474. DOI : [10.1016/S0375-9474\(03\)01602-6](https://doi.org/10.1016/S0375-9474(03)01602-6) (cf. p. [117](#)).
- [Gup+15] Y. K. GUPTA et al. « Splitting of ISGMR strength in the light-mass nucleus ${}^{24}\text{Mg}$ due to ground-state deformation ». en. In : *Physics Letters B* 748 (sept. 2015), p. 343-346. ISSN : 0370-2693. DOI : [10.1016/j.physletb.2015.07.021](https://doi.org/10.1016/j.physletb.2015.07.021) (cf. p. [116](#), [133](#)).
- [Gup+16] Y. K. GUPTA et al. « Deformation effects on isoscalar giant resonances in ${}^{24}\text{Mg}$ ». In : *Physical Review C* 93.4 (avr. 2016), p. 044324. DOI : [10.1103/PhysRevC.93.044324](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.93.044324) (cf. p. [139](#)).
- [Har+77] M. N. HARAKEH et al. « Direct Evidence for a New Giant Resonance at $80A^{-1/3}$ MeV in the Lead Region ». In : *Physical Review Letters* 38.13 (28 mars 1977), p. 676-679. DOI : [10.1103/PhysRevLett.38.676](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.38.676) (cf. p. [115](#)).
- [HS14] Ikuko HAMAMOTO et Hiroyuki SAGAWA. « Self-consistent Hartree-Fock and RPA Green's function method indicate no pygmy resonance in the monopole response of neutron-rich Ni isotopes ». In : *Physical Review C* 90.3 (sept. 2014), p. 031302. DOI : [10.1103/PhysRevC.90.031302](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.90.031302) (cf. p. [145](#)).

- [HSZ97] I. HAMAMOTO, H. SAGAWA et X. Z. ZHANG. « Giant monopole resonances in nuclei near stable and drip lines ». In : *Physical Review C* 56.6 (déc. 1997), p. 3121-3133. DOI : [10.1103/PhysRevC.56.3121](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.56.3121) (cf. p. 142).
- [HW01] M. N. HARAKEH et Adriaan WOUDE. *Giant Resonances : Fundamental High-frequency Modes of Nuclear Excitation*. Oxford University Press, 2001. 658 p. ISBN : 978-0-19-851733-7 (cf. p. 114, 148).
- [HY03] Masayasu HARADA et Koichi YAMAWAKI. « Hidden Local Symmetry at Loop – A New Perspective of Composite Gauge Boson and Chiral Phase Transition – ». In : *Physics Reports* 381.1 (juill. 2003), p. 1-233. ISSN : 03701573. DOI : [10.1016/S0370-1573\(03\)00139-X](https://doi.org/10.1016/S0370-1573(03)00139-X). arXiv : [hep-ph/0302103](https://arxiv.org/abs/hep-ph/0302103) (cf. p. 114, 115).
- [INY11] Tsunenori INAKURA, Takashi NAKATSUKASA et Kazuhiro YABANA. « Emergence of pygmy dipole resonances : Magic numbers and neutron skins ». In : *Physical Review C* 84.2 (août 2011), p. 021302. DOI : [10.1103/PhysRevC.84.021302](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.84.021302) (cf. p. 121).
- [Ito11] Makoto ITO. « Imprint of adiabatic structures in monopole excitations of ^{12}Be ». In : *Physical Review C* 83.4 (avr. 2011), p. 044319. DOI : [10.1103/PhysRevC.83.044319](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.83.044319) (cf. p. 116, 133).
- [JL76] W. R. JOHNSON et C. D. LIN. « Relativistic random phase approximation applied to atoms of the He isoelectronic sequence ». In : *Physical Review A* 14.2 (1976), p. 565-575. DOI : [10.1103/PhysRevA.14.565](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.14.565) (cf. p. 116).
- [Joh+80] W. R. JOHNSON et al. « Relativistic Random-Phase Approximation ». In : *Physica Scripta* 21.3 (jan. 1980), p. 409-422. ISSN : 1402-4896. DOI : [10.1088/0031-8949/21/3-4/029](https://doi.org/10.1088/0031-8949/21/3-4/029) (cf. p. 116).
- [Kam81] M. KAMIMURA. « Transition densities between the $01+$, $21+$, $41+$, $02+$, $22+$, $11-$ and $31-$ states in ^{12}C derived from the three-alpha resonating-group wave functions ». en. In : *Nuclear Physics A* 351.3 (jan. 1981), p. 456-480. ISSN : 0375-9474. DOI : [10.1016/0375-9474\(81\)90182-2](https://doi.org/10.1016/0375-9474(81)90182-2) (cf. p. 116, 133).
- [Kan16] Yoshiko KANADA-EN'YO. « Isoscalar monopole and dipole excitations of cluster states and giant resonances in ^{12}C ». In : *Physical Review C* 93.5 (mai 2016), p. 054307. DOI : [10.1103/PhysRevC.93.054307](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.93.054307) (cf. p. 116, 133).
- [KH11] Yoshiko KANADA-EN'YO et Yoshimasa HIDAHA. « α -cluster structure and density waves in oblate nuclei ». In : *Physical Review C* 84.1 (juill. 2011), p. 014313. DOI : [10.1103/PhysRevC.84.014313](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.84.014313) (cf. p. 137).
- [Kha+04] E. KHAN et al. « Two-neutron transfer in nuclei close to the drip line ». In : *Physical Review C* 69.1 (jan. 2004), p. 014314. DOI : [10.1103/PhysRevC.69.014314](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.69.014314) (cf. p. 116, 153).
- [Kim04] Masaaki KIMURA. « Deformed-basis antisymmetrized molecular dynamics and its application to ^{20}Ne ». In : *Physical Review C* 69.4 (avr. 2004), p. 044319. DOI : [10.1103/PhysRevC.69.044319](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.69.044319) (cf. p. 116, 133).

- [KO20] Yoshiko KANADA-EN'YO et Kazuyuki OGATA. « Cluster structures and monopole transitions of ^{14}C ». In : *Physical Review C* 101.1 (jan. 2020), p. 014317. DOI : [10.1103/PhysRevC.101.014317](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.101.014317) (cf. p. [116](#), [133](#)).
- [Kre+77] S. KREWALD et al. « On the use of Skyrme forces in self-consistent RPA calculations ». In : *Nuclear Physics A* 281.2 (1977), p. 166-206. ISSN : 0375-9474. DOI : [10.1016/0375-9474\(77\)90019-7](https://doi.org/10.1016/0375-9474(77)90019-7) (cf. p. [116](#)).
- [KS19] Yoshiko KANADA-EN'YO et Yuki SHIKATA. « Isoscalar dipole excitations in ^{16}O ». In : *Physical Review C* 100.1 (juill. 2019), p. 014301. DOI : [10.1103/PhysRevC.100.014301](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.100.014301) (cf. p. [116](#), [133](#)).
- [LB72] M. B. LEWIS et F. E. BERTRAND. « Evidence from inelastic proton scattering for a giant quadrupole vibration in spherical nuclei ». In : *Nuclear Physics A* 196.2 (27 nov. 1972), p. 337-346. ISSN : 0375-9474. DOI : [10.1016/0375-9474\(72\)90968-2](https://doi.org/10.1016/0375-9474(72)90968-2) (cf. p. [115](#)).
- [LCY01] Y.-W. LUI, H. L. CLARK et D. H. YOUNGBLOOD. « Giant resonances in ^{16}O ». In : *Physical Review C* 64.6 (nov. 2001), p. 064308. DOI : [10.1103/PhysRevC.64.064308](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.64.064308) (cf. p. [116](#), [133](#)).
- [Lia+13] Haozhao LIANG et al. « Feasibility of the finite-amplitude method in covariant density functional theory ». In : *Physical Review C* 87.5 (2013), p. 054310. DOI : [10.1103/PhysRevC.87.054310](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.87.054310) (cf. p. [121](#)).
- [LV76] K. F. LIU et Nguyen VAN GIAI. « A self-consistent microscopic description of the giant resonances including the particle continuum ». In : *Physics Letters B* 65.1 (25 oct. 1976), p. 23-26. ISSN : 0370-2693. DOI : [10.1016/0370-2693\(76\)90525-6](https://doi.org/10.1016/0370-2693(76)90525-6) (cf. p. [116](#)).
- [MEK22] F. MERCIER, J.-P. EBRAN et E. KHAN. « Low-energy monopole strength in spherical and axially deformed nuclei : Cluster and soft modes ». In : *Physical Review C* 105.3 (30 mars 2022), p. 034343. DOI : [10.1103/PhysRevC.105.034343](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.105.034343) (cf. p. [111](#), [141](#)).
- [Mer+21] F. MERCIER et al. « Low-energy cluster modes in $N=Z$ nuclei ». In : *Physical Review C* 103.2 (1^{er} fév. 2021), p. 024303. DOI : [10.1103/PhysRevC.103.024303](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.103.024303) (cf. p. [111](#), [126](#), [136](#)).
- [MMS05] M. MATSUO, K. MIZUYAMA et Y. SERIZAWA. « Di-neutron correlations in medium-mass neutron-rich nuclei near the dripline ». en. In : *The European Physical Journal A - Hadrons and Nuclei* 25.1 (sept. 2005), p. 563-565. ISSN : 1434-601X. DOI : [10.1140/epjad/i2005-06-045-9](https://doi.org/10.1140/epjad/i2005-06-045-9) (cf. p. [116](#), [153](#)).
- [Nik+13] T. NIKŠIĆ et al. « Implementation of the finite amplitude method for the relativistic quasiparticle random-phase approximation ». In : *Physical Review C* 88.4 (25 oct. 2013), p. 044327. DOI : [10.1103/PhysRevC.88.044327](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.88.044327) (cf. p. [117](#)).
- [NIY07] Takashi NAKATSUKASA, Tsunenori INAKURA et Kazuhiro YABANA. « Finite amplitude method for the solution of the random-phase approximation ». In : *Physical Review C* 76.2 (27 août 2007), p. 024318. DOI : [10.1103/PhysRevC.76.024318](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.76.024318) (cf. p. [117](#), [120](#), [121](#)).

- [NVR11] T. NIKŠIĆ, D. VRETENAR et P. RING. « Relativistic nuclear energy density functionals : Mean-field and beyond ». In : *Progress in Particle and Nuclear Physics* 66.3 (1^{er} juill. 2011), p. 519-548. ISSN : 0146-6410. DOI : [10.1016/j.ppnp.2011.01.055](https://doi.org/10.1016/j.ppnp.2011.01.055) (cf. p. 113).
- [Paa+03] N. PAAR et al. « Quasiparticle random phase approximation based on the relativistic Hartree-Bogoliubov model ». In : *Physical Review C* 67.3 (24 mars 2003), p. 034312. DOI : [10.1103/PhysRevC.67.034312](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.67.034312) (cf. p. 117).
- [PB52] David PINES et David BOHM. « A Collective Description of Electron Interactions : II. Collective vs Individual Particle Aspects of the Interactions ». In : *Physical Review* 85.2 (15 jan. 1952), p. 338-353. DOI : [10.1103/PhysRev.85.338](https://doi.org/10.1103/PhysRev.85.338) (cf. p. 116).
- [Pie17] J. PIEKAREWICZ. « Emergence of low-energy monopole strength in the neutron-rich calcium isotopes ». In : *Physical Review C* 96.4 (oct. 2017), p. 044314. DOI : [10.1103/PhysRevC.96.044314](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.96.044314) (cf. p. 142).
- [PW71] R. PITTHAN et Th. WALCHER. « Inelastic electron scattering in the giant resonance region of La, Ce and Pr ». In : *Physics Letters B* 36.6 (18 oct. 1971), p. 563-564. ISSN : 0370-2693. DOI : [10.1016/0370-2693\(71\)90090-6](https://doi.org/10.1016/0370-2693(71)90090-6) (cf. p. 115).
- [QF78] P QUENTIN et H FLOCARD. « Self-Consistent Calculations of Nuclear Properties with Phenomenological Effective Forces ». In : *Annual Review of Nuclear and Particle Science* 28.1 (1978), p. 523-594. DOI : [10.1146/annurev.ns.28.120178.002515](https://doi.org/10.1146/annurev.ns.28.120178.002515) (cf. p. 116).
- [ROW68] D. J. ROWE. « Equations-of-Motion Method and the Extended Shell Model ». In : *Reviews of Modern Physics* 40.1 (1^{er} jan. 1968), p. 153-166. DOI : [10.1103/RevModPhys.40.153](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.40.153) (cf. p. 116, 117).
- [RS80] Peter RING et Peter SCHUCK. *The Nuclear Many-Body Problem. Theoretical and Mathematical Physics, The Nuclear Many-Body Problem*. Berlin Heidelberg : Springer-Verlag, 1980. ISBN : 978-3-540-21206-5 (cf. p. 115, 120).
- [Saw+57] K. SAWADA et al. « Correlation Energy of an Electron Gas at High Density : Plasma Oscillations ». In : *Physical Review* 108.3 (1^{er} nov. 1957), p. 507-514. DOI : [10.1103/PhysRev.108.507](https://doi.org/10.1103/PhysRev.108.507) (cf. p. 116).
- [Saw57] Katurō SAWADA. « Correlation Energy of an Electron Gas at High Density ». In : *Physical Review* 106.2 (1957), p. 372-383. DOI : [10.1103/PhysRev.106.372](https://doi.org/10.1103/PhysRev.106.372) (cf. p. 116).
- [Saw61] J. SAWICKI. « Notes on the theory of vibrational states of systems of fermions (I) ». In : *Nuclear Physics* 23 (1961), p. 285-295. ISSN : 0029-5582. DOI : [10.1016/0029-5582\(61\)90257-7](https://doi.org/10.1016/0029-5582(61)90257-7) (cf. p. 116).
- [Saw62] J. SAWICKI. « Higher Random Phase Approximation and Energy Spectra of Spherical Nuclei ». In : *Physical Review* 126.6 (1962), p. 2231-2238. DOI : [10.1103/PhysRev.126.2231](https://doi.org/10.1103/PhysRev.126.2231) (cf. p. 116).

- [SD80] P. SHORER et A. DALGARNO. « Applications of the Relativistic Random Phase Approximation ». In : *Physica Scripta* 21.3 (jan. 1980), p. 432-435. ISSN : 1402-4896. DOI : [10.1088/0031-8949/21/3-4/031](https://doi.org/10.1088/0031-8949/21/3-4/031) (cf. p. 116).
- [SH89] Y. SUZUKI et S. HARA. « Isoscalar monopole and quadrupole strength of ^{16}O in an $\alpha+^{12}\text{C}$ cluster and symplectic mixed basis ». In : *Physical Review C* 39.2 (fév. 1989), p. 658-665. DOI : [10.1103/PhysRevC.39.658](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.39.658) (cf. p. 116, 133).
- [SM11] Hirotaka SHIMOYAMA et Masayuki MATSUO. « Anomalous pairing vibration in neutron-rich Sn isotopes beyond the $N = 82$ magic number ». In : *Physical Review C* 84.4 (oct. 2011), p. 044317. DOI : [10.1103/PhysRevC.84.044317](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.84.044317) (cf. p. 153).
- [SS61] Jerzy SAWICKI et Toshio SODA. « Theory of collective excitations of spherical nuclei with particular application to the giant dipole state ». In : *Nuclear Physics* 28.2 (1961), p. 270-292. ISSN : 0029-5582. DOI : [10.1016/0029-5582\(61\)90051-7](https://doi.org/10.1016/0029-5582(61)90051-7) (cf. p. 116).
- [Sto+11] M. STOITSOV et al. « Monopole strength function of deformed superfluid nuclei ». In : *Physical Review C* 84.4 (21 oct. 2011), p. 041305. DOI : [10.1103/PhysRevC.84.041305](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.84.041305) (cf. p. 117, 121).
- [TA78] T. TOMODA et A. ARIMA. « Coexistence of shell structure and cluster structure in ^{20}Ne ». en. In : *Nuclear Physics A* 303.1 (juin 1978), p. 217-253. ISSN : 0375-9474. DOI : [10.1016/0375-9474\(78\)90052-0](https://doi.org/10.1016/0375-9474(78)90052-0) (cf. p. 116, 133).
- [Ueg+79] Eiji UEGAKI et al. « Structure of the Excited States in ^{12}C . II ». en. In : *Progress of Theoretical Physics* 62.6 (déc. 1979), p. 1621-1640. ISSN : 0033-068X. DOI : [10.1143/PTP.62.1621](https://doi.org/10.1143/PTP.62.1621) (cf. p. 116, 133).
- [Van+14] M. VANDEBROUCK et al. « Measurement of the Isoscalar Monopole Response in the Neutron-Rich Nucleus ^{68}Ni ». In : *Physical Review Letters* 113.3 (juill. 2014), p. 032504. DOI : [10.1103/PhysRevLett.113.032504](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.113.032504) (cf. p. 116, 133, 145).
- [Vit+80] A. VITTURI et al. « Analysis of $(6\text{Li}, d)$ and $(d, 6\text{Li})$ reactions in the nickel and tin regions ». en. In : *Nuclear Physics A* 340.1 (mai 1980), p. 183-204. ISSN : 0375-9474. DOI : [10.1016/0375-9474\(80\)90330-9](https://doi.org/10.1016/0375-9474(80)90330-9) (cf. p. 116, 152).
- [VR20] Marc VERRIERE et David REGNIER. « The Time-Dependent Generator Coordinate Method in Nuclear Physics ». In : *Frontiers in Physics* 8 (2020). ISSN : 2296-424X (cf. p. 113).
- [Won75] Chun Wa WONG. « Generator-coordinate methods in nuclear physics ». In : *Physics Reports* 15.5 (1^{er} jan. 1975), p. 283-357. ISSN : 0370-1573. DOI : [10.1016/0370-1573\(75\)90036-8](https://doi.org/10.1016/0370-1573(75)90036-8) (cf. p. 113).
- [Yil+06] S. YILDIZ et al. « α -decaying states ^{18}O , ^{20}Ne and ^{22}Ne in ^{18}O beam induced reactions ». In : *Physical Review C* 73.3 (mars 2006), p. 034601. DOI : [10.1103/PhysRevC.73.034601](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.73.034601) (cf. p. 116, 133).

- [YLC02] D. H. YOUNGBLOOD, Y.-W. LUI et H. L. CLARK. « Isoscalar giant resonances in ^{28}Si and the mass dependence of nuclear compressibility ». In : *Physical Review C* 65.3 (fév. 2002), p. 034302. DOI : [10.1103/PhysRevC.65.034302](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.65.034302) (cf. p. 116, 133).
- [YLC97] D. H. YOUNGBLOOD, Y.-W. LUI et H. L. CLARK. « Giant monopole resonance strength in ^{40}Ca ». In : *Physical Review C* 55.6 (juin 1997), p. 2811-2818. DOI : [10.1103/PhysRevC.55.2811](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.55.2811) (cf. p. 116, 133).
- [YLC98] D. H. YOUNGBLOOD, Y.-W. LUI et H. L. CLARK. « High lying E_0 strength in ^{12}C ». In : *Physical Review C* 57.5 (mai 1998), p. 2748-2751. DOI : [10.1103/PhysRevC.57.2748](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.57.2748) (cf. p. 116, 133).
- [Yos10] Kenichi YOSHIDA. « Roles of deformation and neutron excess on the giant monopole resonance in neutron-rich Zr isotopes ». In : *Physical Review C* 82.3 (sept. 2010), p. 034324. DOI : [10.1103/PhysRevC.82.034324](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.82.034324) (cf. p. 116).
- [You+77] D. H. YOUNGBLOOD et al. « Isoscalar Breathing-Mode State in ^{144}Sm and ^{208}Pb ». In : *Physical Review Letters* 39.19 (7 nov. 1977), p. 1188-1191. DOI : [10.1103/PhysRevLett.39.1188](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.39.1188) (cf. p. 115).
- [YYM06] Kenichi YOSHIDA, Masayuki YAMAGAMI et Kenichi MATSUYANAGI. « Dynamic pairing effects on low-frequency modes of excitation in deformed Mg isotopes close to the neutron drip line ». en. In : *Physica Scripta* T125 (juin 2006), p. 45-48. ISSN : 1402-4896. DOI : [10.1088/0031-8949/2006/T125/010](https://doi.org/10.1088/0031-8949/2006/T125/010) (cf. p. 116, 153, 155).
- [ZSN16] C. L. ZHANG, B. SCHUETRUMPF et W. NAZAREWICZ. « Nucleon localization and fragment formation in nuclear fission ». In : *Physical Review C* 94.6 (27 déc. 2016), p. 064323. DOI : [10.1103/PhysRevC.94.064323](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.94.064323) (cf. p. 134).

Étude de la radioactivité d'un point de vue microscopique

Ce chapitre est partiellement adapté des travaux décrits dans F. Mercier et al. (2020) [Mer+20] concernant les résultats sur la radioactivité α dans les noyaux de masses intermédiaires et F. Mercier et al. (2021) [Mer+21] pour les travaux portant sur les radioactivités α et 2α dans les noyaux lourds. Des résultats complémentaires sont aussi présentés.

Sommaire

6.1	Aperçu des formalismes	169
6.1.1	Dynamique collective de grandes amplitudes	169
6.1.2	Description microscopique du phénomène de radioactivité	170
6.1.3	Aspects numériques	172
6.2	Masses inertielles avec ATDHFB	173
6.2.1	ATDHFB	173
6.2.2	Masse collective inertielle	175
6.2.3	Approximation crankée perturbatif	175
6.2.4	Calcul du chemin	176
6.3	Masses inertielles avec ASCC et QFAM	178
6.3.1	Formalisme ASCC	179
6.3.2	Application	180
6.4	Radioactivité α dans les noyaux de masses intermédiaires :	
	cas de la chaîne $^{108}\text{Xe} \rightarrow ^{104}\text{Te} \rightarrow ^{100}\text{Sn}$	181
6.4.1	Cas du ^{108}Xe	182
6.4.2	Cas du ^{104}Te	183
6.5	Radioactivité α, cluster et 2α dans les noyaux lourds	184
6.5.1	Difficulté et approche géométrique	185

6.5.2	Radioactivité α dans le ^{212}Po	188
6.5.3	Radioactivité α et cluster dans le ^{224}Ra	189
6.5.4	Radioactivité 2α	191
6.5.5	Discussion sur la présence d'une barrière de potentiel	195
6.6	Conclusion	197
	Références	199

La description entièrement microscopique de la radioactivité α pose un problème complexe et difficile de mécanique quantique. De nombreux modèles permettant l'étude du processus de désintégration α ont été développés au cours du siècle dernier, allant des approches semi-classiques aux approches microscopiques. L'un des premiers modèles concluant a été la loi de Geiger-Nuttall [GN11] et son interprétation impliquant l'effet tunnel par Gamow [Gam28], ainsi que la classe des modèles WKB (Wentzel, Kramers and Brillouin) [Del10]. D'un point de vue expérimental, même l'identification de tous les noyaux émetteurs α n'a peut-être pas (sûrement pas) encore été réalisée, comme l'a montré la découverte d'une émission α du ^{209}Bi en 2003 [MER03], ou la question restante d'une éventuelle radioactivité du ^{208}Pb [Bee+13].

Plusieurs études récentes ont été consacrées à une description plus microscopique de ce processus, mettant en jeu, par exemple, un facteur de préformation α obtenu à partir des états à une particule calculés à partir d'un modèle en couche [BN12]. Des approches microscopiques-macroscopiques obtenues en utilisant des potentiels de Woods-Saxon ont également été développées et prennent en compte un potentiel de surface supplémentaire de type "pocket" [BD16], ou une trajectoire de moindre énergie pour décrire les émissions α et cluster, ainsi que la fission du ^{222}Ra [MBS17]. Parmi les approches entièrement microscopiques, il existe des études récentes sur l'émission cluster de noyaux lourds à l'aide d'une méthode auto-cohérente Hartree-Fock-Bogoliubov utilisant la fonctionnelle de Gogny [WR11; WZR18]. La description du phénomène de radioactivité α ne disposait pas, jusqu'à présent, d'une telle description entièrement microscopique.

Les fonctionnelles énergie-densité et, en particulier, les EDF relativistes fournissent un cadre naturel pour les études de désintégration α . Elles ont été utilisées pour décrire avec succès la formation des états cluster α dans les noyaux légers [Ebr+12; Ebr+13; Ebr+14b; Ebr+14a; ZIM15; Zho+16], y compris avec une comparaison quantitative des spectres expérimentaux des états cluster dans les isotopes du Ne [MHG18], et l'état de Hoyle dans le ^{12}C [Mar+19]. Par conséquent, il pourrait être intéressant d'étudier la radioactivité α à l'aide de modèles EDF relativistes. D'une part, cette approche permet de décrire la formation des clusters α , et sa relation qualitative avec l'émission α [Ebr+18]. D'autre part, elle a déjà été appliquée avec succès à la dynamique de la fission spontanée et induite [Zha+15; Zha+16; Tao+17; Zha+19a; Zha+19b]. Un premier aperçu des formalismes et de la méthode générale utilisée ici pour décrire les différents types de radioactivité de façon microscopique sont présentés dans la Sec.6.1. Le formalisme associé à l'approche dépendante du temps HFB dans l'approximation adiabatique (ATDHFB) est ensuite détaillée dans la Sec.6.2. Une seconde approche fondée sur la méthode des coordonnées collectives auto-cohérentes est présentée en Sec.6.3.

Le phénomène de radioactivité α ne pouvant avoir lieu de manière spontanée seulement si le Q de réaction est positif, il est tout d’abord intéressant d’étudier l’ensemble des noyaux candidats. Une carte des $Q_\alpha > 0$ est ainsi présentée sur la Fig.6.1. Une telle carte permet de cibler les noyaux d’intérêt à décrire. En particulier, dans la suite, nous nous intéressons à deux régions de cette carte : i) dans les noyaux de masse intermédiaire avec l’étude du ^{104}Te dans la Sec.6.4 et ^{108}Xe et ii) dans les noyaux plus lourds autour du ^{212}Po et ^{224}Ra en Sec.6.5. La radioactivité cluster dans ces noyaux lourds sera aussi étudiée ainsi qu’un nouveau mode de radioactivité où deux particules α sont émises simultanément de façon symétrique.

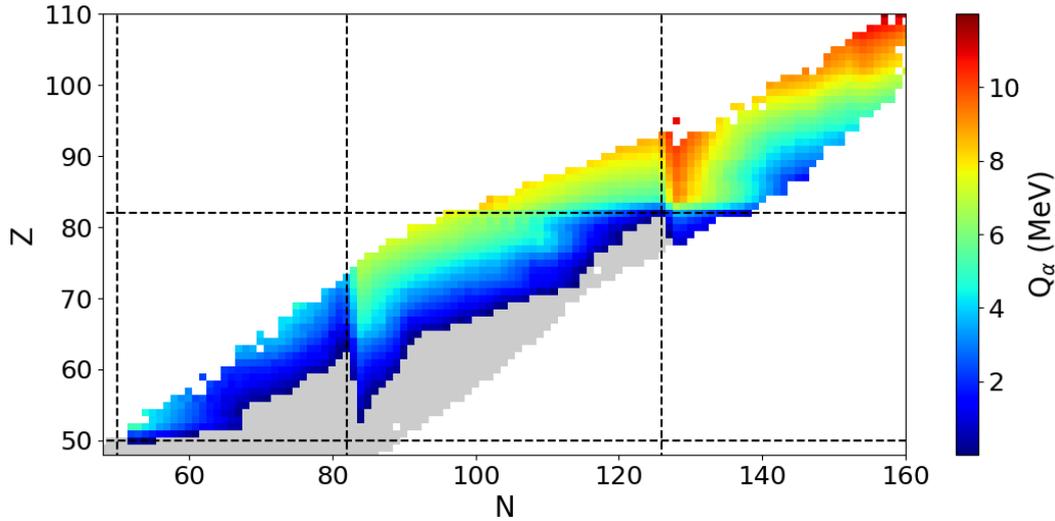


FIGURE 6.1 – Valeurs des Q de réaction pour l’émission d’une particule α . Les noyaux $Q_\alpha > 0$ sont représentés en couleurs et les noyaux $Q_\alpha < 0$ en gris. Données tirées de [NND]

6.1 Aperçu des formalismes

6.1.1 Dynamique collective de grandes amplitudes

La description du phénomène de radioactivité nécessite de comprendre en détail la dynamique collective des systèmes nucléaires. Dans le chapitre précédent, l’accent a été mis sur la description des mouvements collectifs de faibles amplitudes et le formalisme de la (Q)RPA a été introduit. Cependant, le phénomène de radioactivité ne peut être compris en termes d’oscillations autour d’un minimum local de la PES. Il nécessite en effet de comprendre des mouvements collectifs de grandes amplitudes. L’idée principale revient à supposer que l’évolution temporelle de la densité est déterminée par un ensemble de coordonnées collectives $\{q_i\}$ et de moments collectifs $\{p_i\}$ revenant alors à écrire $\rho(t) = \rho(q(t), p(t))$. La détermination des $q_i(t)$ et $p_i(t)$ est alors suffisante à la description du mouvement.

Plusieurs formulations sont possibles, faisant intervenir des approximations différentes. Dans les travaux présentés ci-après, deux méthodes ont été utilisées. Ces deux méthodes ont pour but la dérivation des masses inertielles, quantités encodant une partie

de la dynamique du problème, indispensables pour établir des temps de vie comparables à l'expérience.

La première méthode présentée ici, et qui a été utilisée pour la description des radioactivités α et cluster présentées ci-après, est celle de l'approximation adiabatique des équations TDHFB et d'une approximation crankée (les termes non invariants sous renversement du temps sont négligés). Cette méthode possède l'avantage d'avoir un coût numérique abordable ne nécessitant que peu de calculs supplémentaires en plus des calculs contraints HFB. Elle est décrite dans la Sec.6.2.

La seconde méthode, plus récente, est une reformulation du problème du mouvement collectif de large amplitude. Il s'agit de la méthode des coordonnées collectives auto-cohérentes, SCC (self-consistent collective coordinates) et en particulier l'approximation adiabatique de cette formulation, ASCC. L'inconvénient de cette méthode est qu'elle revient à calculer la réponse QRPA (ou équivalent) pour chaque coordonnée collective afin d'en extraire les modes propres. Son avantage principal tient en la prise en compte des effets dynamiques résiduels qui permettent de décrire des phénomènes physiques qui échappent aux approximations crankées. Cette méthode est décrite dans la Sec.6.3 et une application au calcul de masses inertielles est présentée en utilisant le formalisme FAM du chapitre précédent. En raison des difficultés numériques liées à cette méthode, les calculs de temps de vie dans les phénomènes de radioactivités étudiés ci-après n'ont pas pu être réalisés avec cette méthode.

6.1.2 Description microscopique du phénomène de radioactivité

Les processus d'émission cluster et α sont ici décrits de manière similaire à ceux de fission à l'aide de surface d'énergie potentielle (PES). Les coordonnées collectives prises en compte ici sont les moments quadrupolaire, octupolaire et hexadecapolaire représentés sur la Fig.6.2. Le moment quadrupolaire encode l'élongation du noyau, élongation nécessaire au processus d'émission. Le moment octupolaire permet quant à lui d'introduire une asymétrie permettant de décrire les processus de radioactivité α et cluster. L'intérêt du moment hexadecapolaire sera précisée par la suite. La topologie d'une PES fournit des informations importantes sur les configurations géométriques privilégiées par le système. L'état fondamental du système est donné par la configuration minimisant l'énergie de la PES associée à certaines valeurs dans l'espace des coordonnées collectives choisies. Les PES permettent ensuite de déterminer la valeur des coordonnées collectives associées à un état final souhaité. Ici, ces états finaux seront ceux où un (ou des) cluster est identifiable et suffisamment séparé du noyau fils.

Le processus d'émission en lui-même peut être modélisé le long d'un chemin L débutant au minimum de la PES en un point s_{in} jusqu'au point de sortie s_{out} représentant l'état final souhaité. Le chemin est choisi tel qu'une certaine action S soit minimale.

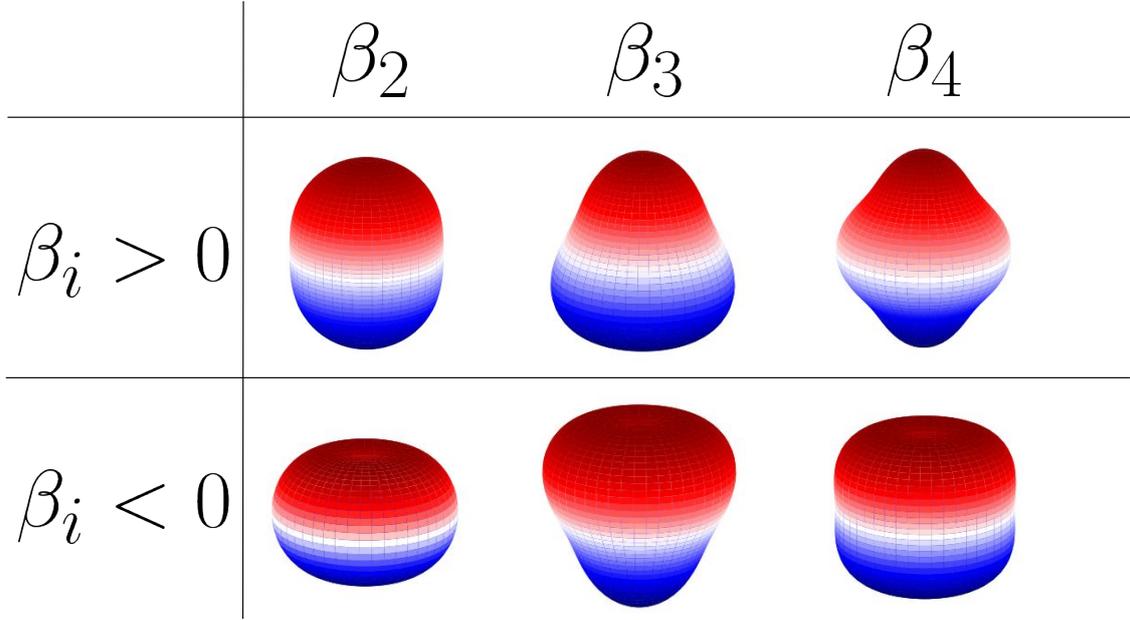


FIGURE 6.2 – Schématisation des déformations quadrupolaire (à gauche), octupolaire (au milieu) et hexadécapolaire (à droite).

Cette action sera prise ici comme [Bar78 ; Bar+81]¹

$$S(L) = \int_{s_{\text{in}}}^{s_{\text{out}}} \frac{1}{\hbar} \sqrt{2\mathcal{M}_{\text{eff}}(s) [V_{\text{eff}}(s) - E_0]} ds, \quad (6.1)$$

où $\mathcal{M}_{\text{eff}}(s)$ et $V_{\text{eff}}(s)$ représentent respectivement les masses inertielles effectives et le potentiel effectif. E_0 représente l'énergie collective de l'état fondamental et les limites d'intégration correspondent à l'état fondamental et au point d'émission. Plus précisément, le point d'émission s_{out} est défini comme $V_{\text{eff}}(s_{\text{out}}) = E_0 = 1$ MeV. Cette valeur de E_0 reste arbitraire, mais est directement corrélée à la probabilité de transition de la barrière discutée ci-après. Les masses inertielles sont calculées dans l'approximation ATDHFB dont le formalisme est présenté dans la section suivante.

Enfin, le temps de vie peut être estimé en définissant la probabilité P de pénétration de la barrière de potentielle dans l'approximation WKB. Cette approximation revient à résoudre l'équation de Schrödinger sous l'hypothèse que la largeur de la barrière (principalement Coulombienne ici, donc de plusieurs dizaines de fm) est grande devant la dispersion des fonctions d'onde (quelques fm). On obtient alors

$$P = \frac{1}{1 + \exp[2S(L)]}, \quad (6.2)$$

Le temps de demi-vie peut alors être calculé comme

$$T_{1/2} = \frac{\ln(2)}{nP}, \quad (6.3)$$

1. Cette forme particulière de l'action s'interprète comme la généralisation de la formule WKB pour un solide de moment \mathcal{M}_{eff} dont la partie cinétique de l'Hamiltonien prendrait la forme usuelle $\mathcal{H}_{\text{kin}} = \frac{1}{2} \sum_{ij} \mathcal{M}_{ij} \dot{\beta}_i \dot{\beta}_j$. \mathcal{M}_{eff} joue le rôle d'une métrique dans l'espace des coordonnées collectives.

avec n le nombre d’assauts contre la barrière [Bar78 ; Bar+81 ; Sad+13 ; Sad+14]. Ce nombre d’assauts est simplement relié à $E_0 = \hbar\omega = 1$ MeV dont on peut déduire la fréquence $n = E_0/h = 10^{20.38}\text{s}^{-1}$.

6.1.3 Aspects numériques

Un aspect important du calcul des PES réside dans le coût numérique de cette opération. Dépendant du noyau considéré et du type de radioactivité recherché, il sera nécessaire de faire des calculs contraints dans une, deux ou trois dimensions pour contraindre les paramètres quadrupolaire β_2 , octupolaire β_3 et hexadecapolaire β_4 . Le coût d’un calcul contraint peut énormément varier suivant l’endroit de la PES où il est calculé. Généralement, un calcul proche de l’état fondamental convergera rapidement alors qu’un calcul très déformé pourra prendre un ou deux ordres de grandeur en plus pour converger (voire ne pas converger dans certains cas). Ainsi, il est important de mettre en place des méthodes permettant de faire converger ces points plus facilement et, de manière générale, rendre le calcul des PES plus rapide.

Afin d’accélérer le calcul des PES, deux méthodes ont été mises en place. La première méthode consiste à ne lancer des nouveaux calculs que pour des déformations proches de celles qui ont déjà convergé. De cette façon, les informations sur les fonctions d’onde des noyaux convergés sont données comme point d’entrée pour le nouveau calcul. Ce procédé permet de considérablement diminuer le temps de calcul de plusieurs ordres de grandeur. Cette méthode se prête particulièrement bien au cas où le nombre de processeurs disponibles est largement inférieur au nombre de calculs nécessaires, ce qui fut le cas des PES calculée dans ces travaux (une centaine de cœurs disponibles). En effet, dans le cas opposé où le nombre de cœurs est du même ordre de grandeur que celui du nombre de points à calculer, il est souvent plus judicieux de lancer tous les calculs d’un coup, quitte à recalculer les points qui n’auraient pas convergé dans un second temps. Dans l’autre cas, il est préférable de commencer par calculer des points dont on sait que la convergence devrait être rapide (autour des minima généralement). Une fois qu’un calcul prend fin, on regarde si un point adjacent n’a pas encore été calculé. Si tel est le cas, ce nouveau point est lancé avec comme potentiel d’entrée le potentiel de sorti du calcul précédent. Cette méthode permet de réduire le temps de calcul de plusieurs ordres de grandeur. En effet, pour des tailles de base entre 16 et 22, les temps de calculs avec ou sans potentiel d’entrée convergé peuvent différer d’un à trois ordres de grandeur. Le gain de temps est d’autant plus important que la taille de base est élevée et que le nombre de points à calculer est grand.

La seconde méthode est une simple méthode de grille adaptative où le pas de la grille n’est pas fixé, mais dépend des résultats convergés environnant une zone de la PES. Si cette zone paraît plate (une variation inférieure au MeV sur plusieurs points adjacents par exemple), peu de calculs supplémentaires seront effectués. Dans le cas inverse, afin d’avoir une meilleure résolution, le pas sera ajusté et des calculs supplémentaires seront lancés. Cette méthode du pas adaptatif ne réduit pas drastiquement ce temps de calcul, mais permet d’obtenir une PES plus fiable.

Pour les noyaux concernés ici (du Xénon au Radium), les tailles de bases ont été fixées entre 16 et 22 couches d’oscillateur harmonique.

6.2 Masses inertielles avec ATDHFB

À l'opposé de l'étude des excitations dans les noyaux pour laquelle il est pertinent d'utiliser une approximation de faible amplitude, le traitement des émissions α , cluster ou encore de la fission sont des phénomènes de grande amplitude. La plupart du temps, une hypothèse d'adiabaticité est utilisée en plus afin de simplifier les calculs. Cette hypothèse revient à supposer que les vitesses collectives \dot{q}_i sont très faibles en comparaison avec les vitesses des nucléons. Ces vitesses collectives sont définies comme

$$q_i = \langle 0 | \hat{Q}_i | 0 \rangle \quad (6.4)$$

avec \hat{Q}_i les générateurs de coordonnées collectives et $|0\rangle$ un vide HFB. Comme mentionné précédemment, ici les générateurs collectifs sont pris comme étant les moments quadrupolaire, octupolaire et hexadecapolaire. L'hypothèse d'adiabaticité est cependant largement discutée dans la littérature [Ber+10; RC13; SU14] où elle est supposée ne plus être valide durant les étapes finales du processus de fission (par exemple), lorsque la scission du col entre les fragments se produit.

6.2.1 ATDHFB

La dérivation des équations ATDHFB prend comme point de départ les équations TDHFB précédemment dérivées dans le cadre de la FAM. Elles sont rappelées ici par commodité

$$i\dot{\mathcal{R}} = [\mathcal{W}, \mathcal{R}] \quad (6.5)$$

où l'on utilise \mathcal{W} pour représenter l'Hamiltonien du système. L'étape suivante consiste à faire le développement de la matrice densité jusqu'au terme quadratique des moments collectifs

$$\mathcal{R} = \mathcal{R}_0 + \mathcal{R}_1 + \mathcal{R}_2 \quad (6.6)$$

Il est alors possible de faire de même pour l'Hamiltonien du système que l'on peut écrire comme

$$\mathcal{W} = \mathcal{K} + \text{Tr} \left\{ \tilde{V} \mathcal{R} \right\} \quad (6.7)$$

avec \mathcal{K} l'énergie cinétique et \tilde{V} le potentiel à deux corps anti-symétrisé. On écrit alors

$$\mathcal{W} = \mathcal{W}_0 + \mathcal{W}_1 + \mathcal{W}_2 \quad (6.8)$$

avec

$$\mathcal{W}_0 = \mathcal{K} + \text{Tr} \left\{ \tilde{V} \mathcal{R}_0 \right\} \quad (6.9a)$$

$$\mathcal{W}_1 = \text{Tr} \left\{ \tilde{V} \mathcal{R}_1 \right\} \quad (6.9b)$$

$$\mathcal{W}_2 = \text{Tr} \left\{ \tilde{V} \mathcal{R}_2 \right\} \quad (6.9c)$$

En utilisant l'équation TDHFB et en décomposant les modes pair et impair sous renversement du temps, il est possible d'écrire

$$i\dot{\mathcal{R}}_0 = [\mathcal{W}_0, \mathcal{R}_1] + [\mathcal{W}_1, \mathcal{R}_0] \quad (6.10a)$$

$$i\dot{\mathcal{R}}_1 = [\mathcal{W}_0, \mathcal{R}_0] + [\mathcal{W}_0, \mathcal{R}_2] + [\mathcal{W}_1, \mathcal{R}_1] + [\mathcal{W}_2, \mathcal{R}_0] \quad (6.10b)$$

Pour obtenir ce set d'équation, il est nécessaire de rentrer dans les détails du développement de ρ . Il est intéressant de remarquer que l'équation TDHF (qui est l'équation du mouvement dans notre cas) ne fait intervenir qu'une seule quantité : la matrice densité ρ , alors qu'en général les équations du mouvement font intervenir deux quantités : la position et l'impulsion (au niveau classique). On est donc tenté d'extraire de la matrice densité deux quantités jouant un rôle similaire ici.

Pour ce faire, il faut d'abord se rendre compte que la position est invariante sous renversement du temps (pair sous renversement du temps) et l'impulsion donne son opposé (impair sous renversement du temps). La matrice densité n'est ni l'une ni l'autre, signifiant qu'il est possible de la décomposer comme

$$\rho(t) = \rho_+(t) + \rho_-(t) \quad (6.11)$$

avec $\rho_{\pm}(t)$ représentant les parties paires et impaires. Il a été montré par Baranger et Veneroni [BV78] qu'il était possible de décomposer la matrice densité en deux matrices invariantes sous renversement du temps (et hermitiennes) $\rho_0(t)$ et $\chi(t)$ définies par

$$\rho(t) = e^{i\chi(t)}\rho_0(t)e^{-i\chi(t)} \quad (6.12)$$

Pour plus de détail sur l'unicité de cette décomposition, voir[BV78]. Il est possible de montrer que χ peut être considéré comme le moment conjugué de ρ_0 .

En insérant ensuite cette équation Eq.(6.12) dans Eq.(6.5) et en séparant les modes pairs/impairs, il est alors possible d'obtenir deux équations couplées du premier ordre (cf. Eq.(6.10)) pour ρ_0 et χ . En particulier, la première équation Eq.(6.10a) représente la partie impaire sous renversement du temps et Eq.(6.10b) la partie paire. Dans l'approximation adiabatique, χ est considéré comme d'ordre 1, de même qu'une dérivée temporelle, ce qui explique la troncation choisie. Cependant, il est aussi possible de sortir du cadre de l'approximation adiabatique et considérer l'autre limite, celle des oscillations rapides et donc de la RPA. Dans cette approximation, la dérivée temporelle d'une fonction est du même ordre de grandeur que la quantité elle-même.

L'argument permettant de considérer χ comme petit vient du fait que, dans l'approximation adiabatique, le mouvement est considéré comme lent et les fonctions d'ondes sont donc quasiment dans leur état d'équilibre. Une conséquence est donc que la matrice densité doit être quasiment égale à sa renversée temporelle i.e.

$$e^{i\chi(t)}\rho_0(t)e^{i\chi(t)} \approx e^{-i\chi(t)}\rho_0(t)e^{i\chi(t)} \quad (6.13)$$

On en déduit donc que χ doit être petit par rapport à l'unité et peut être considéré comme le paramètre adiabatique à partir duquel nous pouvons faire un développement en puissance.

6.2.2 Masse collective inertielle

La partie cinétique de l'énergie \mathcal{K} correspond à la partie quadratique de l'énergie totale du système. Cette dernière est donnée par

$$E = \text{Tr}(K\mathcal{R}) + \frac{1}{2}\text{Tr}\left(\mathcal{R}\tilde{V}\mathcal{R}\right) \quad (6.14)$$

Il est à noter que l'énergie est une quantité invariante par renversement du temps. En utilisant le développement en χ précédent, il est alors possible d'écrire les deux premiers ordres correspondant respectivement à l'énergie potentielle collective \mathcal{V} (ordre 0) et l'énergie cinétique \mathcal{K} (ordre 2)

$$\mathcal{V} = \text{Tr}(K\mathcal{R}_0) + \frac{1}{2}\text{Tr}\left(\mathcal{R}_0\tilde{V}\mathcal{R}_0\right) \quad (6.15a)$$

$$\mathcal{K} = \text{Tr}(K\mathcal{R}_2) + \frac{1}{2}\text{Tr}\left(\mathcal{R}_0\tilde{V}\mathcal{R}_2 + \mathcal{R}_2\tilde{V}\mathcal{R}_0 + \mathcal{R}_1\tilde{V}\mathcal{R}_1\right) \quad (6.15b)$$

En utilisant les relations Eq.(6.9) il est possible de réécrire la partie cinétique comme

$$\mathcal{K} = \text{Tr}(\mathcal{W}_0\mathcal{R}_2) + \frac{1}{2}\text{Tr}(\mathcal{W}_1\mathcal{R}_1) \quad (6.16)$$

$$= \frac{i}{2}\text{Tr}\left(\dot{\mathcal{R}}_0[\mathcal{R}_0, \mathcal{R}_1]\right) - [\mathcal{R}_2, \mathcal{R}_0][\mathcal{W}_0, \mathcal{R}_0] \quad (6.17)$$

où le passage à la deuxième ligne nécessite la manipulation des équations précédentes (voir Ref.[GR78] pour plus de détails). Le terme en \mathcal{R}_2 est généralement négligeable devant les autres termes et est donc omis dans la suite. Il devient alors très pertinent d'écrire l'énergie cinétique totale comme

$$\mathcal{K} = \frac{1}{2}\dot{q}^2\mathcal{M} \quad (6.18)$$

avec \mathcal{M} la masse collective

$$\mathcal{M} = \frac{i}{2\dot{q}^2}\text{Tr}\left(\dot{\mathcal{R}}_0[\mathcal{R}_0, \mathcal{R}_1]\right) = \frac{i}{2\dot{q}}\text{Tr}\left(\frac{\partial\mathcal{R}_0}{\partial q}[\mathcal{R}_0, \mathcal{R}_1]\right) \quad (6.19)$$

Dans le cas où plusieurs coordonnées collectives sont considérées, le tenseur de masse collective se réécrit

$$\mathcal{M}_{ij} = \frac{i}{2\dot{q}_j}\text{Tr}\left(\frac{\partial\mathcal{R}_0}{\partial q_i}[\mathcal{R}_0, \mathcal{R}_1^j]\right) \quad (6.20)$$

Cette quantité est directement utilisée dans le calcul de l'action Eq.(6.1) avec

$$\mathcal{M}_{eff}(s) = \sum_{ij} \mathcal{M}_{ij} \frac{dq_i}{ds} \frac{dq_j}{ds} \quad (6.21)$$

6.2.3 Approximation crankée perturbatif

Écrites sous cette forme (6.20), les masses inertielles sont difficilement utilisables (et l'ont rarement été), principalement à cause de la renversée du temps de l'interaction

\mathcal{W}_1 . Cette partie est donc généralement négligée², permettant une réécriture plus simple du tenseur de masse en fonction seulement de \mathcal{R}_0 (voir [Bar+11] pour les expressions détaillées dans les différentes bases).

Une dernière approximation peut être mise en place pour éviter d’avoir à calculer explicitement ces dérivées (ce qui peut s’avérer coûteux). Elle consiste à calculer ces dernières de façon perturbative en approximant les dérivées par des termes proportionnels aux opérateurs \hat{Q}_i et en négligeant les termes de réarrangement et les dérivées du tenseur d’appariement (voir [BRA+72; GG79] pour des détails sur la dérivation). La comparaison des différentes méthodes peut être retrouvée dans [Bar+11].

Sous ces deux approximations, il est possible de calculer les masses inertielles crankées perturbatives comme

$$\mathcal{M} = \hbar^2 M_{(1)}^{-1} M_{(3)} M_{(1)}^{-1}, \quad (6.22)$$

avec

$$[M_{(k)}]_{ij} = \sum_{\mu\nu} \frac{\langle 0 | \hat{Q}_i | \mu\nu \rangle \langle \mu\nu | \hat{Q}_j | 0 \rangle}{(E_\mu + E_\nu)^k} \quad (6.23)$$

Les détails des éléments de matrice sont donnés dans l’annexe E.

La Fig.6.3 présente une comparaison de différentes méthodes utilisées pour le calcul des masses inertielles par Baran & al [Bar+11]. Il est intéressant de remarquer les nombreux pics obtenus avec l’approximation crankée seule. Les auteurs relient ces pics à la relative convergence des états HFB. Quelques pics principaux sont quand même visibles avec un principal à la première barrière de fission. Les approximations perturbatives prédisent quant à elles des pics bien plus faibles, voire inexistantes pour la seconde barrière de fission. La fréquence de ces pics est aussi largement diminuée, amenant à penser que les approximations perturbatives respectent plus l’adiabaticité. Finalement, l’approximation crankée canonique (où les masses inertielles sont calculées dans la base canonique et non dans la base des qp) est relativement proche de l’approximation crankée, avec toujours un pic principal diminué en intensité.

Ces approximations sont aussi très utiles pour calculer des corrections supplémentaires dans le calcul de l’énergie. En particulier, la correction ZPE (Zero Point Energy) peut s’écrire comme [GG79]

$$E_{\text{ZPE}} = \frac{1}{4} \text{Tr} \left[M_{(2)}^{-1} M_{(1)} \right]. \quad (6.24)$$

Cette correction représente l’énergie à soustraire pour obtenir l’énergie physique du système. Dans le cas d’un oscillateur harmonique à une dimension, cette correction est constante et vaut $1/2\hbar\omega$. Ici, la ZPE dépend de la déformation du système et peut impacter la topologie de la PES.

6.2.4 Calcul du chemin

Dans les calculs pratiques, nous déterminons d’abord le chemin de moindre action de l’état fondamental à la scission dans l’espace des coordonnées collectives choisies.

2. L’approximation crankée néglige les effets dynamiques résiduels modifiant parfois de façon importante les masses inertielles.

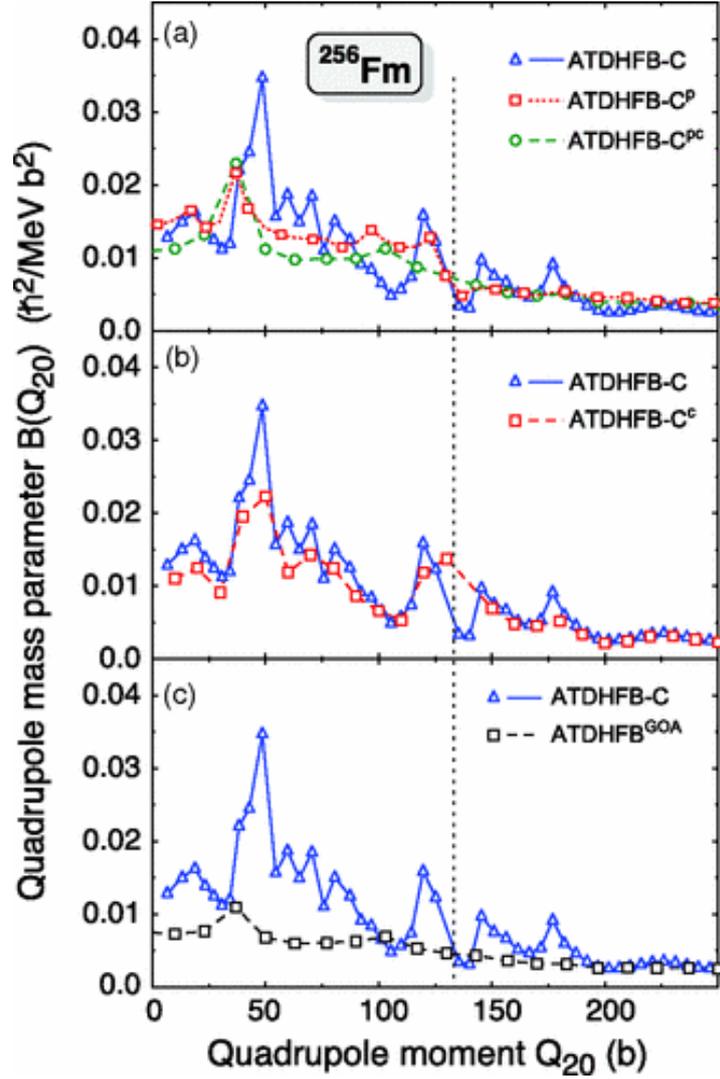


FIGURE 6.3 – Comparaison des masses effectives \mathcal{M} dans le cas du ^{256}Fm en fonction du moment quadrupolaire Q_{20} . Tous les calculs sont faits avec l'approximation ATDHFB. Les triangles bleus représentent les résultats obtenus avec l'approximation crankée. Les carrés rouges dans la première figure ceux obtenus avec l'approximation crankée perturbatif, et les cercles verts avec l'approximation crankée perturbatif canonique. Dans les deux figures suivantes, les carrés rouges représentent l'approximation crankée canonique et l'approximation du recouvrement Gaussien. Voir [Bar+11] pour des détails sur cette approximation. Figure tirée de [Bar+11]

Le point de scission peut être déterminé de différentes manières (discontinuité sur β_4 , distance aux centres, taille des clusters, ...). Dans le cas de la présente étude, le point de scission est défini comme la configuration d'énergie minimale où les clusters (suffisamment séparés) possèdent le bon nombre de nucléons. Après la scission, la configuration avec deux fragments bien séparés devient la solution de plus basse énergie et l'énergie peut être approximée par l'expression classique pour deux sphères uniformément chargées :

$$V_{\text{eff}}(\beta_i) = e^2 \frac{Z_1 Z_2}{R} - Q, \quad (6.25)$$

avec R représentant la distance entre les centres des deux fragments. Il est possible de donner une relation approximée entre les moments multipolaires et cette distance³

$$Q_{20} = 2A_2R^2 \quad (6.26a)$$

$$Q_{30} = f_3R^3 \quad (6.26b)$$

$$(6.26c)$$

avec A_2 la masse du petit fragment et f_3 défini comme

$$f_3 = \frac{A_1A_2}{A} \frac{A_1 - A_2}{A}, \quad (6.27)$$

où A_1 le nombre de nucléons du noyau fils et $A = A_1 + A_2$. Il est alors possible d'exprimer facilement la masse inertielle en fonction de ces facteurs géométriques comme [Mer+21]

$$\mathcal{M}_{\text{eff}}(Q_{20}) = \frac{\mu}{8A_2Q_{20}} \quad (6.28a)$$

$$\mathcal{M}_{\text{eff}}(Q_{30}) = \frac{\mu}{9Q_{30}^{4/3}f_3^{2/3}} \quad (6.28b)$$

où $\mu = m_n A_1 A_2 / (A_1 + A_2)$ représente la masse réduite des deux fragments et m_n la masse d'un nucléon.

Ainsi l'action totale peut être décomposée en deux parties :

1. une première partie dictée par la PES et les masses inertielles calculées dans l'approximation crankée entre l'état d'équilibre HFB et le point de scission
2. une deuxième partie dictée par la seule loi de Coulomb où la masse inertielle est calculée de manière géométrique entre le point de scission jusqu'au point de sortie

6.3 Masses inertielles avec ASCC et QFAM

Les calculs présentés précédemment font intervenir de nombreuses approximations (adiabaticité, expansion perturbative, calcul crankée, ...). En particulier, l'approximation crankée néglige les effets dynamiques résiduels. Des comparaisons avec et sans cette approximation ont permis de conclure à un facteur $1.2 \sim 1.4$ entre les masses inertielles avec et sans approximation. Cependant, en plus de cette déviation, les effets des termes résiduels peuvent parfois modifier qualitativement les masses inertielles, effet qu'il devient alors impossible à corriger à l'aide d'un simple pré-facteur multiplicatif.

Comme indiqué dans l'introduction de cette section, il est possible d'utiliser un formalisme différent afin de calculer les masses inertielles : le formalisme ASCC (coordonnées collectives auto-cohérentes adiabatiques). Le principe pour obtenir les masses inertielles est de calculer les modes orthogonaux locaux construits sur les états RHB précédemment calculés. Ces modes locaux orthogonaux sont calculés en utilisant le formalisme de la QRPA locale qui permet alors de prendre en compte les effets dynamiques résiduels. On se propose ici de suivre la méthode décrite dans [WHN21] et de l'appliquer au cas de la fission spontanée du ^{240}Pu .

3. On considère une distribution ponctuelle de matière pour les différents fragments.

6.3.1 Formalisme ASCC

Comme indiqué dans l'introduction, l'hypothèse générale de la méthode SCC repose sur l'écriture des différentes quantités du problème en fonction des coordonnées collectives q_i et p_i (conjuguées les unes des autres). L'équation SCC est obtenue en imposant l'invariance de l'équation TDHFB

$$\delta \langle \Phi(t) | i \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H} | \Phi(t) \rangle = 0 \quad (6.29)$$

par rapport à une petite variation. Son avantage principal tient en la prise en compte des effets dynamiques résiduels qui permettent de prendre en compte des phénomènes physiques qui échappent aux approximations crankées.

δ est définie comme

$$\delta |\Phi(t)\rangle = a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger |\Phi(t)\rangle \quad (6.30)$$

avec $a^{(\dagger)}$ les opérateurs de créations et annihilations.

La résolution de cette équation peut être effectuée sans approximation supplémentaire, comme originellement fait dans [Mar+80]. Cependant, cette résolution reste très complexe à mettre en place [Nak+16]. Afin de simplifier le problème sans influencer la physique encodée dans les coordonnées collectives q_i , il est possible de procéder à une expansion sur les moments collectifs p_i . Originellement proposée par [MNM00], la méthode porte le nom d'adiabatique SCC (ASCC). Étant donné le peu d'utilisation de cette méthode dans les résultats de ce chapitre, les détails des dérivations SCC et ASCC ne sont pas présentés ici mais peuvent être trouvés dans [Mar+80 ; MNM00 ; Nak+16].

Les équations de la méthode ASCC peuvent être résolues par la méthode de la QRPA locale (LQRPA, local QRPA). Les équations peuvent alors s'écrire comme⁴

$$\delta \langle \Phi(s) | \left[\hat{H}_M, \hat{Q}_i(s) \right] - \frac{1}{i} \hat{P}_i(s) | \Phi(s) \rangle = 0 \quad (6.31a)$$

$$\delta \langle \Phi(s) | \left[\hat{H}_M, \frac{1}{i} \hat{P}_i(s) \right] - \Omega_i^2 \hat{Q}_i(s) | \Phi(s) \rangle = 0 \quad (6.31b)$$

où les \hat{P}_i et \hat{Q}_i sont les générateurs locaux des moments collectifs et coordonnées collectives. s est la coordonnée curviligne encodant la position dans l'espace des coordonnées collectives. Ω_i représente la fréquence du mode local orthogonal. Ces équations sont les équations de la LQRPA et peuvent être résolues de la même façon qu'en QRPA classique.

Les masses inertielles sont alors déduites de

$$T = \frac{1}{2} \sum_i \dot{q}_i^2 = \frac{1}{2} \sum_{m,n} \mathcal{M}_{mn}(s) \dot{s}_m \dot{s}_n \quad (6.32)$$

où le tenseur des masses inertielles prend la forme

$$\mathcal{M}_{m,n} = \sum_{i,j} \frac{\partial q_i}{\partial s_m} \mathcal{M}_{ij} \frac{\partial q_j}{\partial s_n} = \sum_i \frac{\partial q_i}{\partial s_m} \frac{\partial q_i}{\partial s_n} \quad (6.33)$$

4. Une approximation est ici effectuée où un terme de courbure est négligé, voir par exemple [Hin+10]

où l'on a choisi $\mathcal{M}_{ij} = \delta_{ij}$ pour fixer l'échelle arbitraire des coordonnées collectives q_i . Il est alors possible d'écrire

$$\begin{aligned} \frac{\partial s_m}{\partial q_i} &= \frac{\partial}{\partial q_i} \langle \Phi(s) | \hat{s}_m | \Phi(s) \rangle \\ &= \langle \Phi(s) | \left[\hat{s}_m, \frac{1}{i} \hat{P}_i(s) \right] | \Phi(s) \rangle \end{aligned} \quad (6.34)$$

$$\frac{\partial s_m}{\partial q_i} = ip_i(\hat{s}_m) \quad (6.35)$$

où p_i est défini pour tout opérateur Q comme

$$p_i(\hat{Q}) \equiv \frac{1}{2} \sum_{\mu, \nu} (P_{\mu\nu}^{i*} Q_{\mu\nu}^{20} + P_{\mu\nu}^i Q_{\mu\nu}^{02}) \quad (6.36)$$

L'expression Eq.(6.35) permet ainsi de calculer les masses inertielles sans recourir aux calculs des dérivées. La seule donnée nécessaire devient le spectre du générateur local \hat{P}_i . Ce dernier s'obtient en résolvant les équations LQRPA Eqs.(6.31a-6.31b). Il est alors possible d'utiliser le formalisme de la QFAM pour simplifier cette résolution.

Afin de faire apparaître les opérateurs conjugués \hat{Q} et \hat{P} dans les équations QFAM, il est nécessaire de changer de représentation, comme présenté dans [Hin15], appelée représentation PQ. Les détails des calculs sont donnés en annexe, App.D.3. On peut alors montrer que

$$\frac{1}{2\pi i} \oint_{C_i} S(\hat{F}, \omega) d\omega = \frac{1}{2\Omega_i} \left| p_i(\hat{F}_i) \right|^2 \quad (6.37)$$

où C_i représente un contour encerclant un unique pôle Ω_i comme discuté dans le chapitre précédent (voir Sec.5.3). Les procédures décrites dans le chapitre précédent permettent ainsi de trouver tous les pôles de la fonction de réponse QFAM ce qui permet d'avoir accès aux p_i et aux masses inertielles. Pour le calcul de ces dernières, il est nécessaire de sélectionner un unique p_i . On considère dans la suite que le mode orthogonal pertinent ici est celui qui possède la plus grande valeur de $|p_i|$.

6.3.2 Application

La mise en pratique de cette méthode reste coûteuse aux vues du nombre de calculs QFAM nécessaires pour obtenir la position de chaque pôle (voir Sec.5.3 pour une discussion détaillée). Afin de valider la méthode, le noyau de ^{240}Pu est choisi afin de comparer les résultats à ceux de [WHN21]. Une unique coordonnée collective est ici choisie correspondant au moment quadrupolaire \hat{Q}_{20} .

Les résultats sont présentés sur la Fig.6.4. L'accord entre notre implémentation et celle de [WHN21] est très satisfaisant, d'autant plus que les fonctionnelles utilisées ici diffèrent. Le résultat principal de cette étude montre l'importance de traiter les effets dynamiques résiduels. Le facteur $1.2 \sim 1.4$ généralement utilisé pour corriger les résultats obtenus dans un cadre perturbatif ne permettent pas, ici, de rendre compte de l'évolution des masses inertielles. Les deux méthodes rendent bien compte d'une augmentation des masses inertielles autour de $\beta_2 \sim 0.2 - 0.4$ mais un facteur 6 sépare

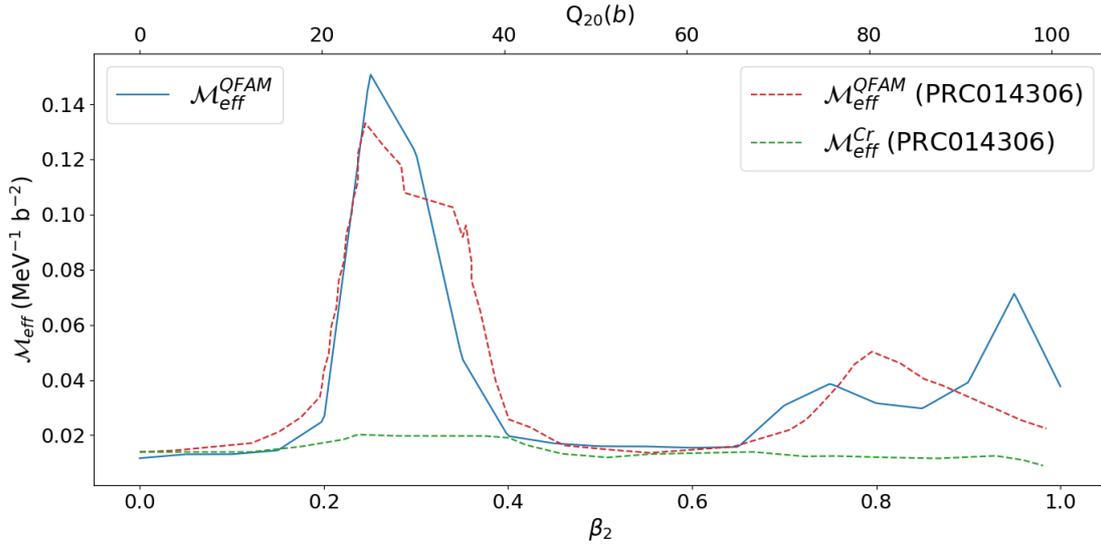


FIGURE 6.4 – Comparaison des masses effectives \mathcal{M} dans le cas du ^{240}Pu en fonction de la déformation β_2 . La courbe pleine bleue représente les résultats obtenus avec l’interaction DD-PC1 en utilisant la méthode LQRPA. La courbe rouge en pointillés représente les résultats obtenus par [WHN21] avec une interaction de Skyrme en utilisant la méthode LQRPA. La courbe verte en pontillés représente les résultats obtenus par [WHN21] avec une interaction de Skyrme en utilisant une approximation crankée perturbative.

les résultats. Une seconde augmentation est prédite dans le formalisme ASCC à plus grande déformation, absent dans l’approximation crankée perturbative.

Les résultats de [WHN21] montrent alors que le temps de vie du ^{240}Pu diffère de plusieurs ordres de grandeur entre l’approche ATDHFB-crankée et l’approche QRPA. D’autres études utilisant cette méthode seront donc nécessaires afin de mieux comprendre l’impact du calcul des masses inertielles via les modes propres QRPA. Dans la suite, cette méthode n’est pas utilisée dans le calcul des masses inertielles à cause de son coût numérique important comme discuté précédemment. Elle reste cependant très pertinente pour le futur étant donné la facilité avec laquelle les calculs peuvent être parallélisés.

6.4 Radioactivité α dans les noyaux de masses intermédiaires : cas de la chaîne $^{108}\text{Xe} \rightarrow ^{104}\text{Te} \rightarrow ^{100}\text{Sn}$

Il est proposé ici de s’intéresser au cas des noyaux de masses intermédiaires autour de $A \sim 100$. Très peu de noyaux dans cette région sont émetteurs α en raison du Q_α de réaction très faible. Il est donc nécessaire d’aller étudier les noyaux proches de la dripline proton pour trouver des émetteurs α . En fait, le ^{104}Te est l’un des premiers émetteurs α si légers. On se propose donc ici d’étudier en particulier la chaîne de désintégration α suivante : $^{108}\text{Xe} \rightarrow ^{104}\text{Te} \rightarrow ^{100}\text{Sn}$. Les temps de vie expérimentaux sont de $58_{-23}^{+106} \mu\text{s}$ [Aur+18] et une limite haute de $< 18 \text{ ns}$ [Aur+18] pour le ^{108}Xe et le

^{104}Te respectivement.

Les calculs effectués ici utilisent un code RHB couplés à un calcul de masses inertielles par la méthode ATDHFB crankée perturbative décrite précédemment. La plupart des calculs ont été effectués avec la fonctionnelle relativiste DD-PC1 bien que d'autres calculs avec DD-ME2 et PC-PK1 ont aussi été effectués afin de déterminer la dépendance des résultats par rapport à l'interaction choisie. Il est montré par la suite que cette dépendance est négligeable. L'appariement dans toutes ces interactions est ajusté sur les gaps d'appariement de la matière nucléaire tel que calculé avec la paramétrisation D1S de Gogny.

6.4.1 Cas du ^{108}Xe

La Fig.6.5 montre la PES, les masses inertielles ainsi que le produit de ces deux quantités dans le cas du ^{108}Xe . Il est important de prendre en compte les informations des masses inertielles étant donné que ces dernières sont présentes dans le calcul du chemin de moindre action (cf. Eq.(6.1)). Ainsi, c'est bien la donnée du produit du potentiel effectif et des masses inertielles qui nous donne l'information sur le chemin emprunté par le système.

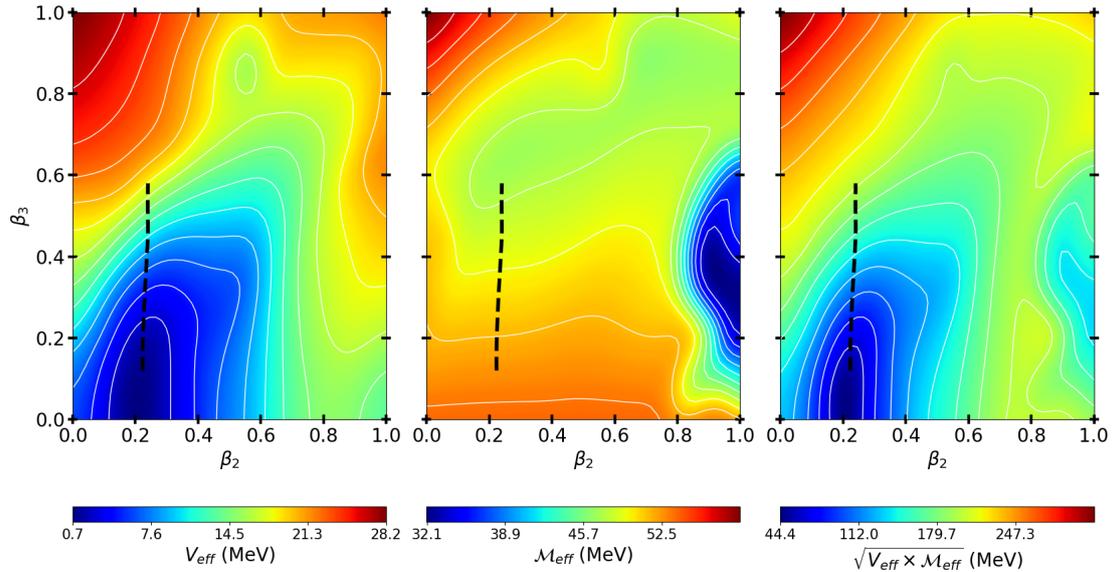


FIGURE 6.5 – Surface d'énergie potentielle (à gauche), masses inertielles (milieu) et la racine du produit des deux (à droite) pour le ^{108}Xe . Le trait pointillé noir représente le chemin de moindre action défini par l'Eq.(6.1).

Le trait pointillé noir représente le chemin de moindre action concernant l'émission d'une particule α aux coordonnées de scission $(\beta_2, \beta_3) \approx (0.21, 0.59)$. Comme dit précédemment, l'action est décomposée en deux parties. L'action entre le point d'entrée et le point de scission est de $S_1 \approx 6.0$ alors que l'action pour la partie coulombienne entre le point de scission et le point de sortie est de $S_2 \approx 12.7$. Ainsi, l'action totale vaut $S \approx 18.7$ et le temps de vie théorique obtenu pour cette émission est de $\tau_\alpha^{th} = 50 \mu\text{s}$ en très bon accord avec le temps de vie expérimental $\tau_\alpha^{exp} = 58_{-23}^{+106} \mu\text{s}$.

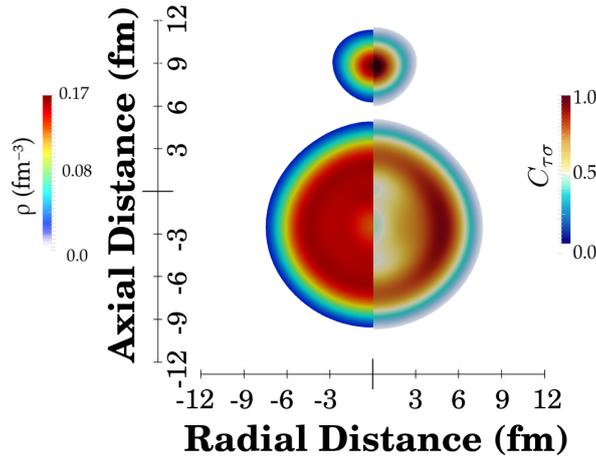


FIGURE 6.6 – Densité et fonction de localisation du ^{108}Xe au point de scission α . Figure tirée de [Mer+20].

La Fig.6.6 montre la densité (à gauche) et la fonction de localisation (à droite) dans le cas du ^{108}Xe au niveau du point de scission d'émission α . La densité à ce niveau est égale 4 (deux neutrons et deux protons) et nous permet donc de conclure quant à la présence d'un cluster α . Pour le vérifier, il est utile d'utiliser les informations données par la fonction de localisation. On rappelle ici qu'une valeur de la fonction de localisation proche de 1 signifie que la probabilité de trouver deux nucléons avec des valeurs de spin et isospin identiques est très faible. Ceci signifie donc que la probabilité de trouver quatre nucléons avec des valeurs de spin et isospin différentes est très élevée lorsque $C_{q\sigma} \simeq 1$ [Rei+11 ; Ebr+17 ; Jer+18]. Ainsi, la fonction de localisation présentée à droite de la Fig.6.6 montre bien que le cluster émis au point de scission est une particule α .

6.4.2 Cas du ^{104}Te

Le cas du ^{104}Te se traite de façon similaire et les résultats sont affichés sur la Fig.6.7. Ce cas démontre particulièrement bien l'importance de la prise en compte des données sur les masses inertielles dans le calcul du temps de vie où un minimum local apparaît dans le graphe du milieu (et dans celui de droite). En particulier, dans ce cas du ^{104}Te , la donnée des masses inertielles permet de comprendre plus facilement le chemin dynamique indiqué en pointillé.

Les actions prennent les valeurs suivantes : $S \approx 4.4 + 11.5 = 15.9$ et donne un temps de vie de $\tau_{\alpha}^{th} = 190$ ns comparé à la valeur expérimentale de $\tau_{\alpha}^{exp} < 18$ ns. L'accord théorie-expérience est dans ce cas moins bon avec, au mieux, un ordre de grandeur de différence. Il est cependant important de rappeler ici que ces noyaux sont proches de la dripline protons où de nombreux phénomènes peuvent rendre les calculs de structure moins précis.

Il est intéressant de poursuivre l'étude de la radioactivité du ^{104}Te en s'intéressant à la valeur du paramètre de déformation hexadécapolaire β_{40} . En effet, ce dernier montre une évolution rapide le long du chemin suivi par le système au moment de la scission, comme montré sur la Fig.6.8a.

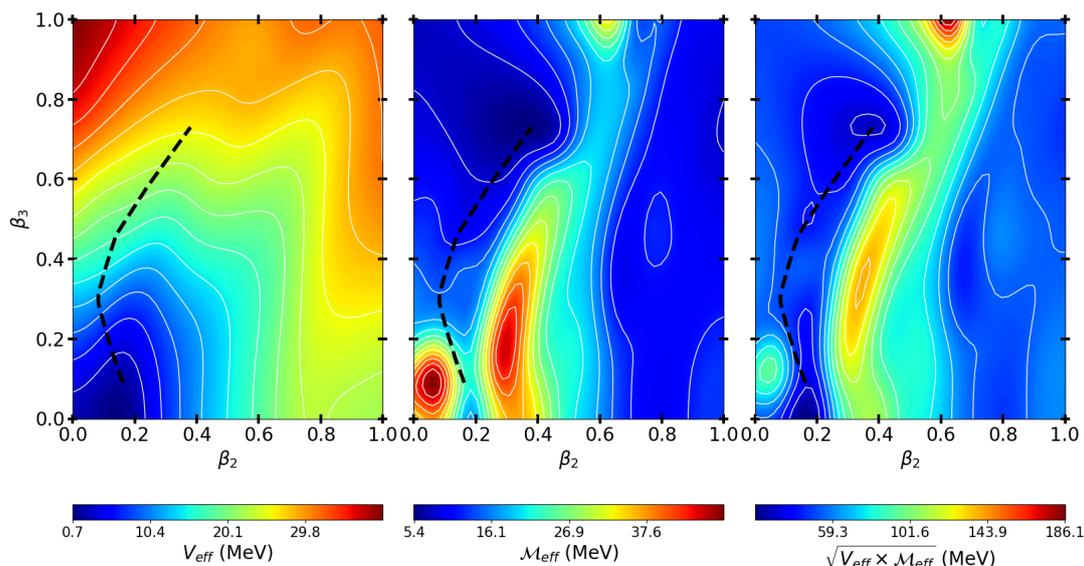


FIGURE 6.7 – Identique à Fig.6.5 pour le ^{104}Te .

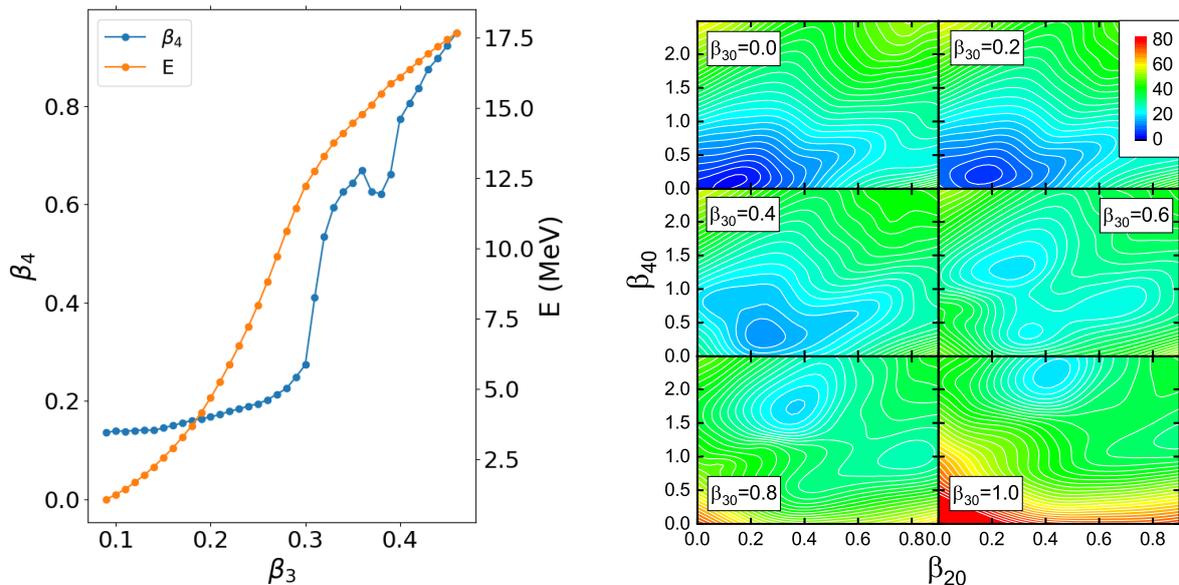
Afin de mieux comprendre cette évolution, il est possible de contraindre de la même façon ce paramètre β_4 (dont la forme a été présentée Fig.6.2) en plus des deux autres β_2 et β_3 . Les résultats sont montrés sur la Fig.6.8b pour quelques valeurs particulières de β_3 . On remarque alors que pour des valeurs élevées du paramètre octupolaire ($\beta_3 > 0.4$), le minimum de la PES change brutalement de valeur de β_4 pour passer de ~ 0.1 à ~ 1.4 . Cette discontinuité est le signe de la scission entre les deux clusters (d'un côté le ^{100}Sn et de l'autre la particule α).

Cette discontinuité du paramètre hexadécapolaire est un premier signe de l'importance de ce paramètre pour parvenir à une description cohérente du phénomène de radioactivité. La rapide évolution de ce paramètre (qui ne correspond cependant pas à une discontinuité ici) nous informe que ce paramètre encode une partie importante de la géométrie du système lors de la préformation puis émission de la particule α . Ce phénomène sera d'autant plus important dans la description des noyaux lourds où les géométries sont encore plus extrêmes.

6.5 Radioactivité α , cluster et 2α dans les noyaux lourds

Comme indiqué sur la Fig.6.1, la radioactivité α est possible sans être le mode de radioactivité dominant pour les noyaux $50 < Z < 80$ et $50 < N < 126$. Au-delà de $N > 126$, ce mode de radioactivité est dominant pour tous les noyaux au-dessus de $Z > 82$. Obtenir une description microscopique correcte de ce type de radioactivité dans cette partie de la carte des noyaux a donc un grand intérêt. En tout, ~ 1500 noyaux émetteurs α ont été expérimentalement découverts.

Dans cette région de la carte des noyaux, il est aussi commun de trouver de la radioactivité cluster comme mode de décroissance, bien que ce mode ne soit jamais dominant. Les noyaux pour lesquels ce mode se retrouve le plus souvent sont les isotopes du Ra-



(a) Valeur du paramètre de déformation β_4 en fonction de β_3 le long du chemin d'émission α de la Fig.6.7.

(b) PES dans le plan (β_2, β_4) du ^{104}Te pour des valeurs particulières du paramètre octupolaire β_3 . Les énergies sont données en MeV.

FIGURE 6.8 – Propriétés liées au paramètre hexadecapolaire.

dium, Thorium, Uranium et Plutonium avec des fragments composés principalement des isotopes du Carbone, de l'Oxygène, du Néon, du Magnésium et du Silicium[WR11; WZR18].

On s'intéresse donc ici à la possibilité de décrire ces deux différents types de radioactivité à l'aide du même formalisme que précédemment. La description des phénomènes de fission spontanée et induite ont déjà fait l'objet de nombreuses études et leurs descriptions sont désormais bien comprises du point de vue microscopique (avec des fonctionnelles relativistes [Zha+15; Tao+17] ou non [SR16]). En plus de ces modes d'ors-et-déjà connus de radioactivité, il est possible d'imaginer des modes de décroissance différents. En particulier ici, la prédiction d'un nouveau mode de radioactivité comprenant l'émission de deux α émis simultanément à 180° l'un de l'autre est aussi étudiée.

6.5.1 Difficulté et approche géométrique

Pour commencer cette étude, la PES dans le ^{224}Ra est calculée en utilisant la fonctionnelle DD-PC1 dans l'espace des coordonnées collectives $\beta_2 - \beta_3$ de la même façon que précédemment. Les résultats sont montrés sur la Fig.6.9. Il est possible de rechercher, dans cette PES, une configuration géométrique correspondant à l'émission d'une particule α ou d'autre cluster. Cependant, de telles structures sont absentes dans les calculs RHB effectués ici. Autrement dit, le phénomène de radioactivité α ne trouve pas d'explication simple avec pour seule contrainte les paramètres de déformations β_2 et β_3 .

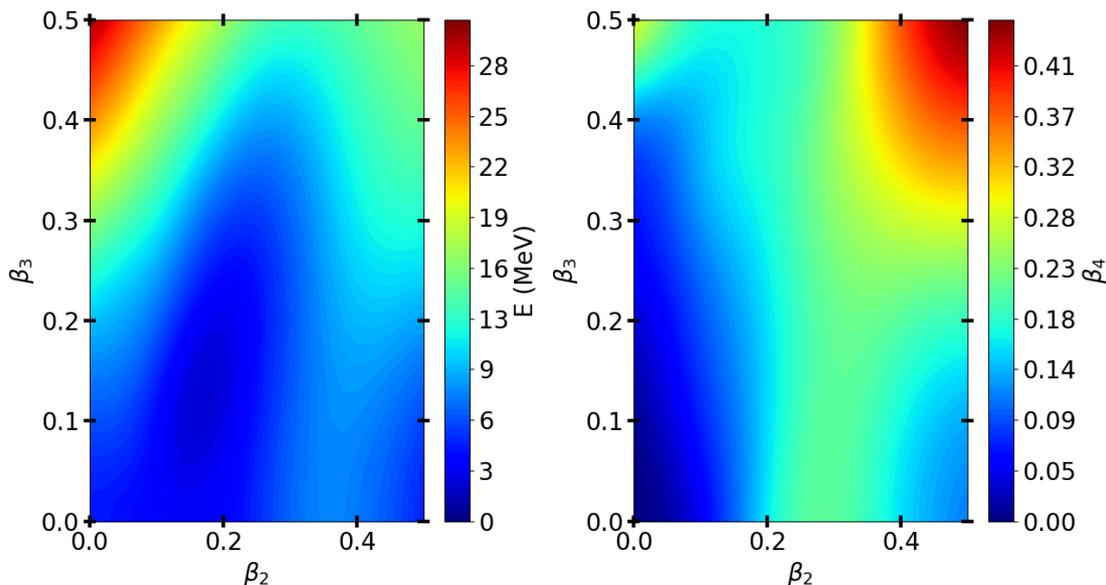


FIGURE 6.9 – (À gauche) PES 2D du ^{224}Ra en fonction des paramètres de déformation $\beta_2 - \beta_3$. (À droite) Valeur du paramètre de déformation hexadecapolaire β_4 dans la PES de gauche.

Plusieurs solutions existent afin de faire apparaître ces structures très clusterisées nécessaires afin d'étudier le phénomène de radioactivité α . Il est par exemple possible de contraindre directement l'intégrale de la densité dans les clusters préformés qui correspond donc à contraindre le nombre de particules dans ces clusters. On se propose ici d'approcher le problème de façon différente, et peut-être de façon plus générale, en continuant à contraindre les paramètres de l'expansion multipolaire β_i . Le paramètre suivant, aux vues des symétries du problème considéré ici, est le paramètre hexadecapolaire β_4 dont la forme est représentée sur la Fig.6.2. Ce paramètre, en plus d'être le terme suivant de l'expansion multipolaire, possède une géométrie intéressante pour notre problème puisqu'il semble favoriser l'apparition de clusters aux pôles. De plus, les résultats de la section précédente concernant le ^{104}Te montraient d'ors-et-déjà l'importance de ce paramètre. La partie droite de Fig.6.9 montre l'évolution de la valeur de ce paramètre de déformation hexadecapolaire β_4 en fonction de β_2 et β_3 . En effet, ce paramètre β_4 n'étant pas contraint, il prend, pour chaque couple $\beta_2 - \beta_3$, la valeur qui minimise l'énergie de l'état. On remarque en particulier que sa valeur n'excède pas $\beta_4^{\max} \sim 0.45$. Afin d'obtenir une estimation qualitative des valeurs de β_4 nécessaires à voir émerger des structures très clusterisées voire séparées, il est possible de faire appel à une méthode purement géométrique : considérons un noyau $^N_Z X$ dont on cherche à étudier la désintégration $^N_Z X \rightarrow ^{N-2}_{Z-2} Y + \alpha$. Nous procédons alors comme suit :

- calculer la densité associée au noyau $^{N-2}_{Z-2} Y$ avec un simple modèle de Wood-Saxon (WS) par exemple⁵
- calculer la densité d'une particule α avec, encore une fois, un modèle simple comme WS
- placer ces deux densités l'une au-dessus de l'autre afin de former artificiellement

5. Il est bien sûr possible de procéder à ce calcul avec un code RHB.

une configuration du noyau ${}^N_Z X$ où une particule α est émise

— calculer les paramètres géométriques de cette configuration particulière.

Cette façon de procéder permet d'obtenir des informations très utiles quant à la localisation dans l'espace des paramètres où chercher une telle configuration et ainsi guider les calculs d'une PES. De plus, cette méthode permet de comprendre pourquoi les seules contraintes sur les paramètres β_2 et β_3 ne peuvent permettre d'aboutir à une description du phénomène de radioactivité α dans les noyaux lourds. On peut montrer de façon très générale, si l'on fait l'approximation d'une densité constante et que l'on considère des noyaux sphériques⁶ :

$$\langle Q_{2,0} \rangle = 2d^2 \quad (6.38a)$$

$$\langle Q_{3,0} \rangle = 2d^3 \quad (6.38b)$$

$$\langle Q_{4,0} \rangle = 8d^4 \quad (6.38c)$$

où d représente la distance entre les deux centres du noyau fils (supposé centré en $(0, 0)$) et de la particule α . Les moments multipolaires évoluent donc comme

$$\langle Q_{i,0} \rangle \propto d^i \quad (6.39)$$

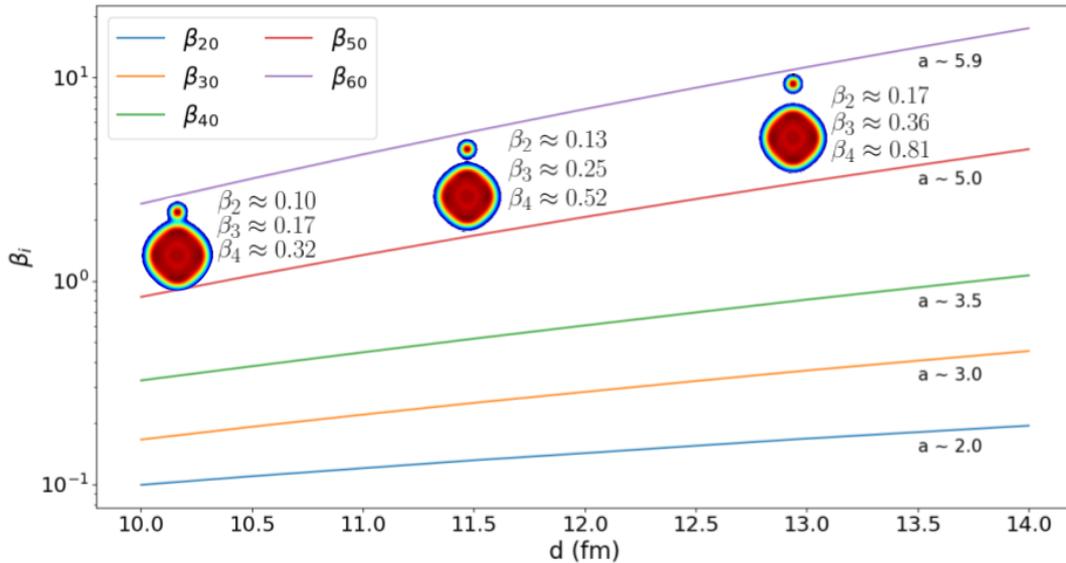


FIGURE 6.10 – Évolution des déformations β_i en fonction de la distance d dans le cadre du modèle géométrique. Les pentes sont dénotées a et sont données pour chacune des courbes. Des inserts montrant certaines densités sont aussi affichés avec les déformations correspondantes.

Afin d'illustrer la méthode précédemment introduite, de telles configurations géométriques sont tracées sur la Fig.6.10 dans le cas du ${}^{224}\text{Ra}$. Les évolutions des paramètres β_i pour $i = 2, \dots, 6$ sont aussi tracées permettant de vérifier que les moments multipolaires évoluent comme $\langle Q_{i,0} \rangle \propto d^i$ avec une exception pour le moment hexadécapolaire qui

6. Approximation équivalente à considérer une répartition de masse ponctuelle.

semble évoluer comme $\langle Q_{4,0} \rangle \propto d^{3.5}$. Il est particulièrement intéressant de remarquer que, pour obtenir une structure suffisamment séparée, le paramètre β_4 prend des valeurs proches de $\beta_4 \sim 0.7$, loin du maximum visible (~ 0.4) dans la partie droite de Fig.6.9. Cette simple analyse géométrique nous permet de comprendre que les configurations géométriques avec un α émis ne sont pas énergétiquement favorisées et qu'une contrainte supplémentaire sur un autre paramètre est nécessaire⁷. Dans la suite de ce chapitre, les PES dans l'espace des coordonnées collectives $(\beta_2, \beta_3, \beta_4)$ sont donc étudiées.

6.5.2 Radioactivité α dans le ^{212}Po

Afin de tester le modèle dans cette nouvelle région des noyaux lourds, on se propose d'étudier le ^{212}Po qui est un émetteur α bien connu. Pour ce noyau lourd, la contrainte des paramètres quadropolaire et octupolaire seulement ne permet pas d'obtenir une configuration géométrique dans laquelle une particule α est émise, comme dans le cas du ^{224}Ra discuté précédemment. Ce problème est inhérent au fait que nous sommes en train d'essayer de localiser un cluster de quatre nucléons dans un ensemble en possédant plus de 200. Par conséquent, une configuration où ces 4 nucléons forment un cluster n'est pas forcément énergétiquement favorable. Ainsi, la contrainte des seuls paramètres β_2 et β_3 ne permet pas d'obtenir une telle configuration géométrique.

Pour parvenir à obtenir la configuration finale désirée, on utilise le modèle géométrique décrit précédemment. Cette construction "à la main" a été réalisée en faisant converger des calculs RHB pour les noyaux de ^{208}Pb et de ^4He . Ensuite, ces densités ont été superposées en mettant le noyau α au-dessus de celui de Plomb. Les paramètres géométriques peuvent alors être calculés très facilement. Ce modèle géométrique permet donc de comprendre l'importance du paramètre β_4 dans la description du phénomène de décroissance α dans les noyaux, comme il avait déjà été fait référence précédemment dans le cas des noyaux de masses intermédiaires. Le calcul de cette PES avec trois paramètres contraints possède un coût numérique bien plus important. Ainsi, les méthodes introduites dans la sous-section précédente nous permettent de calculer ces surfaces dans des temps de l'ordre de la semaine.

La PES 3D est montrée sur la Figure 6.11 pour certaines valeurs de β_4 . On remarque que, pour les déformations $\beta_{40} \geq 0.5$ et $(\beta_{20}, \beta_{30}) \simeq (0.15, 0.3)$, un minimum prononcé se développe dans la surface d'énergie potentielle à environ 25 MeV au-dessus du minimum d'équilibre. Les points rouges dans chaque PES indiquent les points sur le chemin de moindre action dynamique pour l'émission α , et les encarts montrent les densités de nucléons intrinsèques correspondantes le long du chemin, à partir de la déformation d'équilibre jusqu'au point de scission. L'action calculée le long du chemin dynamique jusqu'au point de scission est de $S_1 = 7.07$.

La distribution de densité au point de scission montre clairement la formation d'un cluster de nucléons et il a été vérifié, comme précédemment, que ce cluster correspond bien à un noyau α . Au-delà du point de scission, la dynamique entre les deux fragments est déterminée par la répulsion coulombienne et nous avons calculé la valeur de $S_2 = 9.46$

7. Rien ne nous certifie qu'une seule contrainte supplémentaire nous permettra de décrire une configuration géométrique particulière. Plusieurs contraintes sur différents moments peuvent être nécessaires suivant le système étudié.

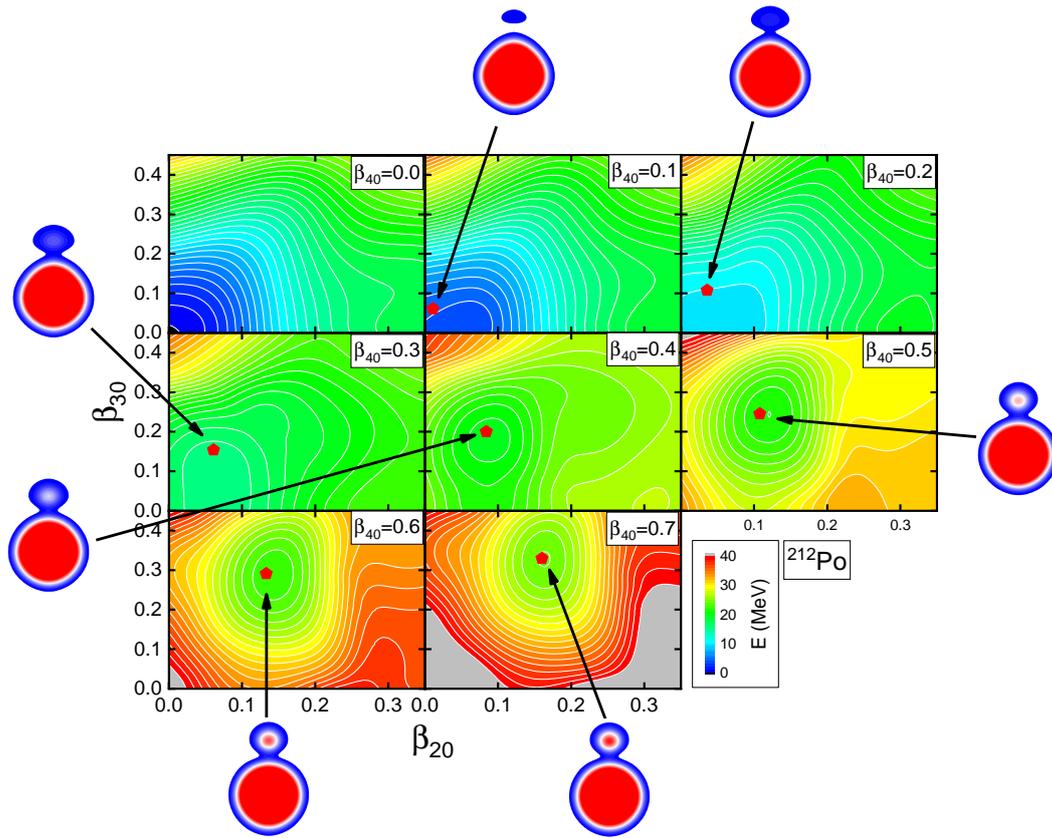


FIGURE 6.11 – PES dans le plan (β_2, β_3) pour certaines valeurs de β_4 pour le ^{212}Po . Les points rouges représentent le chemin de moindre action dynamique. Les inserts représentent les densités à certaines déformations le long du chemin de moindre action. Figure tirée de [Mer+21].

pour la contribution correspondante à l'action. Par conséquent, la demi-vie alpha prédite est de $\tau_\alpha^{th} = 0.6 \mu\text{s}$, à comparer avec la valeur expérimentale de $\tau_\alpha^{exp} = 0.3 \mu\text{s}$ [NND]. L'accord théorie-expérience est donc plutôt correct avec un ordre de grandeur identique. Ce résultat encourageant nous permet de confirmer la faisabilité de décrire ce mode radioactivité dans ce formalisme.

6.5.3 Radioactivité α et cluster dans le ^{224}Ra

Revenons maintenant à la description de la radioactivité dans le noyau de ^{224}Ra . La méthode reste identique et la PES 3D est calculée de manière équivalente et est montrée sur la Fig.6.12. Les paramètres de couplage originaux de la force d'appariement ont été ajustés afin de reproduire les gaps d'appariement dans la matière nucléaire tel que calculé avec la paramétrisation D1S de l'interaction de Gogny [BGG91 ; TMR09]. Dans le cas du ^{224}Ra , l'appariement est ajusté sur les gaps du ^{224}Ra ce qui conduit, par rapport aux valeurs originales, à une augmentation des forces d'appariement des neutrons et des protons de 9% et 12% respectivement. Cette modification de la force d'appariement est cohérente avec les conclusions de l'étude globale récente de l'interaction d'appariement

séparable, lorsqu'elle est utilisée avec des fonctions de densité d'énergie relativistes [TA21].

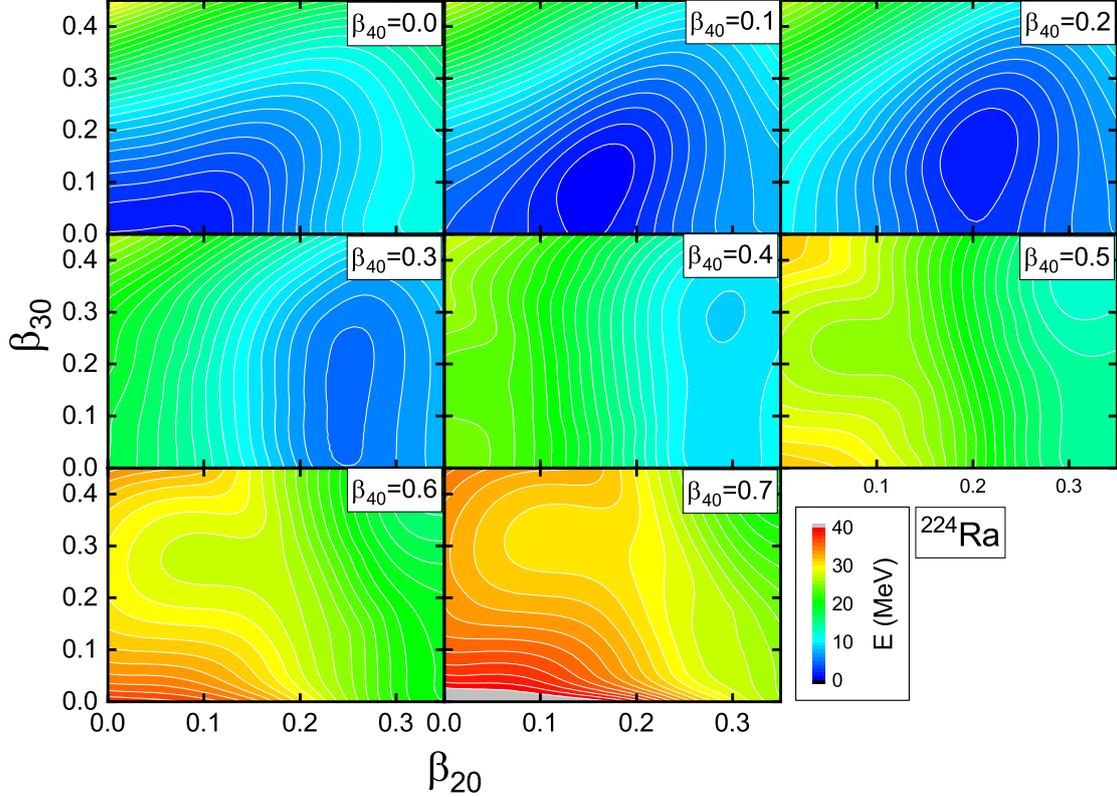


FIGURE 6.12 – PES dans le plan (β_2, β_3) pour certaines valeurs de β_4 pour le ^{224}Ra .

Dans le cas de ^{224}Ra , le point de scission pour l'émission α se trouve à $(\beta_{20}, \beta_{30}, \beta_{40}) \simeq (0.15, 0.31, 0.68)$. La contribution à l'action le long du chemin jusqu'au point de scission est de $S_1 = 9.96$, et du point de scission à s_{out} $S_2 = 20.50$. Cela conduit à une demi-vie théorique de $\tau_{\alpha}^{\text{th}} = 3.6$ jours, en accord avec les résultats expérimentaux de 9.5 jours [NND].

Le mode cluster peut aussi être décrit à l'aide de ces résultats, mais il s'avère que la contrainte sur le moment hexadécapolaire n'est pas nécessaire. Il est possible d'émettre une hypothèse ici pour expliquer ce point en proposant que le cluster de ^{14}C étant plus gros, les configurations géométriques seront moins déformées (dans le sens où les β_i seront plus faibles que dans le cas de la radioactivité α) ce qui pourrait avoir tendance à énergétiquement favoriser ces configurations. Les résultats de la PES 2D sont présentés Fig.6.13. L'action le long de ce chemin et ainsi que la partie Coulombienne donnent $S = 15.80 + 27.95 = 43.75$ menant à un temps de demi-vie de $\tau_{^{14}\text{C}}^{\text{th}} = 10^{17.46}$ s. Le temps de vie expérimental se trouve à un peu moins de deux ordres de grandeur plus bas à $\tau_{^{14}\text{C}}^{\text{exp}} = 10^{15.86}$ s. Ainsi, la description de cette radioactivité cluster s'avère plus imprécise que celle de la radioactivité α tout en restant à moins de deux ordres de grandeur de l'expérience.

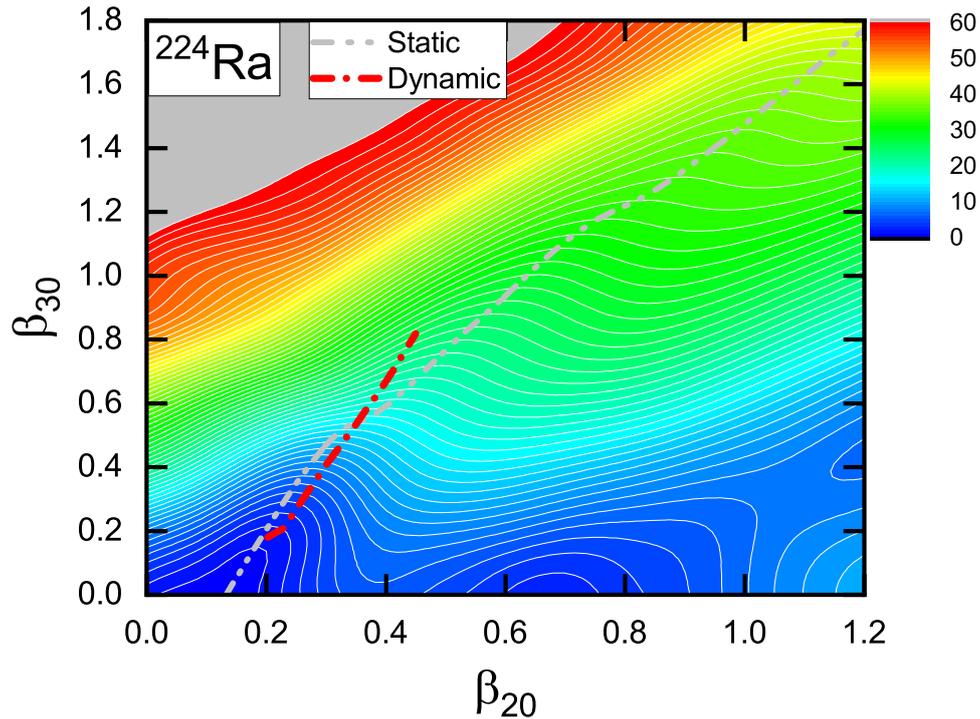


FIGURE 6.13 – PES dans le plan (β_2, β_3) . Le trait pointillé rouge représente le chemin de moindre action dynamique pour l'émission d'un cluster de ^{14}C . Celui en gris représente le chemin de moindre action statique (i.e. qui minimise l'énergie).

6.5.4 Radioactivité 2α

L'étude détaillée de la PES 3D présentée sur la Fig.6.12 nous a de plus permis d'identifier un nouveau mode de radioactivité correspondant à l'émission de deux particules α dos à dos dont la densité est donnée sur la Fig.6.14.

L'idée d'une possible radioactivité 2α n'est pas nouvelle. En plus du processus séquentiel 2α , ont également été prédites[Poe+99] et détectées[GMK05] des émissions de deux particules α pendant la fission. L'émission d'un cluster ^8Be a également été prédite [PG10] et ce processus devrait conduire à une émission de deux particules α en raison de la nature résonante du ^8Be ($Q_\alpha = 92$ keV). Des calculs phénoménologiques montrent que le temps de vie associé à un tel processus serait compris entre $\tau \sim 10^{50-100}$ secondes [PI85 ; Tre21], très loin de possibles considérations expérimentales. Une autre étude a obtenu un temps de vie plus faible, de l'ordre de $\tau \sim 10^{27}$ secondes [Poe+02], cependant toujours inaccessible expérimentalement. Ce que l'on propose d'étudier ici est différent puisqu'il s'agit d'une émission spontanée symétrique de deux particules α . Plus récemment, une étude systématique a été entreprise [SJ21] utilisant un modèle généralisé de goutte liquide en faisant clairement la distinction entre une émission spontanée 2α et l'émission d'un cluster de ^8Be mais trouve des temps de vie équivalents.

Une condition nécessaire à l'émission spontanée de 2α est une valeur du Q réaction

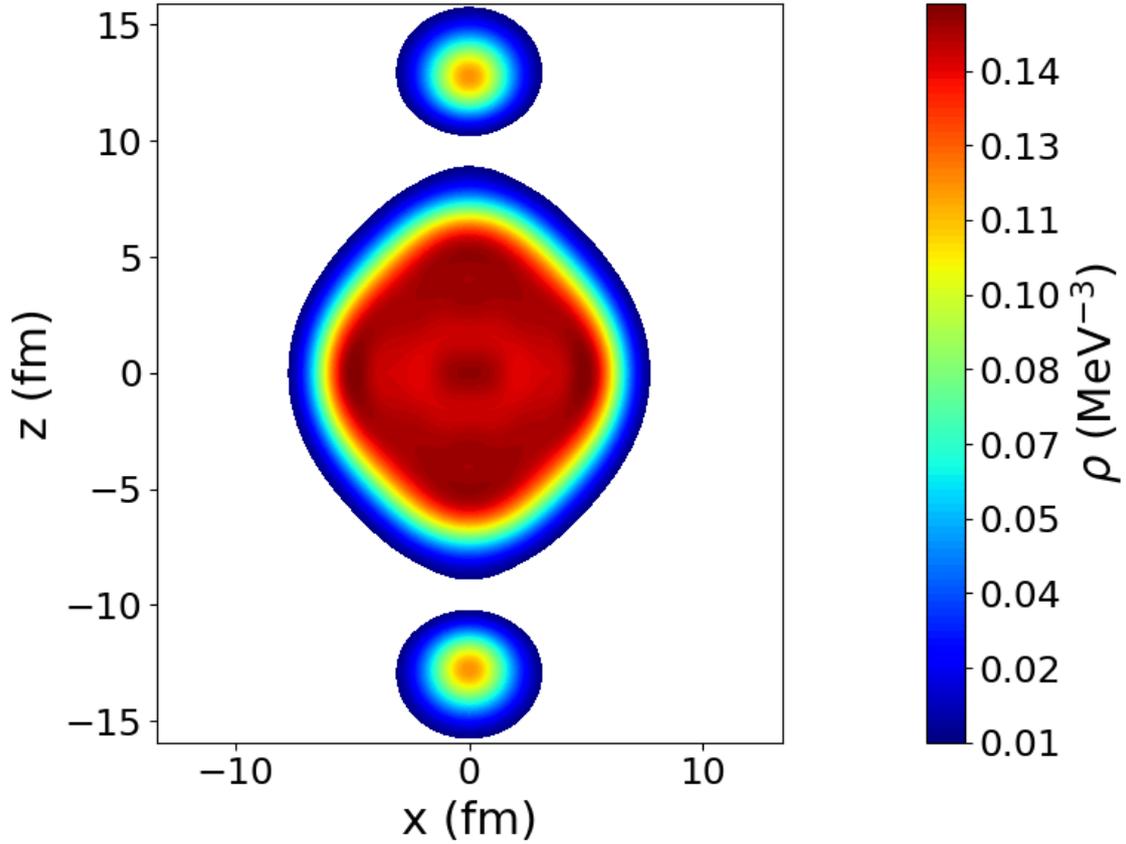


FIGURE 6.14 – Densité d'un état RHB où deux particules α sont émises dans le ^{224}Ra .

positive. Le $Q_{2\alpha}$ de réaction de cette émission est

$$\begin{aligned}
 Q_{2\alpha} &= B\left({}_Z^A Y_2\right) - \left(B\left({}_{Z-4}^{A-8} X\right) + 2B\left({}_2^4 \text{He}\right)\right) \\
 &= B\left({}_Z^A Y_2\right) - \left(B\left({}_{Z-2}^{A-4} Y_1\right) + B\left({}_2^4 \text{He}\right)\right) + B\left({}_{Z-2}^{A-4} Y_1\right) - \left(B\left({}_{Z-4}^{A-8} X\right) + B\left({}_2^4 \text{He}\right)\right) + \Delta E \\
 &= Q_{\alpha 2} + Q_{\alpha 1} + \Delta E
 \end{aligned} \tag{6.40}$$

où $Q_{\alpha 1,2}$ sont les valeurs de Q pour la désintégration α des noyaux parent et fils, respectivement. ΔE est la différence d'énergie d'excitation entre la somme de celle du noyau fils et de celle du noyau petit-fils dans la première désintégration α , et celle du noyau petit-fils dans la deuxième désintégration α . Dans la suite, nous considérons, pour simplifier, les transitions α ou 2α impliquant uniquement les états fondamentaux des noyaux fils ou petit-fils (c'est-à-dire, $\Delta E=0$ ⁸).

Avant d'étudier ce processus à l'aide de calculs RHB complets, il est intéressant de répertorier les différents noyaux candidats. La Fig. 6.15 présente une étude globale de ces candidats possibles pour la désintégration de 2α , c'est-à-dire une carte de noyaux $N > 50$ et $Z > 50$ avec $Q_{2\alpha}$ positif, calculée à partir des masses expérimentales disponibles [WAT03]. Un grand nombre de noyaux sont des candidats possibles pour l'émission de 2α , en particulier au-dessus de la vallée de stabilité, comme c'est le cas pour l'émission

8. Cette approximation est soutenue par les états $J^\pi = 0^+$ des noyaux fils.

d'un seul α . Bien sûr, le principal problème de la détection d'un éventuel mode 2α est sa probabilité extrêmement faible. Par exemple, les durées de vie beaucoup plus courtes de la désintégration bêta de la plupart de ces noyaux empêchent la détection expérimentale des modes de désintégration α . Un autre problème est celui du bruit de fond lié à une émission α du noyau père. Il est alors pertinent de considérer les noyaux pour lesquels l'une des désintégrations séquentielles simples α est énergétiquement interdite. Cependant, il n'existe que très peu de tels noyaux (^{122}Xe et ^{156}Gd) et les temps de vie 2α associés sont généralement très longs ($> 10^{60}$ secondes). Par conséquent, le principal problème expérimental est la très longue demi-vie (faible probabilité) pour séparer les signaux de désintégration de 2α du bruit de fond. Il faut toutefois noter que c'est également le cas pour la radioactivité cluster qui a déjà été observée, avec des demi-vies partielles comprises entre 10^{11} et 10^{26} secondes, et des rapports d'embranchement par rapport à la désintégration dominante α compris entre 10^{-9} et 10^{-16} . L'émission de clusters allant de ^{14}C à ^{34}Si a été observée dans la région des actinides, de ^{221}Fr à ^{242}Cm [PG10]. Il est donc nécessaire de sélectionner des noyaux dont le rapport d'embranchement $R = \frac{\tau_\alpha}{\tau_{2\alpha}}$ est le plus grand possible.

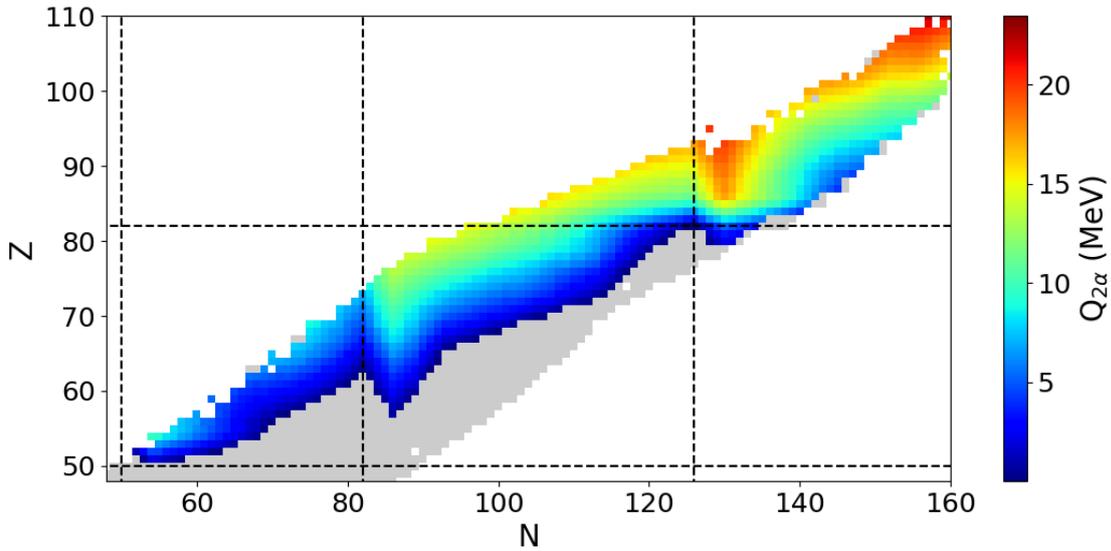


FIGURE 6.15 – Noyaux $N > 50$ et $Z > 50$ avec $Q_{2\alpha} > 0$, calculés à partir des masses expérimentales [WAT03]. Les noyaux $Q_{2\alpha} < 0$ sont représentés en gris.

Étant donné la symétrie $z \rightarrow -z$ de la configuration où 2α sont émis symétriquement, une contrainte sur les paramètres $\beta_2 - \beta_4$ est suffisante pour étudier ce mode particulier. La PES associée est affichée sur la Fig.6.16. Le point de scission est situé en $(\beta_2, \beta_4) \simeq (0.28, 1.3)$ et les contributions à l'action sont de $S = 16.2 + 23.9 = 40.1$. Le temps de vie associé à cette radioactivité 2α est de $\tau_{2\alpha}^{th} \approx 10^{14.24}$ s. Ce temps de vie peut être comparé à celui de la radioactivité α dans ce même noyau qui était de $\tau_{2\alpha}^{th} \approx 10^{5.49}$ s soit un rapport d'environ $R_{\alpha-2\alpha}^{th} \approx 10^9$. Il est intéressant de remarquer qu'expérimentalement, le rapport d'embranchement pour la radioactivité cluster vaut $R_{\alpha-^{14}\text{C}}^{exp} \approx 10^{10}$, soit un rapport du même ordre de grandeur que celui de la radioactivité 2α prédite ici. Ces valeurs rendent la détection de ce mode potentiellement envisageable.

Une étude plus systématique de ce type de radioactivité pourrait permettre d'élargir

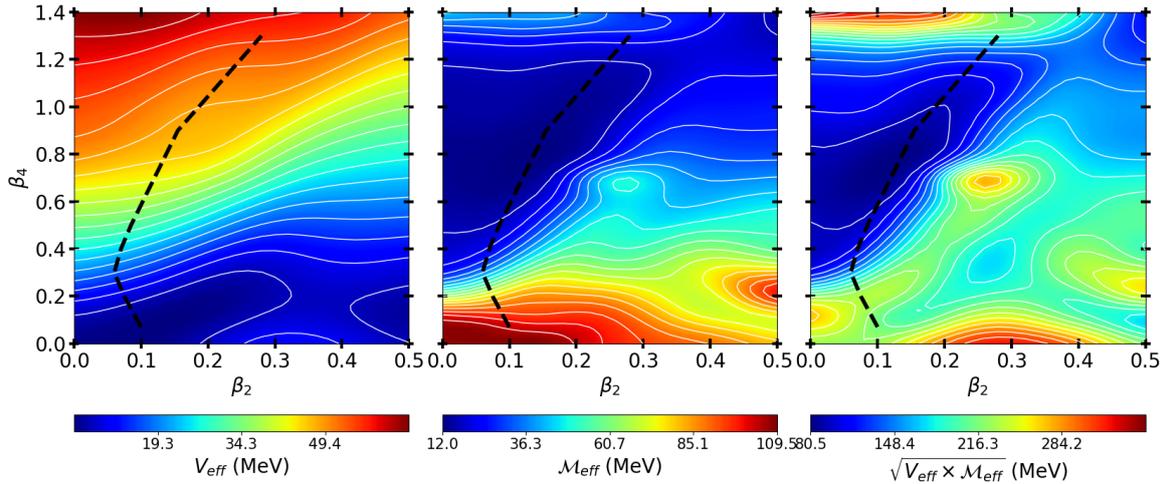


FIGURE 6.16 – PES 2D (à gauche) dans l’espace $\beta_2 - \beta_4$ du ^{224}Ra . Les masses inertielles et le produit entre la PES et les masses inertielles sont données respectivement au centre et à droite. Le trait en pointillé représente le chemin dynamique amenant à l’émission de deux particules α dos à dos.

le nombre de candidats afin de faciliter de possible études expérimentales. Bien que le calcul seul de la PES en (β_2, β_4) permette d’obtenir un temps de vie pour la radioactivité 2α , une comparaison avec le temps de vie de la radioactivité α semble indispensable afin de calibrer correctement les calculs et obtenir une estimation du bruit de fond 1α pour les possibles expériences. Ce dernier, comme nous l’avons vu précédemment, requiert le calcul d’une PES 3D, beaucoup plus couteuse numériquement, empêchant alors des calculs à grande échelle sur de nombreux candidats. Afin de sélectionner des noyaux d’intérêt, il est pertinent de revenir sur les différentes contributions au temps de vie, en particulier sur les contributions à l’action jusqu’au point de scission puis jusqu’à l’émission. Dans les différents résultats présentés précédemment, ces deux contributions sont du même ordre de grandeur, mais se doivent d’être déterminées avec précision étant donné la dépendance exponentielle du temps de vie vis-à-vis de cette quantité. La première partie du chemin dépend de paramètres complexes liés à l’interaction nucléaire, il est donc difficile de l’étudier de manière qualitative. En revanche, la partie Coulombienne est déterminée par deux aspects principaux d’après l’Eq.(6.25) :

- la distance R initiale (celle correspondant au point de scission)
- la valeur du Q de réaction.

La distance est généralement fixée par des aspects géométriques : il faut que le cluster soit à une distance de l’ordre de $\sim R_{\text{fils}} + 1$ fm pour qu’il soit suffisamment séparé pour ne plus ressentir les effets de l’interaction forte du noyau fils. La valeur du Q de réaction est quant à elle fixée par des considérations énergétiques et peut nous permettre de déterminer plus facilement de bons candidats. En particulier, plus la valeur de Q est élevée, plus le potentiel effectif est faible et moins la contribution à l’action Coulombienne sera élevée. Une diminution de cette action revient à diminuer le temps de vie ce qui peut rendre une détection expérimentale plus aisée. La valeur de ces Q de réaction est donnée dans la Fig.6.15. On remarque alors qu’une zone particulièrement intéressante est celle autour des isotopes du Radium, Thorium et Uranium ($Z \sim 90$ et

$N \sim 128$). Deux de ces isotopes (^{220}Ra et ^{222}Ra) ont été étudiés et les résultats sont présentés dans le tableau Tab.6.1 en comparaison avec le ^{212}Po et le ^{224}Ra .

Noyau	$Q_{2\alpha}$	S_1^α	S_2^α	$\log(\tau_\alpha)$	$S_1^{2\alpha}$	$S_2^{2\alpha}$	$\log(\tau_{2\alpha})$	$\log(R)$
^{212}Po	9.47	7.07	9.46	-6.22 (-6.52)	15.56	29.22	18.36	24.88
^{220}Ra	15.79	9.61	14.18	0.12 (-1.7)	16.22	16.76	8.1	7.98
^{222}Ra	13.94	9.44	17.02	2.44 (1.58)	15.52	19.92	10.24	7.80
^{224}Ra	12.19	9.96	20.50	5.91 (5.50)	16.15	23.89	14.24	8.33

TABLE 6.1 – Résultats des calculs de temps de vie dans les noyaux de ^{212}Po et $^{220,222,224}\text{Ra}$. Les $Q_{2\alpha}$ sont donnés en MeV. S_1 représente la contribution à l'action entre le GS et le point de scission et S_2 représente la contribution Coulombienne (i.e. du point de scission jusqu'à l'émission). Les temps de vie expérimentaux sont affichés entre parenthèses dans la colonne 4 pour la radioactivité α . La dernière colonne, $\log(R)$, représente le logarithme du ratio des temps de vie.

Il est tout d'abord intéressant de remarquer la corrélation importante entre les $Q_{2\alpha}$ et le ratio des temps de vie (et directement avec le temps de vie 2α). Ce facteur est donc déterminant dans l'évaluation des temps de vie et permet de sélectionner à l'avance des noyaux d'intérêt. Dans le cas du ^{212}Po , le $Q_{2\alpha}$ est particulièrement faible étant donné que $Q_\alpha(^{208}\text{Pb}) \sim 0.52$ MeV. En revanche, dans le cas du ^{220}Ra , le $Q_{2\alpha}$ se retrouve particulièrement élevée grâce à $Q_\alpha(^{212}\text{Po}) \sim 8.95$ MeV.

6.5.5 Discussion sur la présence d'une barrière de potentiel

Jusqu'à présent, le critère utilisé afin de calculer le chemin dans les différentes PES reposait sur le nombre de nucléons présent dans les clusters : à partir du moment où le bon nombre de nucléons est présent dans les clusters, le point de scission est défini, puis un calcul ne prenant en compte que Coulomb est effectué jusqu'à l'émission finale. Cependant, dans un tel processus, une barrière de potentiel est forcément présente. Dans les figures présentées dans les sections précédentes, une telle barrière n'apparaît à aucun endroit, signifiant qu'un travail supplémentaire doit être effectué afin de la rendre visible. Il est cependant important de remarquer ici que, bien qu'elle n'apparaisse pas explicitement dans les PES présentées précédemment, les temps de vie α calculés et comparés à l'expérience sont du bon ordre de grandeur, signifiant que notre critère de point de scission fait sens.

Ce problème est principalement relié à la base d'oscillateur harmonique utilisée ici qui empêche le noyau de prendre toutes les formes possibles. En particulier, il a été trouvé que, dans nos calculs, à un $\hbar\omega$ donné, la distance entre les clusters et le noyau fils est fixée. Peu importe les contraintes β_i utilisées, cette distance restera constante et il sera donc impossible de faire s'éloigner les clusters, ce qui empêche d'obtenir une description satisfaisante de la barrière de potentiel.

Afin de remédier à ce problème, il est possible de modifier les paramètres de la base d'oscillateur, en particulier sa fréquence ω . Cette dernière est généralement fixée à l'aide d'une formule empirique $\hbar\omega = 41A^{-1/3}$ et est donc fixe lors des calculs dans un même noyau. On se propose donc d'effectuer des calculs supplémentaires pour des valeurs de $\hbar\omega$ différentes.

Dans la suite, nous nous intéressons au cas de la radioactivité 2α dans le ^{224}Ra qui ne nécessite de contraindre que deux coordonnées collectives, β_2 et β_4 . On procède donc au calcul de la PES pour différentes valeurs de $\hbar\omega$ comprises entre 4.5 MeV et 7.0 MeV. Les différentes PES obtenues pour ces valeurs sont présentées sur la Fig.6.17. Sont aussi indiquées en noirs les configurations géométriques où les clusters possèdent 4 nucléons chacun. Plusieurs effets sont visibles :

- la diminution de $\hbar\omega$ entraîne une diminution de l'énergie sauf au niveau du fondamental.
- une modification de $\hbar\omega$ modifie aussi la configuration géométrique associée. En effet, une configuration possédant 4 nucléons dans les clusters correspond à une déformation de (0.28, 1.35) pour $\hbar\omega = 6.7$ MeV par exemple contre (0.38, 2.05) dans le cas de $\hbar\omega = 5.6$ MeV.
- la topologie générale de la PES n'est pas impactée par $\hbar\omega$.

Afin d'étudier le comportement post scission, la Fig.6.18 montre l'évolution de l'énergie du système en fonction du paramètre de déformation hexadécapolaire β_4 . Le chemin jusqu'à la scission est repris des sections précédentes, i.e. effectué à $\hbar\omega = 6.7$ MeV constant. Les points affichés au-delà du point de scission correspondent tous à des $\hbar\omega$ différents. Il est important de noter ici que nous ne cherchons pas à minimiser l'énergie du système par rapport au $\hbar\omega$ mais bien à extraire des configurations géométriques pertinentes pour notre problème. On remarque alors que, sans corrections, les énergies de ces configurations restent constantes, malgré l'éloignement des clusters.

Finalement, cette façon de procéder pose une question importante : quel $\hbar\omega$ doit-on utiliser afin d'effectuer les calculs jusqu'au point de scission ? Doit-on minimiser l'énergie par rapport à ce paramètre de la base ? Obtient-on des résultats indépendants de la valeur de $\hbar\omega$? Des calculs précis seront nécessaires pour statuer, mais des éléments de réponses peuvent déjà être apportés. Une diminution de $\hbar\omega$ entraîne une diminution de l'énergie, comme indiqué précédemment. Cela entraîne aussi une modification de la densité en chaque point (β_2, β_4) modifiant à son tour le point de scission. Ces deux effets rentrent donc en compétition. De plus, au point de scission, à un $\hbar\omega_2 < \hbar\omega_1$, la distance entre noyau fils et clusters est telle que $d_2 > d_1$. Ainsi, la partie Coulombienne de l'action à calculer après la scission sera diminuée étant donné que les clusters seront déjà plus loin du noyau fils. Ces trois différents effets rentrent donc en compétition et seul des calculs microscopiques précis pourront permettre d'estimer les contributions des différents calculs et les erreurs associées. Des calculs qualitatifs préliminaires semblent montrer que les temps de vie peuvent être impactés de quelques ordres de grandeur, mais que les rapports d'embranchement restent relativement constants.

Pour conclure, il est important de rappeler que la méthode mise en œuvre précédemment où le seul critère de la présence de 4 nucléons dans les clusters est utilisé semble suffisant pour obtenir une description qualitative et quantitative des phénomènes de radioactivité α et cluster. Il est donc raisonnable de supposer que les temps de vie prédits

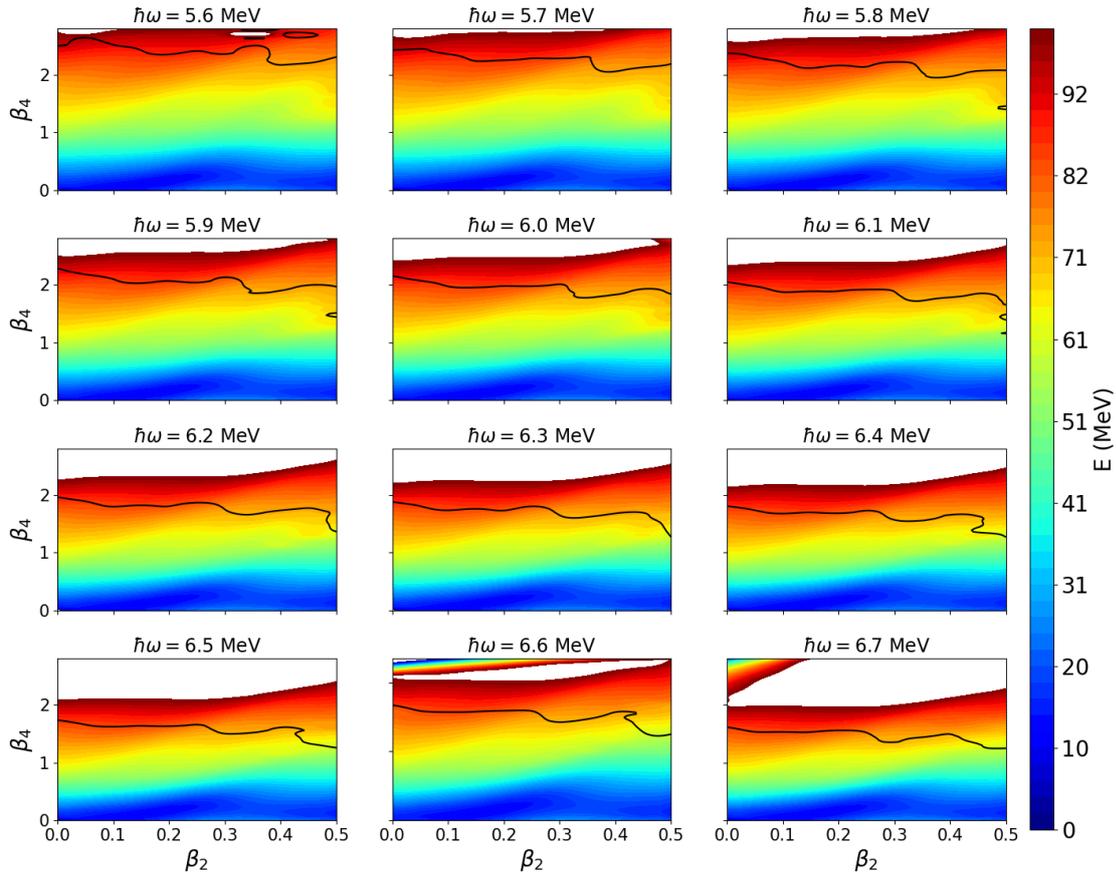


FIGURE 6.17 – PES dans l’espace des coordonnées collectives β_2 et β_4 . Chaque PES a été calculée à des valeurs de $\hbar\omega$ différentes, allant de 5.6 (en haut à gauche) à 6.7 (en bas à droite). Une échelle de couleurs identiques est utilisée pour toutes les PES. Les traits noirs représentent les points où les clusters sont bien composés de 4 nucléons.

pour la radioactivité 2α ainsi que les rapports d’embranchement sont fiables vis-à-vis de la méthode utilisée.

6.6 Conclusion

Le formalisme des EDF relativistes décrit dans les chapitres précédents, couplé à la méthode ATDHFB présentée ici, ont donc permis d’obtenir une description cohérente et quantitative du phénomène de radioactivité α dans les noyaux aussi bien de masses intermédiaires ($^{108}\text{Xe} \rightarrow ^{104}\text{Te} \rightarrow ^{100}\text{Sn}$) que dans les noyaux lourds ($^{220,222,224}\text{Ra}$, ^{212}Po).

La description de ces phénomènes a été entreprise en calculant des surfaces d’énergie potentielle axialement symétriques dans le plan des coordonnées collectives quadrupolaire et octupolaire pour les noyaux de ^{104}Te et ^{108}Xe . Dans le cas des noyaux lourds étudiés ici (Ra et Po), le paramètre de déformation hexadécapolaire joue un rôle important dans le processus de préformation puis émission d’une particule α . Une contrainte sur ce moment a donc été ajoutée et des PES 3D ont été calculées. Des chemins dynamiques

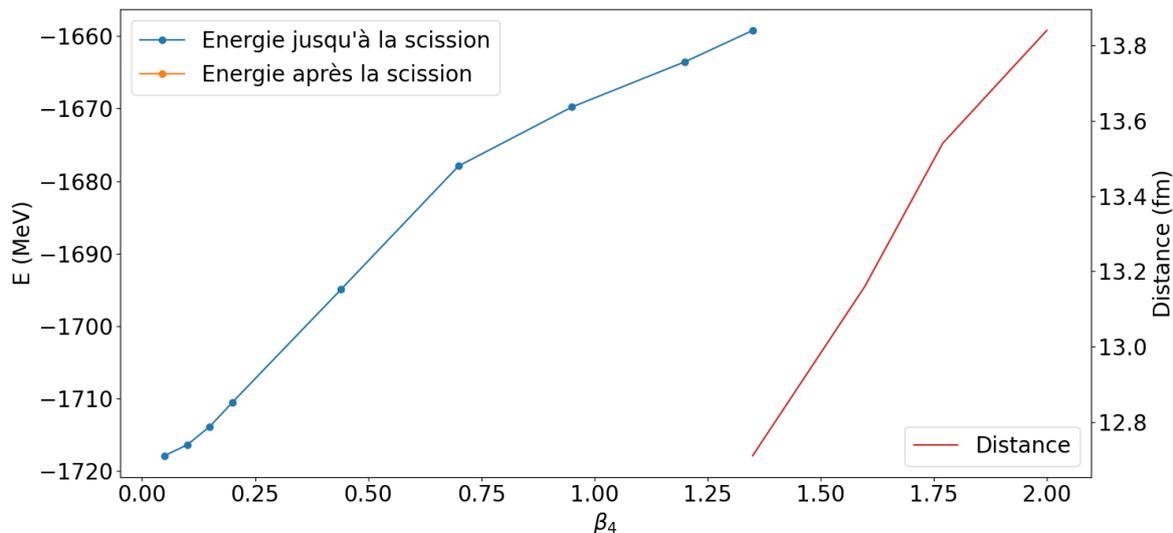


FIGURE 6.18 – Évolution de l'énergie avant (bleu) et après la scission (orange). La distance des clusters au noyau fils est affichée en rouge.

de moindre action dans ces différentes hypersurfaces ont été déterminés, permettant de suivre le processus d'émission de particules alpha depuis la déformation d'équilibre du champ moyen jusqu'au point de scission. Ce point de scission a été défini comme la configuration géométrique où les clusters possèdent 4 nucléons suffisamment séparé du noyau fils. Après la scission, la répulsion coulombienne entre les deux fragments détermine la dynamique jusqu'à l'émission.

En prenant en compte les masses inertielles dans l'approximation perturbative ATDHFB, les demi-vies de désintégration α calculées dans les noyaux étudiés ici sont en accord quantitatif avec les différentes valeurs expérimentales. La description de la radioactivité cluster a aussi été entreprise dans le cas du ^{224}Ra , émetteur ^{14}C expérimentalement mesuré. Les résultats théoriques, bien que moins bons que ceux de la radioactivité α , restent en bon accord avec les résultats expérimentaux.

Un nouveau mode de radioactivité correspondant à l'émission simultanée de deux particules α dos à dos a aussi été prédit. Les résultats quantitatifs montrent des temps de demi-vies de l'ordre de ceux détectés pour les modes de désintégration cluster déjà observés (du ^{14}C au ^{34}Si). Bien que des calculs sur plus de noyaux, avec des fonctionnelles différentes et des méthodes de calculs des masses inertielles différentes seront nécessaires afin de réduire les incertitudes théoriques liées au modèle, il reste intéressant de souligner la possibilité expérimentale de détection d'un tel mode. En effet, les rapports d'embranchement étant similaires à ceux de la radioactivité cluster déjà découverte expérimentalement, cela rend la détection de ce mode accessible via l'utilisation de détecteurs α en coïncidence à 180 degrés.

Références

- [Aur+18] K. AURANEN et al. « Superaligned α Decay to Doubly Magic ^{100}Sn ». In : *Physical Review Letters* 121.18 (30 oct. 2018), p. 182501. DOI : [10.1103/PhysRevLett.121.182501](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.121.182501) (cf. p. 181).
- [Bar+11] A. BARAN et al. « Quadrupole collective inertia in nuclear fission : Cranking approximation ». In : *Physical Review C* 84.5 (28 nov. 2011), p. 054321. DOI : [10.1103/PhysRevC.84.054321](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.84.054321) (cf. p. 176, 177).
- [Bar+81] Andrzej BARAN et al. « A dynamic analysis of spontaneous-fission half-lives ». In : *Nuclear Physics A* 361.1 (18 mai 1981), p. 83-101. ISSN : 0375-9474. DOI : [10.1016/0375-9474\(81\)90471-1](https://doi.org/10.1016/0375-9474(81)90471-1) (cf. p. 171, 172).
- [Bar78] Andrzej BARAN. « Some dynamical aspects of the fission process ». In : *Physics Letters B* 76.1 (8 mai 1978), p. 8-10. ISSN : 0370-2693. DOI : [10.1016/0370-2693\(78\)90085-0](https://doi.org/10.1016/0370-2693(78)90085-0) (cf. p. 171, 172).
- [BD16] V. V. BARAN et D. S. DELION. « Proton-neutron versus α -like correlations above ^{100}Sn ». In : *Physical Review C* 94.3 (19 sept. 2016), p. 034319. DOI : [10.1103/PhysRevC.94.034319](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.94.034319) (cf. p. 168).
- [Bee+13] J. W. BEEMAN et al. « New experimental limits on the α decays of lead isotopes ». In : *The European Physical Journal A* 49.4 (22 avr. 2013), p. 50. ISSN : 1434-601X. DOI : [10.1140/epja/i2013-13050-7](https://doi.org/10.1140/epja/i2013-13050-7) (cf. p. 168).
- [Ber+10] R. BERNARD et al. « First step towards a non-adiabatic description of the fission process based on the Generator Coordinate Method ». In : *EPJ Web of Conferences* 2 (2010), p. 08002. ISSN : 2100-014X. DOI : [10.1051/epjconf/20100208002](https://doi.org/10.1051/epjconf/20100208002) (cf. p. 173).
- [BGG91] J. F. BERGER, M. GIROD et D. GOGNY. « Time-dependent quantum collective dynamics applied to nuclear fission ». en. In : *Computer Physics Communications* 63.1 (fév. 1991), p. 365-374. ISSN : 0010-4655. DOI : [10.1016/0010-4655\(91\)90263-K](https://doi.org/10.1016/0010-4655(91)90263-K) (cf. p. 189).
- [BN12] R. Id BETAN et W. NAZAREWICZ. « α decay in the complex-energy shell model ». In : *Physical Review C* 86.3 (27 sept. 2012), p. 034338. DOI : [10.1103/PhysRevC.86.034338](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.86.034338) (cf. p. 168).
- [BRA+72] M. BRACK et al. « Funny Hills : The Shell-Correction Approach to Nuclear Shell Effects and Its Applications to the Fission Process ». In : *Reviews of Modern Physics* 44.2 (1^{er} avr. 1972), p. 320-405. DOI : [10.1103/RevModPhys.44.320](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.44.320) (cf. p. 176).
- [BV78] M BARANGER et M VÉNÉRONI. « An adiabatic time-dependent Hartree-Fock theory of collective motion in finite systems ». In : *Annals of Physics* 114.1 (1^{er} sept. 1978), p. 123-200. ISSN : 0003-4916. DOI : [10.1016/0003-4916\(78\)90265-8](https://doi.org/10.1016/0003-4916(78)90265-8) (cf. p. 174).
- [Del10] Doru S. DELION. *Theory of Particle and Cluster Emission*. Springer, 10 nov. 2010. 314 p. ISBN : 978-3-642-14406-6 (cf. p. 168).

- [Ebr+12] J.-P. EBRAN et al. « How atomic nuclei cluster ». In : *Nature* 487.7407 (juill. 2012), p. 341-344. ISSN : 1476-4687. DOI : [10.1038/nature11246](https://doi.org/10.1038/nature11246) (cf. p. 168).
- [Ebr+13] J.-P. EBRAN et al. « Localization and clustering in the nuclear Fermi liquid ». In : *Physical Review C* 87.4 (2013), p. 044307. DOI : [10.1103/PhysRevC.87.044307](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.87.044307) (cf. p. 168).
- [Ebr+14a] J.-P. EBRAN et al. « Cluster-liquid transition in finite, saturated fermionic systems ». In : *Physical Review C* 89.3 (31 mars 2014), p. 031303. DOI : [10.1103/PhysRevC.89.031303](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.89.031303) (cf. p. 168).
- [Ebr+14b] J.-P. EBRAN et al. « Density functional theory studies of cluster states in nuclei ». In : *Physical Review C* 90.5 (nov. 2014), p. 054329. DOI : [10.1103/PhysRevC.90.054329](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.90.054329) (cf. p. 168).
- [Ebr+17] J.-P. EBRAN et al. « Localization and clustering in atomic nuclei ». In : *Journal of Physics G : Nuclear and Particle Physics* 44.10 (août 2017), p. 103001. ISSN : 0954-3899. DOI : [10.1088/1361-6471/aa809b](https://doi.org/10.1088/1361-6471/aa809b) (cf. p. 183).
- [Ebr+18] J.-P. EBRAN et al. « Single-particle spatial dispersion and clusters in nuclei ». In : *Physical Review C* 97.6 (juin 2018), p. 061301. DOI : [10.1103/PhysRevC.97.061301](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.97.061301) (cf. p. 168).
- [Gam28] G. GAMOW. « Zur Quantentheorie des Atomkernes ». In : *Zeitschrift für Physik* 51.3 (1^{er} mars 1928), p. 204-212. ISSN : 0044-3328. DOI : [10.1007/BF01343196](https://doi.org/10.1007/BF01343196) (cf. p. 168).
- [GG79] M. GIROD et B. GRAMMATICOS. « The zero-point energy correction and its effect on nuclear dynamics ». In : *Nuclear Physics A* 330.1 (29 oct. 1979), p. 40-52. ISSN : 0375-9474. DOI : [10.1016/0375-9474\(79\)90535-9](https://doi.org/10.1016/0375-9474(79)90535-9) (cf. p. 176).
- [GMK05] Friedrich GÖNNENWEIN, Manfred MUTTERER et Yuri KOPATCH. « Ternary and quaternary fission ». In : *Europhysics News* 36.1 (1^{er} jan. 2005), p. 11-15. ISSN : 0531-7479, 1432-1092. DOI : [10.1051/epn:2005104](https://doi.org/10.1051/epn:2005104) (cf. p. 191).
- [GN11] H. GEIGER et J.M. NUTTALL. « LVII. The ranges of the α particles from various radioactive substances and a relation between range and period of transformation ». In : *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science* 22.130 (1^{er} oct. 1911), p. 613-621. ISSN : 1941-5982. DOI : [10.1080/14786441008637156](https://doi.org/10.1080/14786441008637156) (cf. p. 168).
- [GR78] K. GOEKE et P. -G. REINHARD. « A consistent microscopic theory of collective motion in the framework of an ATDHF approach ». In : *Annals of Physics* 112.2 (1^{er} juin 1978), p. 328-355. ISSN : 0003-4916. DOI : [10.1016/S0003-4916\(78\)80003-7](https://doi.org/10.1016/S0003-4916(78)80003-7) (cf. p. 175).
- [Hin+10] Nobuo HINOHARA et al. « Microscopic description of large-amplitude shape-mixing dynamics with inertial functions derived in local quasiparticle random-phase approximation ». In : *Physical Review C* 82.6 (2010), p. 064313. DOI : [10.1103/PhysRevC.82.064313](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.82.064313) (cf. p. 179).

- [Hin15] Nobuo HINOHARA. « Collective inertia of the Nambu-Goldstone mode from linear response theory ». In : *Physical Review C* 92.3 (21 sept. 2015), p. 034321. DOI : [10.1103/PhysRevC.92.034321](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.92.034321) (cf. p. 180).
- [Jer+18] Paul JERABEK et al. « Electron and Nucleon Localization Functions of Oganesson : Approaching the Thomas-Fermi Limit ». In : *Physical Review Letters* 120.5 (31 jan. 2018), p. 053001. DOI : [10.1103/PhysRevLett.120.053001](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.120.053001) (cf. p. 183).
- [Mar+19] P. MAREVIĆ et al. « Cluster structures in ^{12}C from global energy density functionals ». In : *Physical Review C* 99.3 (mars 2019), p. 034317. DOI : [10.1103/PhysRevC.99.034317](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.99.034317) (cf. p. 168).
- [Mar+80] Toshio MARUMORI et al. « Self-Consistent Collective-Coordinate Method for the Large-Amplitude Nuclear Collective Motion ». In : *Progress of Theoretical Physics* 64.4 (1^{er} oct. 1980), p. 1294-1314. ISSN : 0033-068X. DOI : [10.1143/PTP.64.1294](https://doi.org/10.1143/PTP.64.1294) (cf. p. 179).
- [MBS17] Mihail MIREA, Radu BUDACA et Aureliu SANDULESCU. « Spontaneous fission, cluster emission and alpha decay of ^{222}Ra in a unified description ». In : *Annals of Physics* 380 (1^{er} mai 2017), p. 154-167. ISSN : 0003-4916. DOI : [10.1016/j.aop.2017.03.007](https://doi.org/10.1016/j.aop.2017.03.007) (cf. p. 168).
- [Mer+20] F. MERCIER et al. « Microscopic description of the self-conjugate ^{108}Xe and ^{104}Te α -decay chain ». In : *Physical Review C* 102.1 (2 juill. 2020), p. 011301. DOI : [10.1103/PhysRevC.102.011301](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.102.011301) (cf. p. 167, 183).
- [Mer+21] F. MERCIER et al. « Microscopic Description of 2α Decay in ^{212}Po and ^{224}Ra Isotopes ». In : *Physical Review Letters* 127.1 (2 juill. 2021), p. 012501. DOI : [10.1103/PhysRevLett.127.012501](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.127.012501) (cf. p. 167, 178, 189).
- [MER03] V. MARTIN, J. L. EGIDO et L. M. ROBLEDO. « Thermal shape fluctuation effects in the description of hot nuclei ». In : *Physical Review C* 68.3 (23 sept. 2003), p. 034327. DOI : [10.1103/PhysRevC.68.034327](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.68.034327) (cf. p. 168).
- [MHG18] Jérôme MARGUERON, Rudiney HOFFMANN CASALI et Francesca GULMINELLI. « Equation of state for dense nucleonic matter from metamodeling. I. Foundational aspects ». In : *Physical Review C* 97.2 (28 fév. 2018), p. 025805. DOI : [10.1103/PhysRevC.97.025805](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.97.025805) (cf. p. 168).
- [MNM00] Masayuki MATSUO, Takashi NAKATSUKASA et Kenichi MATSUYANAGI. « Adiabatic Selfconsistent Collective Coordinate Method for Large Amplitude Collective Motion in Nuclei with Pairing Correlations ». In : *Progress of Theoretical Physics* 103.5 (2000), p. 959-979. ISSN : 0033-068X. DOI : [10.1143/PTP.103.959](https://doi.org/10.1143/PTP.103.959) (cf. p. 179).
- [Nak+16] Takashi NAKATSUKASA et al. « Time-dependent density-functional description of nuclear dynamics ». In : *Reviews of Modern Physics* 88.4 (9 nov. 2016), p. 045004. DOI : [10.1103/RevModPhys.88.045004](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.88.045004) (cf. p. 179).
- [NND] NNDC. *National Nuclear Data Center*. URL : <https://www.nndc.bnl.gov/ensdf/> (cf. p. 169, 189, 190).

- [PG10] Dorin N. POENARU et Walter GREINER. « Cluster Radioactivity ». In : *Clusters in Nuclei : Volume 1*. Sous la dir. de Christian BECK. Lecture Notes in Physics. Berlin, Heidelberg : Springer, 2010, p. 1-56. ISBN : 978-3-642-13899-7. DOI : [10.1007/978-3-642-13899-7_1](https://doi.org/10.1007/978-3-642-13899-7_1) (cf. p. 191, 193).
- [PI85] D. N. POENARU et M. IVASCU. « Two alpha, three alpha and multiple heavy-ion radioactivities ». In : *Journal de Physique Lettres* 46.13 (1^{er} juill. 1985), p. 591-594. ISSN : 0302-072X, 2777-3434. DOI : [10.1051/jphyslet:019850046013059100](https://doi.org/10.1051/jphyslet:019850046013059100) (cf. p. 191).
- [Poe+02] D. N. POENARU et al. « Systematics of cluster decay modes ». In : *Physical Review C* 65.5 (2002), p. 054308. DOI : [10.1103/PhysRevC.65.054308](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.65.054308) (cf. p. 191).
- [Poe+99] D. N. POENARU et al. « Multicluster accompanied fission ». In : *Physical Review C* 59.6 (1999), p. 3457-3460. DOI : [10.1103/PhysRevC.59.3457](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.59.3457) (cf. p. 191).
- [RC13] M. RIZEA et N. CARJAN. « Dynamical scission model ». In : *Nuclear Physics A* 909 (1^{er} juill. 2013), p. 50-68. ISSN : 0375-9474. DOI : [10.1016/j.nuclphysa.2013.04.014](https://doi.org/10.1016/j.nuclphysa.2013.04.014) (cf. p. 173).
- [Rei+11] P.-G. REINHARD et al. « Localization in light nuclei ». In : *Physical Review C* 83.3 (mars 2011), p. 034312. DOI : [10.1103/PhysRevC.83.034312](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.83.034312) (cf. p. 183).
- [Sad+13] Jhilam SADHUKHAN et al. « Spontaneous fission lifetimes from the minimization of self-consistent collective action ». In : *Physical Review C* 88.6 (10 déc. 2013), p. 064314. DOI : [10.1103/PhysRevC.88.064314](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.88.064314) (cf. p. 172).
- [Sad+14] Jhilam SADHUKHAN et al. « Pairing-induced speedup of nuclear spontaneous fission ». In : *Physical Review C* 90.6 (22 déc. 2014), p. 061304. DOI : [10.1103/PhysRevC.90.061304](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.90.061304) (cf. p. 172).
- [SJ21] K. P. SANTHOSH et Tinu Ann JOSE. « Theoretical investigation on double- α decay from radioactive nuclei ». In : *Physical Review C* 104.6 (2021), p. 064604. DOI : [10.1103/PhysRevC.104.064604](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.104.064604) (cf. p. 191).
- [SR16] N. SCHUNCK et L. M. ROBLEDO. « Microscopic theory of nuclear fission : a review ». In : 79.11 (oct. 2016), p. 116301. ISSN : 0034-4885. DOI : [10.1088/0034-4885/79/11/116301](https://doi.org/10.1088/0034-4885/79/11/116301) (cf. p. 185).
- [SU14] C. SIMENEL et A. S. UMAR. « Formation and dynamics of fission fragments ». In : *Physical Review C* 89.3 (21 mars 2014), p. 031601. DOI : [10.1103/PhysRevC.89.031601](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.89.031601) (cf. p. 173).
- [TA21] S. TEETI et A. V. AFANASJEV. « Global study of separable pairing interaction in covariant density functional theory ». In : *Physical Review C* 103.3 (11 mars 2021), p. 034310. DOI : [10.1103/PhysRevC.103.034310](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.103.034310) (cf. p. 190).

- [Tao+17] H. TAO et al. « Microscopic study of induced fission dynamics of ^{226}Th with covariant energy density functionals ». In : *Physical Review C* 96.2 (23 août 2017), p. 024319. DOI : [10.1103/PhysRevC.96.024319](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.96.024319) (cf. p. 168, 185).
- [TMR09] Yuan TIAN, Zhong-yu MA et P. RING. « Axially deformed relativistic Hartree Bogoliubov theory with a separable pairing force ». In : *Physical Review C* 80.2 (27 août 2009), p. 024313. DOI : [10.1103/PhysRevC.80.024313](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.80.024313) (cf. p. 189).
- [Tre21] V. I. TRET'YAK. « Spontaneous double alpha decay : First experimental limit and prospects of investigation ». In : *Nuclear Physics and Atomic Energy* 22.2 (25 juin 2021), p. 121-126. ISSN : 1818331X, 20740565. DOI : [10.15407/jnpae2021.02.121](https://doi.org/10.15407/jnpae2021.02.121). arXiv : [2102.12005](https://arxiv.org/abs/2102.12005) (cf. p. 191).
- [WAT03] A. H. WAPSTRA, G. AUDI et C. THIBAULT. « The Ame2003 atomic mass evaluation : (I). Evaluation of input data, adjustment procedures ». In : *Nuclear Physics A. The 2003 NUBASE and Atomic Mass Evaluations* 729.1 (2003), p. 129-336. ISSN : 0375-9474. DOI : [10.1016/j.nuclphysa.2003.11.002](https://doi.org/10.1016/j.nuclphysa.2003.11.002) (cf. p. 192, 193).
- [WHN21] Kouhei WASHIYAMA, Nobuo HINOHARA et Takashi NAKATSUKASA. « Finite-amplitude method for collective inertia in spontaneous fission ». In : *Physical Review C* 103.1 (11 jan. 2021), p. 014306. DOI : [10.1103/PhysRevC.103.014306](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.103.014306) (cf. p. 178, 180, 181).
- [WR11] M. WARDA et L. M. ROBLEDO. « Microscopic description of cluster radioactivity in actinide nuclei ». In : *Physical Review C* 84.4 (13 oct. 2011), p. 044608. DOI : [10.1103/PhysRevC.84.044608](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.84.044608) (cf. p. 168, 185).
- [WZR18] M. WARDA, A. ZDEB et L. M. ROBLEDO. « Cluster radioactivity in superheavy nuclei ». In : *Physical Review C* 98.4 (24 oct. 2018), p. 041602. DOI : [10.1103/PhysRevC.98.041602](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.98.041602) (cf. p. 168, 185).
- [Zha+15] Jie ZHAO et al. « Multidimensionally constrained relativistic Hartree-Bogoliubov study of spontaneous nuclear fission ». In : *Physical Review C* 92.6 (18 déc. 2015), p. 064315. DOI : [10.1103/PhysRevC.92.064315](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.92.064315) (cf. p. 168, 185).
- [Zha+16] Jie ZHAO et al. « Multidimensionally-constrained relativistic mean-field study of spontaneous fission : Coupling between shape and pairing degrees of freedom ». In : *Physical Review C* 93.4 (15 avr. 2016), p. 044315. DOI : [10.1103/PhysRevC.93.044315](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.93.044315) (cf. p. 168).
- [Zha+19a] Jie ZHAO et al. « Microscopic self-consistent description of induced fission dynamics : Finite-temperature effects ». In : *Physical Review C* 99.1 (22 jan. 2019), p. 014618. DOI : [10.1103/PhysRevC.99.014618](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.99.014618) (cf. p. 168).
- [Zha+19b] Jie ZHAO et al. « Time-dependent generator-coordinate-method study of mass-asymmetric fission of actinides ». In : *Physical Review C* 99.5 (14 mai 2019), p. 054613. DOI : [10.1103/PhysRevC.99.054613](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.99.054613) (cf. p. 168).
- [Zho+16] E. F. ZHOU et al. « Anatomy of molecular structures in ^{20}Ne ». In : *Physics Letters B* 753 (10 fév. 2016), p. 227-231. ISSN : 0370-2693. DOI : [10.1016/j.physletb.2015.12.028](https://doi.org/10.1016/j.physletb.2015.12.028) (cf. p. 168).

[ZIM15] P. W. ZHAO, N. ITAGAKI et J. MENG. « Rod-shaped Nuclei at Extreme Spin and Isospin ». In : *Physical Review Letters* 115.2 (8 juill. 2015), p. 022501. DOI : [10.1103/PhysRevLett.115.022501](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.115.022501) (cf. p. 168).

Conclusion

Les travaux présentés dans cette thèse ont tous été dérivés dans le formalisme des EDF relativistes. Ce cadre théorique (qu'il soit relativiste ou non) reste aujourd'hui le seul permettant d'étudier l'ensemble de la carte des noyaux en utilisant un nombre restreint de paramètres (de l'ordre de la dizaine dans la plupart des fonctionnelles). Réalisé au niveau champ moyen (RHF) et de son extension superfluide (RHFB), les propriétés d'énergie de liaison, rayons, déformations, gap d'appariement, ... sont ainsi correctement reproduites dans la plupart des noyaux. La procédure d'ajustement de ces fonctionnelles aux données expérimentales a été décrite en détail et appliquée dans le cas d'une interaction d'échange de mésons. Dans ce cadre, l'ajout explicite de termes tenseurs au niveau RHB a été étudiée dans les canaux vecteurs isoscalaire (ω) et isovecteur (ρ). Les contraintes utilisées dans la procédure d'ajustement n'ont pas permis de contraindre ce dernier canal isovecteur pour lequel il est donc difficile d'évaluer l'influence. En revanche, il a été montré que l'ajout d'un terme tenseur ω permet de réduire les RMS sur différentes quantités (énergie de liaison, séparations SO, gaps). Cet ajout modifie aussi indirectement les propriétés de la matière nucléaire infinie et en particulier augmente la masse effective de Dirac, permettant un meilleur accord avec l'expérience.

Le noyau étant composé de nombreuses particules en interaction forte, nombre de propriétés émergent de cette complexité : structure en couches, nombres magiques, noyaux bulles, peau de neutrons, déformations, superfluidité, ... Certaines de ces propriétés (transition de phase, agrégation, excitations collectives et individuelles et radioactivité) ont fait l'objet d'études particulières au sein des travaux de thèse présentés dans ce manuscrit.

L'utilisation d'un formalisme covariant permet de prendre en compte naturellement des effets comme le couplage SO en introduisant des potentiels de nature différente (scalaire et vecteur). Des travaux antérieurs ont de plus montré que les EDF relativistes permettent d'obtenir une localisation plus importante de structures en cluster au sein des noyaux comparé aux interactions non-relativistes. Cette seconde spécificité a été utilisée afin d'étudier plus en détail la structure et l'évolution de ces clusters dont

l'existence est majoritairement reliée à la profondeur du potentiel de l'interaction utilisée. Ainsi, l'étude de l'évolution de ces structures avec la température a montré qu'une transition de la phase cluster à la phase délocalisée apparaissait avant la transition de phase déformée vers sphérique. Cette dernière a été étudiée en détail pour ~ 1000 noyaux et une corrélation entre déformation à température nulle et température critique a été exhibée. Il a été montré que cette corrélation était linéaire au sein des chaînes isotopiques de noyaux lourds.

Le traitement des systèmes nucléaires via l'approximation du champ moyen ne permettant pas de rendre compte de l'ensemble des propriétés du noyau, le formalisme de la QRPA a été introduit afin d'étudier les mouvements de faibles amplitudes. Plus précisément, la méthode QFAM, permettant une résolution simplifiée des équations QRPA, a été utilisée ici pour décrire et étudier les propriétés de la fonction de réponse monopolaire dans les noyaux légers. Il a été montré que les structures en clusters, et de façon plus générale la déformation, étaient responsables de l'apparition d'une résonance de basse énergie autour de $\sim 5 - 15$ MeV. D'autres résonances liées à un excès de neutrons ou à l'appariement ont aussi été étudiées, permettant de fournir un paysage détaillé des différentes résonances présentes à basse énergie. Le lien entre QRPA et QFAM a été détaillé et une procédure d'intégration des pôles dans le plan complexe a été mise en place afin d'obtenir les modes propres QRPA à l'aide du formalisme QFAM.

Les mouvements de grande amplitude sont aussi particulièrement importants en physique nucléaire puisqu'à l'origine de phénomène comme la radioactivité. Le traitement de ces mouvements de large amplitude a été entrepris dans le formalisme ATDHF_B couplée à une approche perturbative crankée permettant d'obtenir les masses inertielles du système. Le calcul de ces masses inertielles a aussi été entrepris dans le formalisme ASCC où les modes propres QRPA permettent d'obtenir une évaluation des masses inertielles englobant bien plus de corrélation. Cette méthode a été mise en place en utilisant la méthode QFAM. La construction de PES et la minimisation d'actions prenant en compte les masses inertielles et la correction ZPE ont permis d'évaluer les temps de demi-vie α de noyaux exotiques de masses intermédiaires (^{104}Te et ^{108}Xe) ainsi que des noyaux lourds ($^{220,222,224}\text{Ra}$ et ^{212}Po principalement) pour les radioactivités α et cluster (pour le ^{224}Ra). Ces temps de vie, en bon accord avec les résultats expérimentaux, ont permis de valider l'approche utilisée ici. Finalement, un nouveau mode de radioactivité où deux particules α sont émises simultanément dos-à-dos a aussi été prédit avec des temps de vie similaires à ceux de l'émission cluster. Ces résultats ont motivé la création de collaborations expérimentales pour essayer de mesurer de tels modes de radioactivité. Afin d'améliorer les résultats obtenus ici, le calcul des masses inertielles sans approximation crankée pourrait permettre d'ajouter du contenu physique en prenant en compte des corrélations dynamiques. Une comparaison précise des différentes méthodes pourrait permettre de mieux comprendre et appréhender la physique en jeu. Les problèmes liés à l'utilisation d'une base d'oscillateur harmonique devront aussi faire l'objet d'une étude afin de déterminer les limites du modèle.

Des calculs à plus grande échelle de la description des radioactivités α et cluster permettront de valider l'apport des approches microscopiques. Ces calculs requièrent cependant une importante puissance de calculs étant donné qu'ils nécessitent la construction de PES 3D. De tels systématiques pourraient permettre, à termes, de contraindre plus

précisément les paramètres liés à la force d'appariement (aujourd'hui contraint seulement sur des données de gaps). En effet, il est connu que les phénomènes de fission, et nous avons montré ici qu'il en était de même pour la radioactivité α , sont très dépendant de la force d'appariement. Ainsi, un ajustement de ces paramètres sur les temps de vie expérimentaux pourraient permettre d'obtenir une description plus satisfaisante des propriétés des noyaux lourds.

L'implémentation de la méthode QFAM à température finie [Bea21] est envisageable rapidement étant donné qu'elle n'augmente que d'un facteur ~ 2 le coût numérique en rendant non nulles les contributions hors diagonales de $\delta\mathcal{R}$. La prise en compte des effets thermiques au niveau QRPA dans le formalisme QFAM permettrait d'étudier l'effet de la température sur les résonances géantes, les résonances pygmées, ... de façon générale à travers la carte des noyaux pour un coût numérique faible comparée à la QRPA classique.

Les méthodes utilisées dans cette thèse brisent différentes symétries du système (rotation, nombre de particules, parité). Les différents formalismes permettant de restaurer ces symétries pourraient permettre d'étudier plus en détails et de façon plus précise les différents phénomènes discutés ici. En particulier, pour traiter ces corrélations supplémentaires au niveau QFAM, il serait possible d'utiliser des méthodes de projection avant ou après le calcul des états QFAM. Concernant le calcul de PES, des méthodes de projection ont aussi été développées, particulièrement dans le cadre de la description du phénomène de fission [MS20]. Cette étude a en particulier déjà montré que l'énergie de corrélation de projection ne peut être estimée correctement pour les déformations typiques du phénomène de fission. On s'attend donc à une conclusion similaire dans le cas des radioactivités α et cluster.

Références

- [Bea21] Yann BEAUJEAULT-TAUDIÈRE. « Study of the multipolar excitations in cold and hot, deformed and superfluid systems with the method of finite amplitudes ». Thèse de doct. Université Paris-Saclay, 26 oct. 2021 (cf. p. 207).
- [MS20] P. MAREVIĆ et N. SCHUNCK. « Fission of ^{240}Pu with Symmetry-Restored Density Functional Theory ». In : *Physical Review Letters* 125.10 (3 sept. 2020), p. 102504. DOI : [10.1103/PhysRevLett.125.102504](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.125.102504) (cf. p. 207).

Appendices

Détails sur les paramétrisations utilisées

A.1 Interaction par échange de mésons

Les interactions par échange de mésons utilisées ici proviennent du Lagrangien suivant

$$\mathcal{L}_{\text{int}} = \bar{\psi} \left[-g_{\sigma}(\rho_V) \sigma - g_{\omega}(\rho_V) \gamma^{\mu} \omega_{\mu} - g_{\rho}(\rho_V) \gamma^{\mu} \vec{\rho}_{\mu} \cdot \vec{\tau} - e \gamma_{\mu} A^{\mu} \frac{1 - \tau_3}{2} \right] \psi \quad (\text{A.1})$$

$$+ \bar{\psi} \left[\frac{g_{\omega}^T}{2M} \sigma_{\mu\nu} \Omega^{\mu\nu} + \frac{g_{\rho}^T}{2M} \sigma_{\mu\nu} \vec{\mathcal{R}}^{\mu\nu} \cdot \vec{\tau} \right] \psi \quad (\text{A.2})$$

Les dépendances en densités sont prises comme suit (voir 1.4.2 pour plus de détails)

$$g_i(\rho_V(\mathbf{r})) = \Gamma_i h_i(\xi), \quad i = \sigma, \omega, \rho, \quad (\text{A.3})$$

avec

$$\Gamma_i \equiv g_i(\rho_{\text{sat}}), \quad (\text{A.4a})$$

$$\xi \equiv \frac{\rho_V(\mathbf{r})}{\rho_{\text{sat}}}. \quad (\text{A.4b})$$

La fonction h prend la forme suivant dans le canal isoscalaire ($i = \sigma, \omega$)

$$h_i(\xi) \equiv a_i \frac{1 + b_i (\xi + d_i)^2}{1 + c_i (\xi + d_i)^2}, \quad i = \sigma, \omega, \quad (\text{A.5})$$

et

$$h_{\rho}(\xi) \equiv \exp[-a_{\rho} (\xi - 1)], \quad (\text{A.6})$$

Paramètres	DDME2	DD-MEV	DD-MEVT
m_σ (MeV)	550.1238	544.8503	530.3956
Γ_σ	10.5396	10.2600	9.2652
Γ_ω	13.0189	12.7563	11.6465
Γ_ρ	3.6836	3.6709	3.7971
b_σ	1.0943	1.4449	2.0162
c_σ	1.7057	2.0619	2.4924
b_ω	0.9240	0.9828	1.4375
c_ω	1.4620	1.3672	1.5696
a_{tv}	0.5647	0.5856	0.5777
ρ_{sat} (fm ⁻³)	0.1520	0.1505	0.1516
Γ_ω^T	0.0	0.0	1.5496
Γ_ρ^T	0.0	0.0	-2.3243

TABLE A.1 – Valeur des paramètres des interactions DD-ME2, DD-MEV et DD-MEVT. Les masses des protons et neutrons sont supposés identiques $m_N = 939$ MeV. Les masses des mésons ω et ρ sont prises comme leur valeur mesurée dans le vide, i.e. $m_\omega = 783$ MeV et $m_\rho = 763$ MeV.

dans le canal isovecteur ($i = \rho$). Les constantes de couplage tensoriel g_ω^T et g_ρ^T sont prises comme indépendantes de la densité, i.e. avec $h_i = 1$.

Différentes interactions par échange de mésons ont été utilisés dans les travaux présentés dans cette thèse : DD-ME2[Lal+05], DD-MEV[MEK22] et DD-MEVT[MEK22]. Les deux dernières interactions ont été ajustées dans le cadre de cette thèse et les résultats sont présentés dans le chapitre 4. Le tableau A.1 répertorie les valeurs des différents paramètres de ces fonctionnelles.

Ces interactions sont utilisées dans les chapitres 3 (DD-ME2), 4 (DD-ME2, DD-MEV et DD-MEVT) et 6 (DD-ME2).

A.2 Interaction de contact

Deux interactions de contact ont été utilisées dans les travaux présentés ici, DD-PC1[NVR08] et PC-PK1[Zha+10]. La première est dépendante en densité alors que la seconde fait intervenir des termes cubiques et quartiques pour prendre en compte cette dépendance.

DD-PC1 Dans le cas de DD-PC1, le Lagrangien prend la forme suivante

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{\text{int}} = & -\frac{1}{2}\alpha_S (\bar{\psi}\psi) (\bar{\psi}\psi) - \frac{1}{2}\alpha_V (\bar{\psi}\gamma_\mu\psi) (\bar{\psi}\gamma^\mu\psi) - \frac{1}{2}\alpha_{TV} (\bar{\psi}\gamma_\mu\vec{\tau}\psi) (\bar{\psi}\gamma^\mu\vec{\tau}\psi) \\ & - \frac{1}{2}\delta_S (\partial_\mu\bar{\psi}\psi) (\partial^\mu\bar{\psi}\psi) - e\bar{\psi}\gamma_\mu A^\mu \frac{1-\tau_3}{2}\psi \end{aligned}$$

Les dépendances en densités sont prises comme suit (voir 1.4.2 pour plus de détails)

$$\alpha_i(\rho_V) = a_i + (b_i + c_i x) e^{-d_i x} \quad (\text{A.7})$$

Paramètres	DD-PC1
a_S (fm ²)	-10.0462
b_S (fm ²)	-9.1504
c_S (fm ²)	-6.4273
d_S	+1.3724
a_V (fm ²)	+5.9195
b_V (fm ²)	+8.8637
c_V (fm ²)	0.00000
d_V	+0.6584
a_{TV} (fm ²)	0.0000
b_{TV} (fm ²)	+1.8360
c_{TV} (fm ²)	0.00000
d_{TV}	+0.6403
δ_S (fm ⁴)	-0.8149
ρ_{sat} (fm ⁻³)	0.152

TABLE A.2 – Valeur des paramètres de l’interaction DD-PC1. La masse des nucléons est fixe et prise comme $M_N = 939$ MeV.

où $\alpha_i \in \{\alpha_S, \alpha_V, \alpha_{TV}\}$. δ_S n’est pas pris comme dépendant de la densité. Le tableau A.2 répertorie les valeurs des différents paramètres de cette fonctionnelle. Cette interaction est utilisée dans les chapitres 5 et 6.

PC-PK1 L’interaction de contact PC-PK1 est une paramétrisation du Lagrangien suivant

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}_{\text{int}} = & -\frac{1}{2}\alpha_S (\bar{\psi}\psi) (\bar{\psi}\psi) - \frac{1}{2}\alpha_V (\bar{\psi}\gamma_\mu\psi) (\bar{\psi}\gamma^\mu\psi) - \frac{1}{2}\alpha_{TS} (\bar{\psi}\gamma_\mu\psi) (\bar{\psi}\gamma^\mu\psi) - \frac{1}{2}\alpha_{TV} (\bar{\psi}\gamma_\mu\vec{\tau}\psi) (\bar{\psi}\gamma^\mu\vec{\tau}\psi) \\
& - \frac{1}{2}\delta_S\partial_\mu (\bar{\psi}\psi) \partial^\mu (\bar{\psi}\psi) - \frac{1}{2}\delta_V\partial_\mu (\bar{\psi}\gamma_\nu\psi) \partial^\mu (\bar{\psi}\gamma^\nu\psi) \\
& - \frac{1}{2}\delta_{TS}\partial_\mu (\bar{\psi}\vec{\tau}\psi) \cdot \partial^\mu (\bar{\psi}\vec{\tau}\psi) - \frac{1}{2}\delta_{TV}\partial_\mu (\bar{\psi}\gamma_\nu\vec{\tau}\psi) \cdot \partial^\mu (\bar{\psi}\gamma^\nu\vec{\tau}\psi) \\
& - \frac{1}{3}\beta_S (\bar{\psi}\psi)^3 - \frac{1}{4}\gamma_S (\bar{\psi}\psi)^4 - \frac{1}{4}\gamma_V [(\bar{\psi}\gamma_\mu\psi) (\bar{\psi}\gamma^\mu\psi)]^2 - e\bar{\psi}\gamma_\mu A^\mu \frac{1-\tau_3}{2}\psi
\end{aligned} \tag{A.8}$$

La première ligne comprend les couplages à quatre fermions, la seconde et troisième ligne comprennent les couplages dérivatifs permettant de prendre compte les effets de portée finie et la dernière ligne décrit des couplages à 6 et 8 fermions permettant de prendre en compte les effets de dépendance en densité. Les valeurs de ces paramètres sont donnés dans le tableau A.3. Cette interaction est utilisée dans le chapitre 6.

Références

- [Lal+05] G. A. LALAZISSIS et al. « New relativistic mean-field interaction with density-dependent meson-nucleon couplings ». In : *Physical Review C* 71.2 (25 fév. 2005), p. 024312. DOI : [10.1103/PhysRevC.71.024312](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.71.024312) (cf. p. 212).

Paramètres	PC-PK1
α_S (fm ²)	-15.4306
α_V (fm ²)	+10.4758
α_{TS} (fm ²)	0.0000
α_{TV} (fm ²)	+11.4874
δ_S (fm ⁴)	-0.1654
δ_V (fm ⁴)	-0.8149
δ_{TS} (fm ⁴)	-0.0000
δ_{TV} (fm ⁴)	-0.6233
β_S (fm ⁵)	+25.9248
γ_S (fm ⁸)	-87.5190
γ_V (fm ⁸)	-8.3725

TABLE A.3 – Valeur des paramètres de l’interaction PC-PK1. La masse des nucléons est fixe et prise comme $M_N = 939$ MeV.

- [MEK22] F. MERCIER, J.-P. EBRAN et E. KHAN. « Low-energy monopole strength in spherical and axially deformed nuclei : Cluster and soft modes ». In : *Physical Review C* 105.3 (30 mars 2022), p. 034343. DOI : [10.1103/PhysRevC.105.034343](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.105.034343) (cf. p. 212).
- [NVR08] T. NIKŠIĆ, D. VRETENAR et P. RING. « Relativistic nuclear energy density functionals : Adjusting parameters to binding energies ». In : *Physical Review C* 78.3 (25 sept. 2008), p. 034318. DOI : [10.1103/PhysRevC.78.034318](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.78.034318) (cf. p. 212).
- [Zha+10] P. W. ZHAO et al. « New parametrization for the nuclear covariant energy density functional with a point-coupling interaction ». In : *Physical Review C* 82.5 (30 nov. 2010), p. 054319. DOI : [10.1103/PhysRevC.82.054319](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.82.054319) (cf. p. 212).

Éléments de matrice de l'Hamiltonien à un corps

On souhaite résoudre l'équation de Dirac suivante

$$[-i\boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\nabla} + \beta M^*(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}) + T(\mathbf{r})] \psi_i(\mathbf{r}) = \epsilon_i \psi_i(\mathbf{r}) \quad (\text{B.1})$$

avec

$$\boldsymbol{\alpha} = \beta\boldsymbol{\gamma} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & \mathbf{0} \end{pmatrix}, \quad \beta = \gamma^0 = \begin{pmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -\mathbf{I} \end{pmatrix} \quad (\text{B.2})$$

où $\boldsymbol{\sigma}$ représente les matrices de Pauli. Le champ M^* est construit à partir de scalaire de Lorentz, le champ V est construit à partir d'un vecteur de Lorentz $V = \gamma_\mu V^\mu$ et T à partir d'un tenseur de Lorentz $T = \sigma_{\mu\nu} (\partial^\mu T^\nu + \partial^\nu T^\mu)$ avec $\sigma_{\mu\nu} = -\frac{i}{4} [\gamma_\mu, \gamma_\nu]$. Sous les approximations présentées dans le chapitre 2, le potentiel vecteur prend la forme simplifié $V = \gamma_0 V^0$ et le potentiel tenseur s'écrit comme $T = \sigma_{0i} \partial^i T^0$.

Les deux sections suivantes présentent les bases utilisées pour résoudre numériquement l'équation de Dirac précédente dans le cas des symétries sphérique et axiale.

B.1 Base d'oscillateur harmonique sphérique

B.1.1 Spineur sphérique et partie radiale

Sous l'hypothèse d'un système invariant par rotation, on écrit les spineurs de Dirac comme

$$\psi_i(\vec{r}) = \begin{pmatrix} f_i(r) \Omega_{l+1/2, l, m}(\theta, \varphi) \\ ig_i(r) \Omega_{l-1/2, l, m}(\theta, \varphi) \end{pmatrix} \quad (\text{B.3})$$

où la base sphérique (r, θ, φ) est définie comme

$$\begin{cases} x = r \cos(\theta) \cos(\varphi) \\ y = r \cos(\theta) \sin(\varphi) \\ z = r \sin(\theta) \end{cases} \quad (\text{B.4})$$

Les spineurs sphériques $\Omega_{jlm}(\theta, \varphi)$ sont définis comme

$$\Omega_{jlm}(\theta, \varphi) = \sum_{\mu} C(l, 1/2, j; m - \mu, \mu, m) Y_{l, m - \mu}(\theta, \varphi) \chi_{\mu} \quad (\text{B.5})$$

avec les spineurs $\chi_{1/2} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ et $\chi_{-1/2} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$, C représente les coefficients de Clebsch-Gordan et Y_{lm} les harmoniques sphériques. Ainsi,

$$\Omega_{l+1/2, l, m}(\theta, \varphi) = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{l+m+1/2}{2l+1}} Y_{l, m-1/2}(\theta, \varphi) \\ \sqrt{\frac{l-m+1/2}{2l+1}} Y_{l, m+1/2}(\theta, \varphi) \end{pmatrix} \quad (\text{B.6a})$$

$$\Omega_{l-1/2, l, m}(\theta, \varphi) = \begin{pmatrix} -\sqrt{\frac{l-m+1/2}{2l+1}} Y_{l, m-1/2}(\theta, \varphi) \\ \sqrt{\frac{l+m+1/2}{2l+1}} Y_{l, m+1/2}(\theta, \varphi) \end{pmatrix} \quad (\text{B.6b})$$

Ces spineurs sont vecteurs propres de l'opérateur

$$K = -1 - \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L} \quad (\text{B.7})$$

avec \mathbf{L} l'opérateur moment cinétique tel que

$$K \Omega_{jlm} = \kappa \Omega_{jlm} \quad (\text{B.8})$$

où $\kappa = -l - 1$ si $j = l + 1/2$ ou $\kappa = l$ si $j = l - 1/2$ simplifié par la notation $\kappa = \mp(j + 1/2)$. Ainsi, il est possible d'introduire une notation plus compacte pour les spineurs sphériques $\Omega_{\kappa m} = \Omega_{jlm}$. Ils satisfont la propriété d'orthogonalité suivante (provenant des harmoniques sphériques)

$$\int_0^{\pi} \sin(\theta) d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \Omega_{\kappa', m'}^{\dagger} \Omega_{\kappa, m} = \delta_{\kappa', m'} \delta_{\kappa, m} \quad (\text{B.9})$$

Les spineurs $\Omega_{\kappa, m}$ et $\Omega_{-\kappa, m}$, correspondant à la même valeur de j , possèdent des valeurs de l ne diffèrent que de 1 et ont donc des parités différentes. Cela permet en particulier d'écrire

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{r}} \Omega_{\kappa, m} = -\Omega_{-\kappa, m} \quad (\text{B.10})$$

Cette relation est particulièrement utile étant donné que la partie cinétique de l'équation de Dirac en symétrie sphérique peut s'écrire

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{r}} \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{r}} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} = -i \vec{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{r}} \left[i \hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{p} - \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot (\hat{\mathbf{r}} \times \mathbf{p})}{r} \right] \quad (\text{B.11})$$

On écrit alors

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} f(r) \Omega_{\kappa m}(\theta, \varphi) &= -i \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{r}} \left[\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L}}{r} \right] f(r) \Omega_{\kappa m}(\theta, \varphi) \\
&= -i \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{r}} \left[\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\kappa + 1}{r} \right] f(r) \Omega_{\kappa m}(\theta, \varphi) \\
\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} f(r) \Omega_{\kappa m}(\theta, \varphi) &= i \left[\frac{df}{dr} + \frac{\kappa + 1}{r} f \right] \Omega_{-\kappa m}(\theta, \varphi)
\end{aligned} \tag{B.12}$$

et donc

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} g(r) \Omega_{-\kappa m}(\theta, \varphi) = -i \left[\frac{dg}{dr} - \frac{\kappa - 1}{r} g \right] \Omega_{\kappa m}(\theta, \varphi) \tag{B.13}$$

Les spineurs sphériques Ω sont donc aussi vecteurs propres de l'opérateur cinétique $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}$.

B.1.2 Base sphérique

Les fonctions radiales $f_i(r)$ et $g_i(r)$ sont ensuite exprimées sur la base suivante

$$f_i(r) = \sum_{n=0}^{n_{max}} f_n^{(i)} R_{nl_i}(r, b_0) \tag{B.14}$$

où les fonctions radiales R_{nl} sont définies comme

$$R_{nl}(r, b_0) = b_0^{-3/2} R_{nl}(\xi) = b_0^{-3/2} \mathcal{N}_{nl} \xi^l L_n^{l+1/2}(\xi^2) e^{-\xi^2/2} \tag{B.15}$$

avec $\xi = r/b_0$ et les $L_n^{l+1/2}$ correspondent aux polynômes de Legendre associés. Le facteur de normalisation prend la forme

$$\mathcal{N}_{nl} = \sqrt{\frac{2n!}{(l+n+1/2)!}} \tag{B.16}$$

Les inconnues du problème deviennent alors les $f_n^{(i)}$ et $g_n^{(i)}$ définies dans Eq.(B.14).

B.1.3 Éléments de matrice

Termes cinétique, scalaire et vectoriel

Les éléments de matrice sont associés au noyau

$$\mathfrak{h}_{kk} = \int d^3r f_k^\dagger(\mathbf{r}) h_D f_k(\mathbf{r}) \tag{B.17}$$

calculé à partir des éléments de l'Hamiltonien de Dirac. En utilisant l'expansion axiale présentée ci-dessus et les équations (Eq.(B.32)-(B.35)), il est possible d'écrire les éléments \mathfrak{h}_{kk}

$$\mathfrak{h}_{kk}^A = \sum_{\alpha\alpha'} f_\alpha^k \mathcal{A}_{\alpha\alpha'} f_{\alpha'}^k \quad (\text{B.18a})$$

$$\mathfrak{h}_{kk}^C = - \sum_{\bar{\alpha}\bar{\alpha}'} g_{\bar{\alpha}}^k \mathcal{C}_{\bar{\alpha}\bar{\alpha}'} g_{\bar{\alpha}'}^k \quad (\text{B.18b})$$

$$\mathfrak{h}_{kk}^B = \sum_{\alpha\bar{\alpha}'} f_\alpha^k \mathcal{B}_{\alpha\bar{\alpha}'} g_{\bar{\alpha}'}^k + \sum_{\bar{\alpha}\alpha'} g_{\bar{\alpha}}^k \mathcal{B}_{\bar{\alpha}\alpha'} f_{\alpha'}^k \quad (\text{B.18c})$$

où \mathcal{A} et \mathcal{C} correspondent à la partie diagonale et \mathcal{B} à la partie hors-diagonale.

Les différents éléments de matrice s'écrivent comme

$$\mathcal{A}_{\alpha\alpha'} = \int d\xi R_{n'l}(\xi) R_{n'l}(\xi) [M^*(b_0\xi) + V(b_0\xi)] \quad (\text{B.19a})$$

$$\mathcal{C}_{\bar{\alpha}\bar{\alpha}'} = \int d\xi R_{n'\bar{l}}(\xi) R_{n'\bar{l}}(\xi) [M^*(b_0\xi) + V(b_0\xi)] \quad (\text{B.19b})$$

$$\mathcal{B}_{\bar{\alpha}\alpha'} = \mathcal{N}_{n\bar{l}} \mathcal{N}_{n'l} \int d\xi e^{-\xi^2} \xi^{2l} L_n^{\bar{l}+1/2} L_{n'}^{l+1/2} (2n' + l + 1 + \kappa - \xi^2) \quad (\text{B.19c})$$

Terme tenseur

Le terme tenseur peut quant à lui s'écrire comme

$$\begin{aligned} \mathfrak{h}_{kk}^T &\equiv \int d^3r f_k^\dagger h_D^T f_k \\ &\equiv - \int d^3r f_k^\dagger \frac{f_\rho}{2M} (\nabla\phi) \cdot \beta\sigma^0 \tau^3 f_k \\ \mathfrak{h}_{kk}^T &= + \int d^3r \phi \nabla \cdot \left[\frac{f_\phi}{2M} \mathbf{T}_k^\phi \right] \end{aligned} \quad (\text{B.20})$$

où une intégration par partie est utilisée pour échanger les dérivées des champs mésoniques $\phi \in \{\omega, \rho\}$ vers les champs fermioniques. Le courant tenseur T_k^ϕ est défini comme

$$\mathbf{T}^\phi = \sum_k \mathbf{T}_k^\phi = \begin{cases} \sum_k f_k^\dagger(r) \beta\sigma^0 f_k(r) & \phi = \omega \\ \sum_k f_k^\dagger(r) \beta\sigma^0 \tau_3 f_k(r) & \phi = \rho \end{cases} \quad (\text{B.21})$$

Nous devons donc calculer la dérivée spatiale du courant tenseur $\nabla \cdot \mathbf{T}_k^\phi$ qui, en symétrie sphérique, prend la forme simple

$$\nabla \cdot \mathbf{T}_k^\phi = \frac{1}{r^2} \frac{\partial r^2 T_k^{\phi,r}}{\partial r} \quad (\text{B.22})$$

avec $T_k^{\phi,r} = f_k^\dagger(r) \beta\sigma^0 \cdot \hat{\mathbf{r}} f_k(r)$. En particulier

$$\beta\sigma^0 = \frac{-i}{2} \begin{pmatrix} 0 & \sigma \\ -\sigma & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{B.23})$$

En utilisant $\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{r}} \Omega_{\kappa,m} = -\Omega_{-\kappa,m}$, il est possible d'écrire

$$\begin{aligned}
T_k^{\phi,r} &= \left(F_k^*(r) \Omega_{\kappa,m}^\dagger - iG_k^*(r) \Omega_{-\kappa,m}^\dagger \right) \frac{-i}{2} \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{r}} \\ -\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{r}} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F_k(r) \Omega_{\kappa,m} \\ iG_k(r) \Omega_{-\kappa,m} \end{pmatrix} \\
&= \frac{-i}{2} \left(F_k^*(r) \Omega_{\kappa,m}^\dagger - iG_k^*(r) \Omega_{-\kappa,m}^\dagger \right) \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{r}} iG_k(r) \Omega_{-\kappa,m} \\ -\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{r}} F_k(r) \Omega_{\kappa,m} \end{pmatrix} \\
&= \frac{-i}{2} \left(F_k^*(r) \Omega_{\kappa,m}^\dagger - iG_k^*(r) \Omega_{-\kappa,m}^\dagger \right) \begin{pmatrix} -iG_k(r) \Omega_{\kappa,m} \\ F_k(r) \Omega_{-\kappa,m} \end{pmatrix} \\
T_k^{\phi,r} &= -\frac{1}{2} \left\{ F_k^*(r) G_k(r) \Omega_{\kappa,m}^\dagger \Omega_{\kappa,m} + G_k^*(r) F_k(r) \Omega_{-\kappa,m}^\dagger \Omega_{-\kappa,m} \right\} \quad (\text{B.24})
\end{aligned}$$

L'intégration de ce courant sur sa partie angulaire peut être faite directement pour obtenir

$$T_k^{\phi,r} = -\frac{1}{2} \left\{ \sum_{\alpha,\tilde{\beta}} \delta_{\kappa_\alpha \kappa_{\tilde{\beta}}} \delta_{m_\alpha m_{\tilde{\beta}}} f_\alpha^k g_{\tilde{\beta}}^k R_\alpha^* R_{\tilde{\beta}} + \sum_{\tilde{\alpha},\beta} \delta_{\kappa_{\tilde{\alpha}} \kappa_\beta} \delta_{m_{\tilde{\alpha}} m_\beta} g_{\tilde{\alpha}}^k f_\beta^k R_{\tilde{\alpha}}^* R_\beta \right\} \quad (\text{B.25})$$

Et en écrivant les éléments de la matrice de Dirac comme

$$h_{kk}^T = \sum_\phi \sum_{\alpha,\tilde{\beta}} f_\alpha^k \mathcal{B}_{\alpha\tilde{\beta}}^{\phi,k} g_{\tilde{\beta}}^k + \sum_{\tilde{\alpha},\beta} g_{\tilde{\alpha}}^k \mathcal{B}_{\tilde{\alpha}\beta}^{\phi,k} f_\beta^k \quad (\text{B.26})$$

on obtient les éléments \mathcal{B} suivant

$$\begin{aligned}
\mathcal{B}_{\alpha\tilde{\beta}}^{\phi,k} &= -\frac{1}{2} \frac{f_\phi}{2M} \int dr \phi(r) \delta_{\kappa_\alpha \kappa_{\tilde{\beta}}} \delta_{m_\alpha m_{\tilde{\beta}}} \frac{1}{r^2} \partial_r (r^2 R_\alpha^* R_{\tilde{\beta}}) \\
\mathcal{B}_{\alpha\tilde{\beta}}^{\phi,k} &= -\frac{1}{2} \frac{f_\phi}{2M} \int dr \phi(r) \delta_{\kappa_\alpha \kappa_{\tilde{\beta}}} \delta_{m_\alpha m_{\tilde{\beta}}} \left[\frac{2}{r} R_\alpha R_{\tilde{\beta}} + (\partial_r R_\alpha R_{\tilde{\beta}} + R_\alpha \partial_r R_{\tilde{\beta}}) \right] \quad (\text{B.27})
\end{aligned}$$

B.2 Base d'oscillateur harmonique axial

B.2.1 Spineur axial

Dans le cas d'une symétrie axiale, le spineur prend la forme générale suivante

$$\psi_i(\mathbf{r}, s, t) = \begin{pmatrix} f_i^+(r_\perp, z) e^{i(\Omega_i-1/2)\varphi} \\ f_i^-(r_\perp, z) e^{i(\Omega_i+1/2)\varphi} \\ i g_i^+(r_\perp, z) e^{i(\Omega_i-1/2)\varphi} \\ i g_i^-(r_\perp, z) e^{i(\Omega_i+1/2)\varphi} \end{pmatrix} \chi_{t_i}(t) = \begin{pmatrix} F_i^+(r_\perp, z, t) \\ F_i^-(r_\perp, z, t) \\ i G_i^+(r_\perp, z, t) \\ i G_i^-(r_\perp, z, t) \end{pmatrix} \quad (\text{B.28})$$

où la base cylindrique (r_\perp, z, φ) est définie comme

$$\begin{cases} x = r_\perp \cos(\varphi) \\ y = r_\perp \sin(\varphi) \\ z = z \end{cases} \quad (\text{B.29})$$

Et en particulier,

$$\nabla = \begin{pmatrix} \partial_{r_\perp} \\ \frac{1}{r_\perp} \partial_\varphi \\ \partial_z \end{pmatrix} \quad (\text{B.30})$$

Il est alors possible d'écrire la matrice de Dirac comme

$$h_D = \begin{pmatrix} M^* + V & 0 & -i\partial_z & -ie^{-i\varphi} \left[\partial_{r_\perp} - \frac{i}{r_\perp} \partial_\varphi \right] \\ 0 & M^* + V & -ie^{+i\varphi} \left[\partial_{r_\perp} + \frac{i}{r_\perp} \partial_\varphi \right] & i\partial_z \\ -i\partial_z & ie^{-i\varphi} \left[\partial_{r_\perp} - \frac{i}{r_\perp} \partial_\varphi \right] & -M^* + V & 0 \\ -ie^{+i\varphi} \left[\partial_{r_\perp} + \frac{i}{r_\perp} \partial_\varphi \right] & i\partial_z & 0 & -M^* + V \end{pmatrix} \quad (\text{B.31})$$

Les équations de Dirac peuvent ensuite se réécrire comme

$$(M^* + V) f_i^+ + \partial_z g_i^+ + \left(\partial_{r_\perp} + \frac{\Omega + 1/2}{r_\perp} \right) g_i^- = \epsilon_i f_i^+ \quad (\text{B.32})$$

$$(M^* + V) f_i^- - \partial_z g_i^+ + \left(\partial_{r_\perp} - \frac{\Omega + 1/2}{r_\perp} \right) g_i^- = \epsilon_i f_i^- \quad (\text{B.33})$$

$$(M^* - V) g_i^+ + \partial_z f_i^+ + \left(\partial_{r_\perp} + \frac{\Omega + 1/2}{r_\perp} \right) f_i^- = -\epsilon_i g_i^+ \quad (\text{B.34})$$

$$(M^* - V) g_i^- - \partial_z f_i^- + \left(\partial_{r_\perp} - \frac{\Omega + 1/2}{r_\perp} \right) f_i^+ = -\epsilon_i g_i^- \quad (\text{B.35})$$

B.2.2 Base axiale

Les spineurs f^\pm et g^\pm sont ensuite écrits comme une expansion dans une base d'oscillateur harmonique déformé $\phi_\alpha(\mathbf{r}, s)$

$$\begin{aligned} \phi_{\alpha(n_z, n_r, m_l)}(r_\perp, z, s, t) &= \phi_{n_z}(z) \phi_{n_r}^{m_l}(r_\perp) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im_l\varphi} \chi_{m_s}(s) \chi_{t_\alpha}(t) \\ &= \phi_\alpha(r_\perp, z, s) \chi_{t_\alpha}(t) \end{aligned} \quad (\text{B.36})$$

où les polynômes d'Hermite H_{n_z} et de Laguerre $L_{n_r}^{m_l}$ sont utilisés pour l'expansion des parties axiale et radiale

$$\phi_{n_z}(z) = \frac{\mathcal{N}_{n_z}}{\sqrt{b_0 b_z}} H_{n_z}(\zeta) e^{-\zeta^2/2} \quad (\text{B.37})$$

$$\phi_{n_r}^{m_l}(r_\perp) = \frac{\mathcal{N}_{n_r}^{m_l}}{b_0 b_\perp} \sqrt{2} \eta^{m_l/2} L_{n_r}^{m_l}(\eta) e^{-\eta/2} \quad (\text{B.38})$$

avec η et ζ définies comme $\zeta = z/(b_0 b_z)$ et $\eta = r_\perp^2/(b_0 b_\perp)$. Les facteurs de normalisation prennent la forme

$$\mathcal{N}_{n_z} = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi} 2^{n_z} n_z!}} \quad \text{and} \quad \mathcal{N}_{n_r}^{m_l} = \sqrt{\frac{n_r!}{(n_r + m_l)!}} \quad (\text{B.39})$$

Finalement, les spineurs f et g se décomposent comme

$$f_i(\mathbf{r}, s, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{f_i^+(r_\perp, z)}{f_i^-(r_\perp, z)} e^{i(\Omega_i-1/2)\varphi} \right) = \sum_{\alpha} f_{\alpha}^{(i)} \phi_{\alpha}(\mathbf{r}, s) \chi_{t_{\alpha}}(t) \quad (\text{B.40})$$

$$g_i(\mathbf{r}, s, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{ig_i^+(r_\perp, z)}{ig_i^-(r_\perp, z)} e^{i(\Omega_i-1/2)\varphi} \right) = \sum_{\tilde{\alpha}} g_{\tilde{\alpha}}^{(i)} \phi_{\tilde{\alpha}}(\mathbf{r}, s) \chi_{t_{\tilde{\alpha}}}(t) \quad (\text{B.41})$$

où les $f_{\alpha}^{(i)}$ et $g_{\tilde{\alpha}}^{(i)}$ sont les inconnues à déterminer.

Partie axiale

Avant de procéder aux dérivations des éléments de matrice, il est nécessaire d'obtenir les relations de récurrence des polynômes de Laguerre et Hermite. Les polynômes d'Hermite peuvent être définis comme

$$H_n(z) = 2zH_{n-1}(z) - 2(n-1)H_{n-2}(z) \quad (\text{B.42})$$

En utilisant la normalisation précédente,

$$\begin{aligned} \mathcal{N}_n H_n(\zeta) &= \mathcal{N}_n (2\zeta H_{n-1}(z) - 2(n-1)H_{n-2}(\zeta)) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2n}} 2z \mathcal{N}_{n-1} H_{n-1}(\zeta) - \frac{1}{2\sqrt{n(n-1)}} 2(n-1) \mathcal{N}_{n-2} H_{n-2}(\zeta) \\ \mathcal{N}_n H_n(\zeta) &= \frac{1}{\sqrt{n}} \left(\sqrt{2}\zeta \mathcal{N}_{n-1} H_{n-1}(\zeta) - \sqrt{n-1} \mathcal{N}_{n-2} H_{n-2}(\zeta) \right) \end{aligned} \quad (\text{B.43})$$

Ainsi, il est possible d'écrire les fonctions d'onde comme

$$\phi_{n_z}(z) = \frac{1}{\sqrt{n_z}} \left(\sqrt{2}\zeta \phi_{n_z-1}(z) - \sqrt{n_z-1} \phi_{n_z-2}(z) \right) \quad (\text{B.44})$$

Les dérivées prennent quant à elle une forme récurrente similaire

$$\partial_z H_{n_z}(\zeta) = \frac{\partial \zeta}{\partial z} 2n_z H_{n_z-1}(\zeta) = \frac{1}{b_0 b_z} 2n_z H_{n_z-1}(\zeta) \quad (\text{B.45})$$

qui nous permet d'écrire

$$\partial_z \mathcal{N}_{n_z} e^{-\zeta^2/2} H_{n_z}(\zeta) = \left(\frac{1}{b_0 b_z} \sqrt{2n_z} \mathcal{N}_{n_z-1} H_{n_z-1}(\zeta) - \zeta H_{n_z}(\zeta) N_{n_z} \right) e^{-\zeta^2/2} \quad (\text{B.46})$$

et donc

$$\partial_z \phi_{n_z}(z) = \frac{1}{b_0 b_z} \left(\sqrt{2n_z} \phi_{n_z-1}(z) - z \phi_{n_z}(z) \right) \quad (\text{B.47})$$

$$\partial_z \phi_{n_z}(z) = \frac{\mathcal{N}_{n_z}}{(b_0 b_z)^{3/2}} \tilde{H}_{n_z}(\zeta) e^{-\zeta^2/2} \quad (\text{B.48})$$

où $\tilde{H}_{n_z}(\zeta)$ correspond à la dérivée des polynômes d'Hermite.

Les propriétés de normalisation sont données par

$$\int_{-\infty}^{\infty} dz \phi_n(z) \phi_m(z) = \delta_{nm} \quad (\text{B.49})$$

ainsi que

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dz \partial_z \phi_n(z) \phi_m(z) &= \int_{-\infty}^{\infty} dz \left(\sqrt{2n} \phi_{n-1}(z) - z \phi_n(z) \right) \phi_m(z) \\ &= \sqrt{2n} \delta_{n-1,m} - \int_{-\infty}^{\infty} dz z \phi_n(z) \phi_m(z) \\ \int_{-\infty}^{\infty} dz \partial_z \phi_n(z) \phi_m(z) &= \left(\sqrt{2n} - \frac{\sqrt{n}}{\sqrt{2}} \right) \delta_{n-1,m} = \frac{\sqrt{2}}{2} \sqrt{n} \delta_{n-1,m} \end{aligned} \quad (\text{B.50})$$

Partie radiale

Les polynômes de Laguerre généralisée prennent la forme récursive suivante

$$L_n^m(r) = \left(2 + \frac{m-1-r}{n} \right) L_{n-1}^m(r) - \left(1 + \frac{m-1}{n} \right) L_{n-2}^m(r) \quad (\text{B.51})$$

En utilisant la normalisation précédente,

$$\begin{aligned} N_n^m L_n^m(r) &= \left(2 + \frac{m-1-r}{n} \right) \frac{\sqrt{n}}{\sqrt{n+m}} N_{n-1}^m L_{n-1}^m(r) \\ &\quad - \left(1 + \frac{m-1}{n} \right) \frac{\sqrt{n}\sqrt{n-1}}{\sqrt{n+m}\sqrt{n+m-1}} N_{n-2}^m L_{n-2}^m(r) \\ &= \frac{1}{\sqrt{n(n+m)}} \left((2n+m-1-r) N_{n-1}^m L_{n-1}^m(r) - \sqrt{n-1+m}\sqrt{n-1} N_{n-2}^m L_{n-2}^m(r) \right) \end{aligned} \quad (\text{B.52})$$

et la fonction d'onde devient

$$\phi_{n_r}^{m_l}(r_\perp) = \frac{1}{\sqrt{n_r(n_r+m_l)}} \left((2n_r+m_l-1-r) \phi_{n_r-1}^{m_l}(r_\perp) - \sqrt{n_r-1+m_l}\sqrt{n_r-1} \phi_{n_r-2}^{m_l}(r_\perp) \right) \quad (\text{B.53})$$

Les dérivées peuvent alors s'exprimer comme

$$\frac{dL_n^m(r)}{dr} = \frac{1}{r} \left(n L_n^m - (n+m) L_{n-1}^m \right) \quad (\text{B.54})$$

et au final

$$\begin{aligned} \partial_r N_{n_r}^m \eta^{m_l/2} e^{-\eta/2} L_{n_r}^m(\eta) &= \frac{\partial \eta}{\partial r} \partial_\eta N_{n_r}^{m_l} \eta^{m_l/2} e^{-\eta/2} L_{n_r}^{m_l}(\eta) \\ &= \frac{2r}{b_0^2 b_\perp^2} \partial_\eta N_{n_r}^{m_l} \eta^{m_l/2} e^{-\eta/2} L_{n_r}^{m_l}(\eta) \\ &= \frac{2r}{b_0^2 b_\perp^2} \left(-\frac{1}{2} N_{n_r}^{m_l} L_{n_r}^{m_l} + \frac{m_l}{2} \frac{1}{\eta} N_{n_r}^{m_l} L_{n_r}^{m_l} + \frac{1}{\eta} \left(n_r N_{n_r}^{m_l} L_{n_r}^{m_l} - (n_r+m_l) N_{n_r}^{m_l} L_{n_r-1}^{m_l} \right) \right) \eta^{m_l/2} e^{-\eta/2} \\ &= \frac{2r}{b_0^2 b_\perp^2} \left(-\frac{1}{2} N_{n_r}^{m_l} L_{n_r}^{m_l} + \frac{m_l}{2} \frac{1}{\eta} N_{n_r}^{m_l} L_{n_r}^{m_l} + \frac{1}{\eta} \left(n_r N_{n_r}^{m_l} L_{n_r}^{m_l} - (n_r+m_l) \sqrt{\frac{n_r}{n_r+m_l}} N_{n_r-1}^{m_l} L_{n_r-1}^{m_l} \right) \right) \eta^{m_l/2} e^{-\eta/2} \\ \partial_r N_{n_r}^{m_l} \eta^{m_l/2} e^{-\eta/2} L_{n_r}^{m_l}(\eta) &= \frac{1}{b_0 b_\perp} \frac{1}{\sqrt{\eta}} \left((-\eta+m_l+2n_r) N_{n_r}^{m_l} L_{n_r}^{m_l} - 2\sqrt{n_r(n_r+m_l)} N_{n_r-1}^{m_l} L_{n_r-1}^{m_l} \right) \eta^{m_l/2} e^{-\eta/2} \end{aligned} \quad (\text{B.55})$$

Pour les fonctions d'ondes, il vient

$$\partial_r \phi_{n_r}^{m_l}(\eta) = \frac{1}{b_0 b_\perp} \frac{1}{\sqrt{\eta}} \left((-\eta + m_l + 2n_r) \phi_{n_r}^{m_l}(\eta) - 2\sqrt{n_r(n_r + m_l)} \phi_{n_r-1}^{m_l}(\eta) \right) \quad (\text{B.56})$$

$$= \frac{\mathcal{N}_{n_r}^{m_l}}{(b_0 b_\perp)^2} \sqrt{2\eta} \eta^{(m_l-1)/2} \tilde{L}_{n_r}^{m_l}(\eta) e^{-\eta/2} \quad (\text{B.57})$$

où $\tilde{L}_{n_r}^{m_l}(\eta)$ correspond à la dérivée des polynômes de Laguerre.

La normalisation des fonctions d'onde est alors donnée par

$$\int_0^\infty d\eta \phi_{n_1}^m(r) \phi_{n_2}^m(r) = \int d\eta \mathcal{N}_{n_1}^m \mathcal{N}_{n_2}^m \eta^m e^{-\eta} L_{n_1}^m(\eta) L_{n_2}^m(\eta) = \delta_{n_1, n_2} \quad (\text{B.58})$$

B.2.3 Éléments de matrice

Termes cinétique, scalaire et vectoriel

Les éléments de matrice sont associés au noyau

$$\mathfrak{h}_{kk} = \int d^3r f_k^\dagger(\mathbf{r}) h_D f_k(\mathbf{r}) \quad (\text{B.59})$$

calculé à partir des éléments de l'Hamiltonien de Dirac. En utilisant l'expansion axiale présentée ci-dessus et les équations (Eq.(B.32)-(B.35)), il est possible d'écrire les éléments \mathfrak{h}_{kk}

$$\mathfrak{h}_{kk}^A = \sum_{\alpha\alpha'} f_\alpha^k \mathcal{A}_{\alpha\alpha'} f_{\alpha'}^k \quad (\text{B.60a})$$

$$\mathfrak{h}_{kk}^C = - \sum_{\tilde{\alpha}\tilde{\alpha}'} g_{\tilde{\alpha}}^k \mathcal{C}_{\tilde{\alpha}\tilde{\alpha}'} g_{\tilde{\alpha}'}^k \quad (\text{B.60b})$$

$$\mathfrak{h}_{kk}^B = \sum_{\alpha\tilde{\alpha}'} f_\alpha^k \mathcal{B}_{\alpha\tilde{\alpha}'} g_{\tilde{\alpha}'}^k + \sum_{\tilde{\alpha}\alpha'} g_{\tilde{\alpha}}^k \mathcal{B}_{\tilde{\alpha}\alpha'} f_{\alpha'}^k \quad (\text{B.60c})$$

où \mathcal{A} et \mathcal{C} correspondent à la partie diagonale et \mathcal{B} à la partie hors-diagonale.

Les éléments de matrice prennent la forme

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_{\alpha\alpha'} &= \delta_{m_l, m'_l} \delta_{m_s, m'_s} \mathcal{N}_{n_z} \mathcal{N}_{n_r}^{m_l} \mathcal{N}_{n'_z} \mathcal{N}_{n'_r}^{m'_l} \int d\eta e^{-\eta} L_{n_r}^{m_l}(\eta) L_{n'_r}^{m'_l}(\eta) \\ &\quad \times \int d\zeta e^{-\zeta^2} H_{n_z}(\zeta) H_{n'_z}(\zeta) (M^*(b_0 b_z \zeta, b_0 b_\perp \sqrt{\eta}) + V(b_0 b_z \zeta, b_0 b_\perp \sqrt{\eta})) \end{aligned} \quad (\text{B.61a})$$

$$\begin{aligned} \mathcal{C}_{\alpha\alpha'} &= \delta_{m_l, m'_l} \delta_{m_s, m'_s} \mathcal{N}_{n_z} \mathcal{N}_{n_r}^{m_l} \mathcal{N}_{n'_z} \mathcal{N}_{n'_r}^{m'_l} \int d\eta e^{-\eta} L_{n_r}^{m_l}(\eta) L_{n'_r}^{m'_l}(\eta) \\ &\quad \times \int d\zeta e^{-\zeta^2} H_{n_z}(\zeta) H_{n'_z}(\zeta) (M^*(b_0 b_z \zeta, b_0 b_\perp \sqrt{\eta}) - V(b_0 b_z \zeta, b_0 b_\perp \sqrt{\eta})) \end{aligned} \quad (\text{B.61b})$$

$$\begin{aligned} \mathcal{B}_{\alpha\alpha'} &= \delta_{m_l, m'_l} \delta_{m_s, m'_s} \delta_{n_r, n'_r} \frac{(-1)^{1/2-m_s}}{b_0 b_z} \left(\delta_{n_z n'_z - 1} \sqrt{\frac{n'_z}{2}} - \delta_{n_z n'_z - 1} \sqrt{\frac{n_z}{2}} \right) \\ &\quad + \delta_{m_l, m'_l + 1} \delta_{m_s, m'_s - 1} \delta_{n_z n'_z} \mathcal{N}_{n_r}^{m_l} \mathcal{N}_{n'_r}^{m'_l} \frac{1}{b_0 b_\perp} \int_0^\infty d\eta e^{-\eta} \eta^{m_l - 1/2} L_{n_r}^{m_l} \left(\tilde{L}_{n'_r}^{m_l} - m_l L_{n'_r}^{m_l} \right) \\ &\quad + \delta_{m_l, m'_l - 1} \delta_{m_s, m'_s + 1} \delta_{n_z n'_z} \mathcal{N}_{n_r}^{m_l} \mathcal{N}_{n'_r}^{m'_l} \frac{1}{b_0 b_\perp} \int_0^\infty d\eta e^{-\eta} \eta^{m_l - 1/2} L_{n_r}^{m_l} \left(\tilde{L}_{n'_r}^{m_l} + m'_l L_{n'_r}^{m_l} \right) \end{aligned} \quad (\text{B.61c})$$

Terme tenseur

Le terme tenseur peut quant à lui s'écrire comme

$$\begin{aligned} \mathfrak{h}_{kk}^T &\equiv \int d^3r f_k^\dagger h_D^T f_k \\ &\equiv - \int d^3r f_k^\dagger \frac{f_\rho}{2M} (\nabla \phi) \cdot \beta \sigma^0 \tau^3 f_k \\ \mathfrak{h}_{kk}^T &= + \int d^3r \phi \nabla \cdot \left[\frac{f_\phi}{2M} \mathbf{T}_k^\phi \right] \end{aligned} \quad (\text{B.62})$$

où une intégration par partie est utilisée pour échanger les dérivées des champs mésoniques $\phi \in \{\omega, \rho\}$ vers les champs fermioniques. Le courant tenseur \mathbf{T}_k^ϕ est défini comme

$$\mathbf{T}^\phi = \sum_k \mathbf{T}_k^\phi = \begin{cases} \sum_k f_k^\dagger \beta \sigma^0 f_k & \phi = \omega \\ \sum_k f_k^\dagger \beta \sigma^0 \tau_3 f_k & \phi = \rho \end{cases} \quad (\text{B.63})$$

Pour la suite, nous utilisons une base légèrement différente pour les opérateurs dérivées définies comme

$$\partial_\pm = \partial_x \pm i\partial_y = e^{\pm i\varphi} \left[\partial_{r_\perp} \pm \frac{i}{r_\perp} \partial_\varphi \right] = \frac{e^{\pm i\varphi}}{b_0 b_\perp} \left[2\sqrt{\eta} \partial_\eta \pm \frac{i}{\sqrt{\eta}} \partial_\varphi \right] \quad (\text{B.64})$$

$$\partial_z = \frac{1}{b_0 b_z} \partial_\zeta \quad (\text{B.65})$$

où $\eta = \left(\frac{r_\perp}{b_0 b_\perp} \right)^2$ et $\zeta = \frac{z}{b_0 b_z}$ où b_0 , b_\perp et b_z sont les paramètres de la base d'oscillateur. Dans cette base, les matrices de Pauli prennent la forme

$$\sigma^+ = \begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 2 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (\text{B.66})$$

et le produit scalaire est défini comme

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\nabla} = \frac{1}{2} (\sigma^+ \partial_- + \sigma^- \partial_+) + \sigma^z \partial_z \quad (\text{B.67})$$

On écrit alors les différentes contributions du terme tenseur comme

$$\begin{aligned} T_k^+ &= (2q_k) \begin{pmatrix} F_k^{+*} & F_k^{-*} & -iG_k^{+*} & -iG_k^{-*} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & +i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F_k^+ \\ F_k^- \\ iG_k^+ \\ iG_k^- \end{pmatrix} \\ &= (2q_k) (F_k^{+*} G_k^- + G_k^{+*} F_k^-) \end{aligned} \quad (\text{B.68})$$

$$\begin{aligned} T_k^- &= (2q_k) \begin{pmatrix} F_k^{+*} & F_k^{-*} & -iG_k^{+*} & -iG_k^{-*} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ +i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F_k^+ \\ F_k^- \\ iG_k^+ \\ iG_k^- \end{pmatrix} \\ &= (2q_k) (F_k^{-*} G_k^+ + G_k^{-*} F_k^+) \end{aligned} \quad (\text{B.69})$$

$$\begin{aligned} T_k^3 &= (2q_k) \begin{pmatrix} F_k^{+*} & F_k^{-*} & -iG_k^{+*} & -iG_k^{-*} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & -\frac{i}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{i}{2} \\ \frac{i}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{i}{2} & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F_k^+ \\ F_k^- \\ iG_k^+ \\ iG_k^- \end{pmatrix} \\ &= (2q_k) \frac{1}{2} (F_k^{+*} G_k^+ - F_k^{-*} G_k^- + G_k^{+*} F_k^+ - G_k^{-*} F_k^-) \end{aligned} \quad (\text{B.70})$$

où $q_k = \pm 1$ pour les protons (respectivement neutrons) dans le cas du courant tenseur iso-vecteur ρ .

La décomposition sur la base d'oscillateur donne alors

$$T_k^+ = (2q_k) \left\{ \sum_{\alpha\tilde{\beta}} \delta_{ms_\alpha, \uparrow} \delta_{ms_{\tilde{\beta}}, \downarrow} f_\alpha^k g_{\tilde{\beta}}^k \phi_\alpha^* \phi_{\tilde{\beta}} + \sum_{\tilde{\alpha}\beta} \delta_{ms_{\tilde{\alpha}}, \uparrow} \delta_{ms_\beta, \downarrow} g_{\tilde{\alpha}}^k f_\beta^k \phi_{\tilde{\alpha}}^* \phi_\beta \right\} \quad (\text{B.71})$$

$$T_k^- = (2q_k) \left\{ \sum_{\alpha\tilde{\beta}} \delta_{ms_\alpha, \downarrow} \delta_{ms_{\tilde{\beta}}, \uparrow} f_\alpha^k g_{\tilde{\beta}}^k \phi_\alpha^* \phi_{\tilde{\beta}} + \sum_{\tilde{\alpha}\beta} \delta_{ms_{\tilde{\alpha}}, \downarrow} \delta_{ms_\beta, \uparrow} g_{\tilde{\alpha}}^k f_\beta^k \phi_{\tilde{\alpha}}^* \phi_\beta \right\} \quad (\text{B.72})$$

$$T_k^3 = (2q_k) \frac{1}{2} \left\{ \sum_{\alpha\tilde{\beta}} \delta_{ms_\alpha, ms_{\tilde{\beta}}} (2ms_\alpha) f_\alpha^k g_{\tilde{\beta}}^k \phi_\alpha^* \phi_{\tilde{\beta}} + \sum_{\tilde{\alpha}\beta} \delta_{ms_{\tilde{\alpha}}, ms_\beta} (2ms_{\tilde{\alpha}}) g_{\tilde{\alpha}}^k f_\beta^k \phi_{\tilde{\alpha}}^* \phi_\beta \right\} \quad (\text{B.73})$$

Les éléments de matrices se déduisent ensuite facilement en écrivant

$$\mathfrak{h}_{kk}^{\mathcal{B}} = \sum_{\alpha\tilde{\beta}} f_\alpha^k \mathcal{B}_{\alpha\tilde{\beta}}^T g_{\tilde{\beta}}^k + \sum_{\tilde{\alpha}\beta} g_{\tilde{\alpha}}^k \mathcal{B}_{\tilde{\alpha}\beta}^T f_\beta^k \quad (\text{B.74})$$

où les \mathcal{B}^T sont décomposés suivant les composantes $+$, $-$ et 3 .

$$\mathcal{B}_{\alpha\tilde{\beta}}^T = \mathcal{B}_{\alpha\tilde{\beta}}^{T,+} + \mathcal{B}_{\alpha\tilde{\beta}}^{T,-} + \mathcal{B}_{\alpha\tilde{\beta}}^{T,3} \quad (\text{B.75})$$

Ces contributions peuvent être explicitées comme

$$\mathcal{B}_{\alpha\tilde{\beta}}^{T,+} = (2q_k) \delta_{m_{s\alpha},\uparrow} \delta_{m_{s\tilde{\beta}},\downarrow} \frac{f^T}{2M} I_{\alpha\tilde{\beta}}^+ \quad (\text{B.76})$$

avec

$$\begin{aligned} I_{\alpha\tilde{\beta}}^+ &= \int d^3r \phi(\mathbf{r}) [(\partial_+ \phi_\alpha^*) \phi_\beta + \phi_\alpha^* \partial_+ \phi_\beta] \\ &= \int d^3r \phi(\mathbf{r}) \phi_{nz_\alpha} \phi_{nz_{\tilde{\beta}}} \left\{ \left[\frac{e^{i\varphi}}{\sqrt{\eta}} e^{-im_\alpha \varphi} \left((2n_\alpha + 2m_\alpha - \eta) \phi_{n_\alpha}^{m_\alpha} - 2\sqrt{n_\alpha(n_\alpha + m_\alpha)} \phi_{n_\alpha-1}^{m_\alpha} \right) \right] \phi_{n_{\tilde{\beta}}}^{m_{\tilde{\beta}}} \right. \\ &\quad \left. + \phi_{n_\alpha}^{-m_\alpha} \left[\frac{e^{i\varphi}}{\sqrt{\eta}} e^{im_{\tilde{\beta}} \varphi} \left((2n_{\tilde{\beta}} - \eta) \phi_{n_{\tilde{\beta}}}^{m_{\tilde{\beta}}} - 2\sqrt{n_{\tilde{\beta}}(n_{\tilde{\beta}} + m_{\tilde{\beta}})} \phi_{n_{\tilde{\beta}}-1}^{m_{\tilde{\beta}}} \right) \right] \right\} \\ &= \int d^3r \phi(\mathbf{r}) \phi_{nz_\alpha} \phi_{nz_{\tilde{\beta}}} \frac{\delta_{m_\alpha, m_{\tilde{\beta}}+1}}{\sqrt{\eta}} \left\{ \left((2n_\alpha + 2m_\alpha - \eta) \phi_{n_\alpha}^{m_\alpha} - 2\sqrt{n_\alpha(n_\alpha + m_\alpha)} \phi_{n_\alpha-1}^{m_\alpha} \right) \phi_{n_{\tilde{\beta}}}^{m_{\tilde{\beta}}} \right. \\ &\quad \left. + \phi_{n_\alpha}^{-m_\alpha} \left((2n_{\tilde{\beta}} - \eta) \phi_{n_{\tilde{\beta}}}^{m_{\tilde{\beta}}} - 2\sqrt{n_{\tilde{\beta}}(n_{\tilde{\beta}} + m_{\tilde{\beta}})} \phi_{n_{\tilde{\beta}}-1}^{m_{\tilde{\beta}}} \right) \right\} \\ I_{\alpha\tilde{\beta}}^+ &= \int d^3r \phi(\mathbf{r}) Z_{nz_\alpha} Z_{nz_{\tilde{\beta}}} \delta_{m_\alpha, m_{\tilde{\beta}}+1} \left[R_{n_\alpha}^{\ominus m_\alpha} R_{n_{\tilde{\beta}}}^{m_{\tilde{\beta}}} + R_{n_\alpha}^{m_\alpha} R_{n_{\tilde{\beta}}}^{\oplus m_{\tilde{\beta}}} \right] \quad (\text{B.77}) \end{aligned}$$

où ont été introduits les R_n^m et Z_n

$$R_n^m = \mathcal{N}_n^m e^{-\eta/2} \eta^{m/2} L_n^m \quad (\text{B.78})$$

$$Z_n = \mathcal{N}_n e^{-\zeta^2/2} H_n \quad (\text{B.79})$$

Les fonctions R^\oplus et R^\ominus sont définies comme

$$R_{n_\alpha}^{\ominus m_\alpha} = (2n_\alpha + 2m_\alpha - \eta) R_{n_\alpha}^{m_\alpha} - 2\sqrt{n_\alpha(n_\alpha + m_\alpha)} R_{n_\alpha-1}^{m_\alpha} \quad (\text{B.80})$$

$$R_{n_{\tilde{\beta}}}^{\oplus m_{\tilde{\beta}}} = (2n_{\tilde{\beta}} - \eta) R_{n_{\tilde{\beta}}}^{m_{\tilde{\beta}}} - 2\sqrt{n_{\tilde{\beta}}(n_{\tilde{\beta}} + m_{\tilde{\beta}})} R_{n_{\tilde{\beta}}-1}^{m_{\tilde{\beta}}} \quad (\text{B.81})$$

et correspondent à des combinaisons de polynômes de Laguerre.

Finalement, les éléments de matrice prennent la forme

$$\mathcal{B}_{\alpha\tilde{\beta}}^{T,+} = (2q_k) \delta_{m_{s\alpha},\uparrow} \delta_{m_{s\tilde{\beta}},\downarrow} \frac{f^T}{2M} \int d^3r \phi(\mathbf{r}) Z_{nz_\alpha} Z_{nz_{\tilde{\beta}}} \delta_{m_\alpha, m_{\tilde{\beta}}+1} \left[R_{n_\alpha}^{\ominus m_\alpha} R_{n_{\tilde{\beta}}}^{m_{\tilde{\beta}}} + R_{n_\alpha}^{m_\alpha} R_{n_{\tilde{\beta}}}^{\oplus m_{\tilde{\beta}}} \right] \quad (\text{B.82})$$

En procédant de façon identique, la composante $-$ prend la forme

$$\mathcal{B}_{\alpha\tilde{\beta}}^{T,-} = (2q_k) \delta_{m_{s\alpha},\downarrow} \delta_{m_{s\tilde{\beta}},\uparrow} \frac{f^T}{2M} \int d^3r \phi(\mathbf{r}) Z_{nz_\alpha} Z_{nz_{\tilde{\beta}}} \delta_{m_\alpha, m_{\tilde{\beta}}-1} \left[R_{n_\alpha}^{\oplus m_\alpha} R_{n_{\tilde{\beta}}}^{m_{\tilde{\beta}}} + R_{n_\alpha}^{m_\alpha} R_{n_{\tilde{\beta}}}^{\ominus m_{\tilde{\beta}}} \right] \quad (\text{B.83})$$

et la composante 3

$$\mathcal{B}_{\alpha\tilde{\beta}}^{T,3} = (2q_k) \delta_{m_{s\alpha}, m_{s\tilde{\beta}}} \frac{f^T}{2M} \int d^3r \phi(\mathbf{r}) R_{n_{\tilde{\beta}}}^{m_{\tilde{\beta}}} R_{n_\alpha}^{m_\alpha} \left[Z_{nz_\alpha}^\ominus Z_{nz_{\tilde{\beta}}} + Z_{nz_\alpha} Z_{nz_{\tilde{\beta}}}^\ominus \right] \quad (\text{B.84})$$

avec

$$Z_{n_z}^\ominus = \sqrt{\frac{n_z}{2}} Z_{n_z-1} - \sqrt{\frac{n_z+1}{2}} Z_{n_z+1} \quad (\text{B.85})$$

Équation d'états de la matière nucléaire infinie

L'équation d'état (EoS) de la matière nucléaire infinie pour une interaction par échange de méson est dérivée ici. Les différentes quantités thermodynamiques usuelles sont considérées (énergie, pression, incompressibilité, ...). Ces quantités sont principalement utilisées dans le Chap.4 pour tester et ajuster différentes paramétrisations. Des détails supplémentaires peuvent être trouvés dans [Dut+14] où les calculs sont aussi effectués pour d'autres fonctionnelles relativistes.

C.1 Densité Lagrangienne, équations du mouvement et densités

La densité Lagrangienne considérée ici est donc de la forme suivante

$$\begin{aligned} \mathcal{L} = & \bar{\psi} (i\gamma^\mu \partial_\mu - M) \psi + \Gamma_\sigma \sigma \bar{\psi} \psi - \Gamma_\omega \bar{\psi} \gamma^\mu \omega_\mu \psi - \frac{\Gamma_\rho}{2} \bar{\psi} \gamma^\mu \vec{\rho}_\mu \cdot \vec{\tau} \psi \\ & + \frac{1}{2} (\partial_\mu \sigma \partial^\mu \sigma - m_\sigma^2 \sigma^2) - \frac{1}{4} \Omega^{\mu\nu} \Omega_{\mu\nu} - \frac{1}{4} \vec{\mathcal{R}}^{\mu\nu} \vec{\mathcal{R}}_{\mu\nu} + \frac{1}{2} m_\omega^2 \omega^2 + \frac{1}{2} m_\rho^2 \vec{\rho}^2 \end{aligned} \quad (\text{C.1})$$

Les constantes de couplages sont prises comme dépendantes de la densité. Des termes tenseurs peuvent être ajoutés à cette densité Lagrangienne sans changer les résultats concernant l'EoS. Les approximations usuelles décrites dans le Chap.2 sont utilisées ici.

Dans la matière infinie, les équations mésoniques se mettent sous la forme simple

$$m_\sigma^2 \sigma^2 = \Gamma_\sigma \rho_s \quad (\text{C.2a})$$

$$m_\omega^2 \omega_0^2 = \Gamma_\omega \rho \quad (\text{C.2b})$$

$$m_\rho^2 \rho_0 = \frac{\Gamma_\rho}{2} \rho_3 \quad (\text{C.2c})$$

avec les densités associées

$$\rho_s = \langle \bar{\psi} \psi \rangle = \rho_{sp} + \rho_{sn} \quad (\text{C.3a})$$

$$\rho = \langle \bar{\psi} \gamma^0 \psi \rangle = \rho_p + \rho_n \quad (\text{C.3b})$$

$$\rho_3 = \langle \bar{\psi} \gamma^0 \tau^3 \psi \rangle = \rho_p - \rho_n = (2y - 1) \rho \quad (\text{C.3c})$$

où $y = \frac{\rho_p}{\rho}$. Il est alors possible de calculer explicitement ces quantités (γ représente la dégénérescence de l'état, donc en tenant compte des spins $\gamma = 2$)

$$\rho_{p,n} = \frac{\gamma}{2\pi^2} \int_0^{k_{F_{p,n}}} dk k^2 = \frac{\gamma}{6\pi^2} k_{F_{p,n}}^3 \quad (\text{C.4a})$$

$$\rho_{s_{p,n}} = \frac{\gamma M^{\star 3}}{4\pi^2} \left[q \sqrt{1+q^2} - \ln \left(q + \sqrt{1+q^2} \right) \right] \quad (\text{C.4b})$$

où $\xi = k/k_{F_{p,n}}$ et $q = \frac{k_{F_{p,n}}}{M^{\star}}$. La masse de Dirac M^{\star} est définie comme

$$M^{\star} = M - \Gamma_{\sigma} \sigma = M - \frac{\Gamma_{\sigma}^2}{m_{\sigma}^2} \rho_s = M - C_{\sigma} \rho_s \quad (\text{C.5})$$

avec les C_i définis comme $C_i = \frac{\Gamma_i^2}{m_i^2}$. Les équations couples Eqs.(C.4b-C.5) sont résolues numériquement permettant de calculer M^{\star} et ρ_s .

C.2 Énergie et pression

La densité d'énergie est définie comme la valeur moyenne la composante 00 du tenseur énergie-impulsion i.e.

$$\begin{aligned} \epsilon &= \langle T_{00} \rangle = \frac{1}{2} m_{\sigma}^2 \sigma^2 - \frac{1}{2} m_{\omega}^2 \omega_0^2 + \Gamma_{\omega} \omega_0 \rho - \frac{1}{2} m_{\rho}^2 \rho_0^2 + \frac{\Gamma_{\rho}}{2} \rho_0 \rho_3 + \epsilon_{kin}^{p+n} \\ \epsilon &= \frac{1}{2} C_{\sigma} \rho_s^2 + \frac{1}{2} C_{\omega} \rho^2 + \frac{1}{2} C_{\rho} \rho_3^2 + \epsilon_{kin}^{p+n} \end{aligned} \quad (\text{C.6})$$

avec la densité d'énergie cinétique

$$\epsilon_{kin}^{p,n} = \frac{\gamma}{2\pi^2} \int_0^{k_{F_{p,n}}} dk k^2 \sqrt{k^2 + M^{\star 2}} \quad (\text{C.7})$$

On peut montrer que

$$\epsilon_{kin}^{p,n} = \frac{1}{4} M^{\star} \rho_{s_{p,n}} + \frac{3}{4} E_{p,n} \rho_{p,n} \quad (\text{C.8})$$

avec $E_{p,n} = \sqrt{M^{\star 2} + k_{F_{p,n}}^2}$.

La pression se calcule de façon identique

$$P = \langle T_{ii} \rangle / 3 = -\frac{1}{2} m_{\sigma}^2 \sigma^2 + \frac{1}{2} m_{\omega}^2 \omega_0^2 + \frac{1}{2} m_{\rho}^2 \rho_0^2 + P_{kin}^{p+n} + \rho \Sigma_R \quad (\text{C.9})$$

où le terme cinétique prend la forme

$$\begin{aligned} P_{kin}^{p,n} &= \frac{\gamma}{6\pi^2} \int_0^{k_{F_{p,n}}} dk k^2 \frac{k^2}{\sqrt{k^2 + M^{*2}}} \\ P_{kin}^{p,n} &= -\frac{1}{4} M^* \rho_{s_{p,n}} + \frac{1}{4} E_{p,n} \rho_{p,n} \end{aligned} \quad (\text{C.10})$$

et le terme de réarrangement

$$\begin{aligned} \Sigma_R &= \frac{\partial \Gamma_\omega}{\partial \rho} \omega_0 \rho + \frac{1}{2} \frac{\partial \Gamma_\rho}{\partial \rho} \rho_0 \rho_3 - \frac{\partial \Gamma_\sigma}{\partial \rho} \sigma \rho_s \\ \Sigma_R &= \frac{1}{2} D_\omega \rho^2 + \frac{1}{2} D_\rho \rho_3^2 - \frac{1}{2} D_\sigma \rho_s^2 \end{aligned} \quad (\text{C.11})$$

où $D_i = \frac{\partial C_i}{\partial \rho} = 2 \frac{C_i}{\Gamma_i} \frac{\partial \Gamma_i}{\partial \rho}$. La pression prend donc la forme usuelle

$$P = \frac{1}{2} (C_\omega + D_\omega \rho) \rho^2 + \frac{1}{2} (C_\rho + D_\rho \rho) \rho_3^2 - \frac{1}{2} (C_\sigma + D_\sigma \rho) \rho_s^2 + P_{kin}^{p+n} \quad (\text{C.12})$$

C.3 Incompressibilité

L'incompressibilité est définie comme la dérivée de la pression par rapport à la densité vectorielle du système (à un facteur numérique près)

$$K = 9 \frac{dP}{d\rho} \quad (\text{C.13})$$

C.3.1 Partie mésonique

Pour la partie mésonique on obtient

$$\frac{dP_{meson}}{d\rho} = \frac{1}{2} (2D_\omega + E_\omega \rho) \rho^2 + (C_\omega + D_\omega \rho) \rho - \frac{1}{2} (2D_\sigma + E_\sigma \rho) \rho_s^2 - (C_\omega + D_\omega \rho) \rho_s \frac{\partial \rho_s}{\partial \rho} \quad (\text{C.14})$$

La dérivée de la densité scalaire peut être calculée en utilisant (C.4b-C.5) comme

$$\frac{\partial \rho_s}{\partial \rho} = \frac{3\rho_s}{M^*} \frac{\partial M^*}{\partial \rho} + \frac{\gamma M^{*3}}{4\pi^2} \frac{\partial q \sqrt{1+q^2} - \ln(q + \sqrt{1+q^2})}{\partial \rho} \quad (\text{C.15})$$

avec

$$\frac{dM^*}{d\rho} = - \left(C_\sigma \frac{\partial \rho_s}{\partial \rho} + D_\sigma \rho_s \right) \quad (\text{C.16})$$

Ces expressions se simplifient pour écrire

$$\frac{\partial \rho_s}{\partial \rho} = - \left(C_\sigma \frac{\partial \rho_s}{\partial \rho} + D_\sigma \rho_s \right) \left[\frac{3\rho_s}{M^*} - \frac{3\rho}{E} \right] + \frac{M^*}{E} \quad (\text{C.17})$$

Il est alors commode d'introduire $f = 3 \left[\frac{\rho_s}{M^*} - \frac{\rho}{E} \right]$ pour obtenir une expression plus compacte

$$\frac{\partial \rho_s}{\partial \rho} = \frac{\frac{M^*}{E} - f D_\sigma \rho_s}{1 + f C_\sigma} \quad (\text{C.18})$$

C.3.2 Partie cinétique

La dérivée de la partie cinétique possède quatre termes

$$\frac{dP_{kin}}{d\rho} = \frac{1}{4} \left[\frac{dE}{d\rho} \rho + E \right] - \frac{1}{4} \left[\frac{dM^*}{d\rho} \rho_s + M^* \frac{d\rho_s}{d\rho} \right] \quad (C.19)$$

La dérivée de l'énergie se calcul facilement

$$\begin{aligned} \frac{dE}{d\rho} &= \frac{k \frac{dk}{d\rho} + M^* \frac{dM^*}{d\rho}}{E} = \frac{k \frac{k}{3\rho} + M^* \frac{dM^*}{d\rho}}{E} \\ &= \frac{k^2}{3\rho E} - \frac{M^*}{E} \left(C_\sigma \frac{\partial \rho_s}{\partial \rho} + D_\sigma \rho_s \right) \end{aligned} \quad (C.20)$$

En combinant avec les résultats précédent, on écrit alors

$$\frac{dP_{kin}}{d\rho} = \frac{1}{3} \left[E - M^* \frac{\partial \rho_s}{\partial \rho} \right] \quad (C.21)$$

Finalement, l'incompressibilité prend la forme suivante

$$\begin{aligned} K &= 9 \left\{ \frac{1}{2} (2D_\omega + E_\omega \rho) \rho^2 + (C_\omega + D_\omega \rho) \rho - \frac{1}{2} (2D_\sigma + E_\sigma \rho) \rho_s^2 - (C_\omega + D_\omega \rho) \rho_s \frac{\partial \rho_s}{\partial \rho} \right\} \\ &+ 9 \frac{1}{3} \left[E - M^* \frac{\partial \rho_s}{\partial \rho} \right] \end{aligned} \quad (C.22)$$

C.4 Énergie de symétrie

Pour calculer les quantités iso-vectorielle, il est commode d'introduire le paramètre d'asymétrie $\delta = \frac{\rho_p - \rho_n}{\rho_p + \rho_n}$ autour duquel il est possible d'effectuer un développement limité comme

$$E(\rho, \delta) = E_0(\rho) + E_{\text{sym}}(\rho) \delta^2 + \dots \quad (C.23)$$

Le premier terme correspond est relié à l'énergie précédemment dérivée (Eq.(C.8)) $E_0 = \epsilon_0/\rho - M$. Le second terme correspond à la dérivée seconde de l'énergie par rapport δ

$$E_{\text{sym}}(\rho) = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 E(\rho, \delta)}{\partial \delta^2} \Big|_{\delta=0} \quad (C.24)$$

Un calcul simple permet d'écrire

$$E_{\text{sym}}(\rho) = \frac{1}{6} \frac{k^2}{E} + \frac{1}{8} C_\rho \rho \quad (C.25)$$

De la même façon que l'on a effectué un développement limité autour d'une perturbation d'isospin, il est possible de faire de même pour l'énergie de symétrie E_{sym} autour d'une variation de densité par rapport au paramètre $\chi = \frac{\rho - \rho_0}{3\rho_0}$. On écrit alors

$$E_{\text{sym}}(\rho) = E_{\text{sym}}(\rho_0) + L\chi + \frac{K_{\text{sym}}}{2} \chi^2 + \dots \quad (C.26)$$

On dénote généralement $J = E_{sym}(\rho_0)$. L correspond à la pente de l'énergie de symétrie et K_{sym} sa courbure. Ces quantités sont définies comme

$$L = 3\rho \frac{\partial E_{sym}}{\partial \rho} \quad (\text{C.27a})$$

$$K_{sym} = 9\rho^2 \frac{\partial^2 E_{sym}}{\partial \rho^2} \quad (\text{C.27b})$$

Les expressions détaillées de ces quantités est données par

$$L = \frac{k^2}{3E} - \frac{k^4}{6E^3} \left[1 + \frac{2kM^*}{\pi^2} \frac{\partial M^*}{\partial \rho} \right] + \frac{3}{8} D_\rho \rho^2 + \frac{3}{8} C_\rho \rho \quad (\text{C.28})$$

et

$$K_{sym} = 9\rho^2 \left\{ -\frac{\pi}{12E^3 k} \left(\frac{\pi^2}{k} + 2M^* \frac{\partial M^*}{\partial \rho} \right) - \frac{\pi^4}{12Ek^4} + \frac{1}{4} D_\rho \right. \quad (\text{C.29})$$

$$\left. - \left[\frac{\pi^4}{24E^3 k^2} - \frac{k\pi^2}{8E^5} \left(\frac{\pi^2}{k} + 2M^* \frac{\partial M^*}{\partial \rho} \right) \right] \left(1 + \frac{2M^* k}{\pi^2} \frac{\partial M^*}{\partial \rho} \right) \right. \quad (\text{C.30})$$

$$\left. + \frac{\rho}{4m_\rho^2} \left(\frac{\partial \Gamma_\rho}{\partial \rho} \right)^2 - \frac{k\pi^2}{12E^3} \left[\frac{M^*}{k^2} \frac{\partial M^*}{\partial \rho} + \frac{2k}{\pi^2} \left(\frac{\partial M^*}{\partial \rho} \right)^2 + \frac{2kM^*}{\pi^2} \frac{\partial^2 M^*}{\partial \rho^2} \right] \right. \quad (\text{C.31})$$

$$\left. + \frac{\Gamma_\rho}{4m_\rho^2} \frac{\partial^2 \Gamma_\rho}{\partial \rho^2} \right\} \quad (\text{C.32})$$

Références

- [Dut+14] M. DUTRA et al. « Relativistic mean-field hadronic models under nuclear matter constraints ». In : *Physical Review C* 90.5 (10 nov. 2014), p. 055203. DOI : [10.1103/PhysRevC.90.055203](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.90.055203) (cf. p. 227).

 Quelques détails concernant la QRPA

D.1 Propriétés utiles de la fonction de réponse

En repartant de l'expression de la fonction de réponse suivante

$$S(\hat{F}, \omega_\gamma) = - \sum_i \left[\frac{|\langle i | \hat{F} | 0 \rangle|^2}{\Omega_i - \omega_\gamma} + \frac{|\langle i | \hat{F} | 0 \rangle|^2}{\Omega_i + \omega_\gamma} \right], \quad (\text{D.1})$$

il est possible d'écrire

$$S(\omega, \gamma) \sim \frac{1}{\Omega_i - \omega_\gamma} + \frac{1}{\Omega_i + \omega_\gamma} \quad (\text{D.2})$$

$$= \frac{1}{(\Omega_i - \omega) - i\gamma} + \frac{1}{(\Omega_i + \omega) + i\gamma} \quad (\text{D.3})$$

$$= \frac{2\Omega_i}{(\Omega_i^2 - \omega^2 + \gamma^2) - 2i\omega\gamma} \quad (\text{D.4})$$

$$S(\omega, \gamma) = \frac{2\Omega_i [(\Omega_i^2 - \omega^2 + \gamma^2) + 2i\omega\gamma]}{(\Omega_i^2 - \omega^2 + \gamma^2)^2 + 4\omega^2\gamma^2} \quad (\text{D.5})$$

Les parties réelles et imaginaires s'écrivent donc comme

$$\text{Re}(S(\omega, \gamma)) = \frac{2\Omega_i (\Omega_i^2 - \omega^2 + \gamma^2)}{(\Omega_i^2 - \omega^2 + \gamma^2)^2 + 4\omega^2\gamma^2} \quad (\text{D.6})$$

$$\text{Im}(S(\omega, \gamma)) = \frac{4\Omega_i\omega\gamma}{(\Omega_i^2 - \omega^2 + \gamma^2)^2 + 4\omega^2\gamma^2} \quad (\text{D.7})$$

Il est possible de déduire des formules utiles lors des intégrations sur les contours le long des réels (ou des imaginaires) permettant de réduire d'un facteur 2 le coût numérique :

$$\text{Im}(S(\omega, -\gamma)) = -\text{Im}(S(\omega, \gamma)) \quad (\text{D.8a})$$

$$\text{Im}(S(-\omega, \gamma)) = -\text{Im}(S(\omega, \gamma)) \quad (\text{D.8b})$$

$$\text{Re}(S(\omega, -\gamma)) = \text{Re}(S(\omega, \gamma)) \quad (\text{D.8c})$$

$$\text{Re}(S(-\omega, \gamma)) = \text{Re}(S(\omega, \gamma)) \quad (\text{D.8d})$$

D.2 Modes de Nambu-Goldstone

Des modes d'énergie nulles peuvent apparaître dans la résolution des équations QRPA correspondant à des modes de Goldstone liés à la brisure spontanée d'une (ou plusieurs) symétrie. Une telle brisure spontanée de symétrie apparaît, comme discuté au chapitre 1, lorsqu'une symétrie est respectée au niveau de l'Hamiltonien du système, mais pas au niveau de l'état fondamental. Dans notre cas précis, il s'agira d'une transformation qui respecte les équations TDHF(B) mais qui modifie la densité. Une telle transformation paramétrée par un opérateur hermitien P peut être facilement trouvée en supposant qu'elle agit sur un opérateur O comme

$$O \rightarrow \tilde{O} = e^{i\alpha P} O e^{-i\alpha^* P^\dagger} = e^{i\alpha P} O e^{-i\alpha P} \quad (\text{D.9})$$

avec α la magnitude de la transformation, supposée réelle. On peut alors écrire¹

$$\begin{aligned} i\tilde{\rho} &= e^{i\alpha P} [h, \rho] e^{-i\alpha P} \\ &= e^{i\alpha P} h e^{-i\alpha P} e^{i\alpha P} \rho e^{-i\alpha P} - e^{i\alpha P} \rho e^{-i\alpha P} e^{i\alpha P} h e^{-i\alpha P} \\ i\tilde{\rho} &= [\tilde{h}, \tilde{\rho}] = [h, \tilde{\rho}] \end{aligned} \quad (\text{D.10})$$

où on a utilisé le fait que P et h commute pour écrire $\tilde{h} = h$. Il est ensuite possible de calculer de la même façon la dérivée de $\tilde{\rho}$ qui se simplifie très vite si α et P ne dépendent pas du temps :

$$\begin{aligned} \dot{\tilde{\rho}} &= \frac{d}{dt} \left(e^{i\alpha P} \rho e^{-i\alpha^* P^\dagger} \right) \\ &= e^{i\alpha P} \frac{d\rho}{dt} e^{-i\alpha^* P^\dagger} \\ \dot{\tilde{\rho}} &= \tilde{\dot{\rho}} \end{aligned} \quad (\text{D.11})$$

On en conclut que $\tilde{\rho}$ est toujours solution des équations HF puisque

$$i\dot{\tilde{\rho}} = [h, \tilde{\rho}] \quad (\text{D.12})$$

Ainsi, pour tout opérateur P hermitien indépendant du temps et dont la magnitude α est réelle et aussi indépendante du temps, il existe une infinité d'états $\tilde{\rho}$ de même énergie que ρ solution des équations TDHF (et donc RPA).

1. Par simplicité, le calcul est fait pour les équations TDHF, la généralisation aux équations TDHFB est directe.

Il devient donc nécessaire de prêter une attention particulière à ces modes qui décrivent des états physiques équivalents de mêmes énergies. En particulier, les excitations de ces modes sont d'énergie nulle. Afin d'identifier ces modes, il est possible de définir un opérateur différence comme

$$\delta\tilde{\rho}_P = \tilde{\rho}_P - \rho \sim i\alpha [P, \rho] \quad (\text{D.13})$$

où l'on a effectué un développement au premier ordre en α . Il est aussi nécessaire de prendre en compte l'opérateur conjugué à P que l'on notera R dans la suite. Afin d'obtenir des quantités indépendantes de α , il est commode de définir

$$\delta\rho_P = \frac{1}{\alpha}\delta\tilde{\rho}_P = i [P, \rho] \quad (\text{D.14a})$$

$$\delta\rho_R = \frac{1}{\alpha}\delta\tilde{\rho}_R = i [R, \rho] \quad (\text{D.14b})$$

Il est important de remarquer ici qu'il est impossible de normaliser ces termes indépendamment des autres quantités physiques[NIY07]. En effet, étant donné que P et R sont hermitiens, ces modes sont orthogonaux aux autres modes d'énergie non nulle (comme tous les modes de Goldstone de façon générale). Ainsi, pour les identifier, on suppose que ces modes contribuent linéairement à la densité², i.e.

$$\delta\rho_{\text{cal}} = \delta\rho_{\text{phy}} + \delta\rho_{\text{sp}} \quad (\text{D.15})$$

Dans le cas générique où plusieurs opérateurs sont à considérer, on écrit

$$\delta\rho_{\text{cal}} = \delta\rho_{\text{phy}} + \sum_P \lambda_P \delta\rho_P + \sum_R \lambda_R \delta\rho_R \quad (\text{D.16})$$

Il est alors possible de calculer explicitement les valeurs des $\lambda_{P,R}$ en utilisant la relation d'orthogonalité avec les modes physiques comme

$$\begin{aligned} \langle [\delta\rho_{\text{phy}}, \delta\rho_P] \rangle &= 0 \\ &= \left\langle \left[\delta\rho_{\text{cal}} - \sum_R \lambda_R \delta\rho_R, \delta\rho_P \right] \right\rangle \\ &= \langle [\delta\rho_{\text{cal}}, \delta\rho_P] \rangle - \sum_R \lambda_R \langle [\delta\rho_R, \delta\rho_P] \rangle \end{aligned} \quad (\text{D.17})$$

Une relation identique est obtenue pour P en prenant $R \leftrightarrow P$. On en déduit

$$\lambda_P = \frac{\langle [\delta\rho_{\text{cal}}, \delta\rho_R] \rangle}{\langle [\delta\rho_P, \delta\rho_R] \rangle} \quad (\text{D.18a})$$

$$\lambda_R = \frac{\langle [\delta\rho_{\text{cal}}, \delta\rho_P] \rangle}{\langle [\delta\rho_R, \delta\rho_P] \rangle} \quad (\text{D.18b})$$

$$(\text{D.18c})$$

2. Cette hypothèse nous amenant à négliger le couplage entre les modes physiques et spurieux est justifiée par la faible valeur des fluctuations densité, ce qui fait des termes croisés des termes d'ordres supérieurs.

En réinjectant Eqs.(D.14), il est possible d'en déduire la valeur de $\delta\rho_{\text{sp}}$ en fonction des opérateurs R et P :

$$\delta\rho_{\text{sp}}^P = \frac{\langle[\delta\rho_{\text{cal}}, [R, D]]\rangle}{\langle[[P, D], [R, D]]\rangle} i [P, \rho] \quad (\text{D.19a})$$

$$\delta\rho_{\text{sp}}^R = \frac{\langle[\delta\rho_{\text{cal}}, [P, D]]\rangle}{\langle[[R, D], [P, D]]\rangle} i [R, \rho] \quad (\text{D.19b})$$

Ces modes sont donc soustraits lors du calcul des densités perturbées.

D.3 Représentation PQ

Originellement introduite par [Hin15] pour étudier les propriétés des modes NG, la représentation PQ des équations QRPA propose de construire les opérateurs conjugués position \hat{Q} et moment \hat{P} en fonction des opérateurs de phonon \hat{O} et \hat{O}^\dagger . Ces derniers s'écrivent en fonction des opérateurs de créations et annihilations $A_{\mu\nu}^\dagger = \hat{a}_\mu^\dagger \hat{a}_\nu^\dagger$ et des amplitudes X et Y comme (pour un mode i quelconque)

$$\hat{O}_i^\dagger = \sum_{\mu < \nu} X_{\mu\nu}^i \hat{A}_{\mu\nu}^\dagger - Y_{\mu\nu}^i \hat{A}_{\mu\nu} \quad (\text{D.20})$$

Il est alors possible d'écrire

$$\hat{Q}_i = \sqrt{\frac{1}{2M_i\Omega_i}} (\hat{O}_i + \hat{O}_i^\dagger) \quad (\text{D.21a})$$

$$\hat{P}_i = -i\sqrt{\frac{M_i\Omega_i}{2}} (\hat{O}_i - \hat{O}_i^\dagger) \quad (\text{D.21b})$$

où M_i représente l'inertie d'un mode i . Il est alors possible d'écrire les éléments des amplitudes QRPA dans la base des qp comme

$$X_{\mu\nu}(\omega) = \sum_i \frac{1}{\omega^2 - \Omega_i^2} \left\{ (-i\omega P_{\mu\nu}^i + \Omega_i^2 Q_{\mu\nu}^i) q_i(\hat{F}) + (P_{\mu\nu}^i + i\omega Q_{\mu\nu}^i) p_i(\hat{F}) \right\} \quad (\text{D.22a})$$

$$Y_{\mu\nu}(\omega) = \sum_i \frac{1}{\omega^2 - \Omega_i^2} \left\{ (i\omega P_{\mu\nu}^{i*} - \Omega_i^2 Q_{\mu\nu}^{i*}) q_i(\hat{F}) + (-P_{\mu\nu}^{i*} - i\omega Q_{\mu\nu}^{i*}) p_i(\hat{F}) \right\} \quad (\text{D.22b})$$

avec

$$p_i(\hat{F}) = \langle 0 | [\hat{P}_i, \hat{F}] | 0 \rangle = \sum_{\mu < \nu} (P_{\mu\nu}^{i*} F_{\mu\nu}^{20} - P_{\mu\nu}^i F_{\mu\nu}^{02}) \quad (\text{D.23a})$$

$$q_i(\hat{F}) = \langle 0 | [\hat{Q}_i, \hat{F}] | 0 \rangle = \sum_{\mu < \nu} (Q_{\mu\nu}^{i*} F_{\mu\nu}^{20} - Q_{\mu\nu}^i F_{\mu\nu}^{02}) \quad (\text{D.23b})$$

Sous cette forme, la fonction de réponse se réécrit simplement en fonction des p_i et q_i comme

$$S(\hat{F}, \omega) = \sum_i \frac{1}{\omega^2 - \Omega_i^2} [|p_i|^2 + |q_i|^2 + i\omega (q_i^* p_i - q_i p_i^*)] \quad (\text{D.24})$$

Les p_i et q_i peuvent ensuite être obtenus en intégrant la fonction de réponse dans le plan complexe. Il est possible de simplifier le problème en remarquant que les X et Y sont réels dans le cas d'une matrice QRPA réelle. En écrivant

$$\hat{Q}_i = \sqrt{\frac{1}{2M_i\Omega_i}} (X_{\mu\nu}^i - Y_{\mu\nu}^i) \quad (\text{D.25a})$$

$$\hat{P}_i = i\sqrt{\frac{M_i\Omega_i}{2}} (X_{\mu\nu}^i + Y_{\mu\nu}^i) \quad (\text{D.25b})$$

il vient alors que P est imaginaire alors que Q est réel. Cependant, étant donné que dans notre cas $F^{02} = F^{20*} = F^{20}$, et en regardant la forme des équations Eqs.(D.23a,D.23b), on en conclut que $p_i = -p_i^*$ et $q_i = q_i^* = 0$. Ainsi, la fonction de réponse ne dépend que de $|p_i|$. La formule de Cauchy nous donne alors

$$\left| p_i(\hat{F}) \right|^2 = p_i(\hat{F})^2 = \frac{2}{2\pi i} \oint_{C_i} \omega S(\omega, \hat{F}) d\omega \quad (\text{D.26})$$

La procédure décrite dans le chapitre 5 permet alors de calculer les p_i ainsi que les masses inertielles (cd. Chap.6).

Références

- [Hin15] Nobuo HINOHARA. « Collective inertia of the Nambu-Goldstone mode from linear response theory ». In : *Physical Review C* 92.3 (21 sept. 2015), p. 034321. DOI : [10.1103/PhysRevC.92.034321](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.92.034321) (cf. p. 236).
- [NIY07] Takashi NAKATSUKASA, Tsunenori INAKURA et Kazuhiro YABANA. « Finite amplitude method for the solution of the random-phase approximation ». In : *Physical Review C* 76.2 (27 août 2007), p. 024318. DOI : [10.1103/PhysRevC.76.024318](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.76.024318) (cf. p. 235).

Éléments de matrice pour le calcul des masses inertielles

On se propose de donner les éléments de matrice nécessaires au calcul des masses effectives dans l'approximation ATDHF_B crankée perturbatif. On rappelle ici que, sous ces approximations, le moment d'inertie est donné par

$$B_{\mu\nu}(q_{20}, q_{30}, q_{40}) = \hbar^2 \left[\mathcal{M}_{(1)}^{-1} \mathcal{M}_{(3)} \mathcal{M}_{(1)}^{-1} \right]_{\mu\nu} \quad (\text{E.1})$$

avec, dans la base canonique,

$$\mathcal{M}_{(n),\mu\nu} = \sum_{i,j} \frac{\langle i | Q_{\mu\nu} | j \rangle \langle j | Q_{\mu\nu} | i \rangle}{(E_i + E_j)^n} (u_i v_j + v_i u_i)^2 \quad (\text{E.2})$$

Les éléments de matrice $\langle i | Q_{\mu\nu} | j \rangle$ doivent donc être calculés. Ici en particulier, seuls les éléments $\mu = 2, 3, 4$ et $\nu = 0$ sont nécessaires.

E.1 Méthode de calcul

Dans ce qui suit, l'intégrale angulaire sur φ n'est jamais écrite explicitement et impose toujours l'égalité des nombres quantiques angulaires $m_{l_i} = m_{l_j} = m_l$. Pour des détails sur les différentes notations, voir la section B.

Les différents éléments de matrice prennent la forme suivante

$$\langle n | r^{2i} | m \rangle \propto \int \eta^i \eta^{m_l} L_{n_r}^{m_l}(\eta) L_{m_r}^{m_l}(\eta) e^{-\eta} d\eta \quad (\text{E.3})$$

et

$$\langle n | z^i | m \rangle \propto \int z^i H_{n_z}(\zeta) H_{m_z}(\zeta) e^{-\zeta^2} d\zeta \quad (\text{E.4})$$

Afin de calculer les différents éléments de matrice, il est commode d'utiliser les relations d'orthogonalité des polynômes de Laguerre et Hermite ainsi que leurs relations de récurrence respectives.

En particulier, pour la partie radiale, la relation d'orthogonalité donne

$$\mathcal{N}_{n_r}^{m_l} \mathcal{N}_{m_r}^{m_l} \int \eta^{m_l} L_{n_r}^{m_l}(\eta) L_{m_r}^{m_l}(\eta) e^{-\eta} d\eta = \delta_{n_r, m_r} \quad (\text{E.5})$$

La relation de récurrence prend la forme

$$L_{n_r}^{m_l}(\eta) = \left(2 + \frac{m_l - 1 - \eta}{n_r}\right) L_{n_r-1}^{m_l}(\eta) - \left(1 + \frac{m_l - 1}{n_r}\right) L_{n_r-2}^{m_l}(\eta) \quad (\text{E.6})$$

En insérant Eq.(E.6) dans Eq.(E.5) il est possible de calculer une intégrale de la forme $\int \eta \times \eta^{m_l} L_{n_r}^{m_l} L_{m_r}^{m_l} e^{-\eta} d\eta$ qui correspond à l'élément de matrice $\langle n | r_{\perp}^2 | m \rangle$. En répétant cette étape, il est possible de calculer les $\langle n | r_{\perp}^i | m \rangle$.

Pour la partie axiale, on utilise la relation d'orthogonalité

$$\mathcal{N}_{n_z} \mathcal{N}_{m_z} \int H_{n_z}(\zeta) H_{m_z}(\zeta) e^{-\zeta^2} d\zeta = \delta_{n_z, m_z} \quad (\text{E.7})$$

et la relation de récurrence suivante

$$H_{n_z}(z) = 2zH_{n_z-1}(z) - 2(n_z - 1)H_{n_z-2}(z) \quad (\text{E.8})$$

En insérant Eq.(E.8) dans Eq.(E.7) il est possible de calculer une intégrale de la forme $\int \zeta H_{n_z} H_{m_z} e^{-\zeta^2} d\zeta$ qui correspond à l'élément de matrice $\langle n | z | m \rangle$. En répétant cette étape, il est possible de calculer les $\langle n | z^i | m \rangle$.

E.2 Moment quadrupolaire

Le moment quadrupolaire est défini comme

$$\langle \hat{Q}_{20} \rangle = 2z^2 - r_{\perp}^2 \quad (\text{E.9})$$

Il est donc nécessaire de calculer les éléments de matrice suivants

- $\langle n | r_{\perp}^2 | m \rangle$
- $\langle n | z^2 | m \rangle$

En utilisant les propriétés d'orthogonalité des polynômes de Laguerre on obtient

$$\frac{1}{(b_0 b_r)^2} \langle n | r_{\perp}^2 | m \rangle = \delta_{n_z, m_z} \delta_{n_l, m_l} \begin{cases} -\frac{(m_r + m_l)!}{(m_r - 1)!} & \delta_{m_r, n_r + 1} \\ [2m_r + 1 + m_l] \frac{(m_r + m_l)!}{m_r!} & \delta_{m_r, n_r} \\ - (m_r + 1 + m_l) \frac{(m_r + m_l)!}{m_r!} & \delta_{m_r, n_r - 1} \end{cases} \quad (\text{E.10})$$

En faisant de même avec les polynômes d'Hermite il vient

$$\frac{1}{(b_0 b_z)^2} \langle n | z^2 | m \rangle = \delta_{n_r, m_r} \delta_{n_l, m_l} \begin{cases} \frac{1}{2} \sqrt{m_z (m_z - 1)} & \delta_{m_z, n_z + 2} \\ \frac{1}{2} (2m_z + 1) & \delta_{m_z, n_z} \\ \frac{1}{2} \sqrt{(m_z + 1) (m_z + 2)} & \delta_{m_z, n_z - 2} \end{cases} \quad (\text{E.11})$$

E.3 Moment octupolaire

Le moment octupolaire s'écrit

$$\langle \hat{Q}_{30} \rangle = 2z^3 - 3zr_{\perp}^2 \quad (\text{E.12})$$

En utilisant le fait que les intégrales sont séparables,

$$\langle n | zr_{\perp}^2 | m \rangle = \langle n | z | m \rangle \langle n | r_{\perp}^2 | m \rangle \quad (\text{E.13})$$

Trois éléments de matrice sont donc nécessaires ici (dont un a déjà été calculé juste avant)

- $\langle n | z^3 | m \rangle$
- $\langle n | z | m \rangle$
- $\langle n | r_{\perp}^2 | m \rangle$

On obtient les éléments suivants

$$\frac{1}{b_0 b_z} \langle n | z | m \rangle = \delta_{n_r, m_r} \delta_{n_l, m_l} \begin{cases} \frac{\sqrt{m_z}}{\sqrt{2}} & \delta_{m_z, n_z+1} \\ \frac{\sqrt{m_z+1}}{\sqrt{2}} & \delta_{m_z, n_z-1} \end{cases} \quad (\text{E.14})$$

et

$$\frac{1}{(b_0 b_z)^3} \langle n | z^3 | m \rangle = \delta_{n_r, m_r} \delta_{n_l, m_l} \begin{cases} \frac{\sqrt{(n_z+1)(n_z+2)(n_z+3)}}{2\sqrt{2}} & \delta_{n_z, m_z-3} \\ \frac{3(n_z+1)\sqrt{n_z+1}}{2\sqrt{2}} & \delta_{n_z, m_z-1} \\ \frac{3n\sqrt{n_z}}{2\sqrt{2}} & \delta_{n_z, m_z+1} \\ \frac{\sqrt{(n_z-2)(n_z-1)n_z}}{2\sqrt{2}} & \delta_{n_z, m_z+3} \end{cases} \quad (\text{E.15})$$

E.4 Moment hexadecapolaire

Le moment hexadecapolaire s'écrit

$$\langle \hat{Q}_{40} \rangle = 8z^4 - 24z^2 r_{\perp}^2 + 3r_{\perp}^4 \quad (\text{E.16})$$

On obtient alors

$$\frac{1}{(b_0 b_z)^4} \langle n | z^4 | m \rangle = \delta_{n_r, m_r} \delta_{n_l, m_l} \begin{cases} \frac{\sqrt{(n_z+1)(n_z+2)(n_z+3)(n_z+4)}}{8\sqrt{2}} & \delta_{n_z, m_z-4} \\ \frac{(2n_z+3)\sqrt{(n_z+1)(n_z+2)}}{2} & \delta_{n_z, m_z-2} \\ \frac{3(2n_z^2+2n_z+1)}{4} & \delta_{n_z, m_z} \\ \frac{(2n_z-1)\sqrt{(n_z-1)n}}{2} & \delta_{n_z, m_z+2} \\ \frac{\sqrt{(n_z-3)(n_z-2)(n_z-1)n_z}}{8\sqrt{2}} & \delta_{n_z, m_z+4} \end{cases} \quad (\text{E.17})$$

L'élément en r_{\perp}^4 est plus compliqué à écrire. On pose la notation suivante $\langle n | r_{\perp}^2 | m \rangle = G(n, m, m_l)$ qui nous permet finalement d'écrire

$$\frac{1}{(b_0 b_r)^4} \langle n | r_{\perp}^4 | m \rangle = (2n + 1 + m_l) G(n, m, m_l) - \sqrt{n(n+m_l)} G(n-1, m, m_l) \quad (\text{E.18})$$

$$- \sqrt{(n+1)(n+m_l+1)} G(n+1, m, m_l) \quad (\text{E.19})$$

Titre : Description globale de la radioactivité nucléaire et des états clusters dans le cadre des approches relativistes de l'énergie fonctionnelle de la densité.

Mots clés : structure nucléaire, radioactivité, cluster, problème à N-corps quantique, théorie effective des champs, physique théorique

Résumé : Les systèmes nucléaires exhibent de nombreuses propriétés individuelles et collectives héritées de deux caractéristiques principales : les noyaux sont des systèmes auto-liés par l'interaction nucléaire forte et ils sont composés d'un nombre important de particules. La première de ces spécificités empêche la dérivation simple d'un potentiel nucléon-nucléon. La seconde fait des systèmes nucléaires des problèmes à N-corps quantiques, problème intrinsèquement complexe à résoudre.

De cette complexité émerge aussi toute la richesse des systèmes nucléaires. La distribution des nucléons au sein du noyau en est un parfait exemple. D'une structure parfaitement homogène décrite par un liquide de Fermi à la présence d'inhomogénéités importantes appelées clusters, les nucléons s'arrangent dans le noyau de façon complexe. Ces différentes propriétés peuvent être étudiées à l'aide du formalisme de l'énergie fonctionnelle de la densité covariant (cEDF) au niveau champ moyen (RMF) ou bien en incluant les corrélations particule-particule (RHB). Cette approche permet d'obtenir une description satisfaisante des propriétés générales du noyau (énergie, rayon, spectre, ...), et en particulier de rendre compte de l'apparition de structures en clusters au sein du noyau.

Les EDF sont construites à partir de Lagrangiens phénoménologiques dont les différents paramètres doivent être ajustés pour reproduire les résultats expérimentaux. Cet ajustement peut s'avérer particulièrement complexe et coûteux numériquement si l'on souhaite obtenir une interaction capable de décrire l'entière de la carte des noyaux avec une bonne précision. Une méthode combinant approche Monte-Carlo et minimisation simplex est présentée ici afin d'ajuster différentes fonctionnelles relativistes. Ces nouvelles fonctionnelles sont ensuite testées sur environ 1000 noyaux

dont l'énergie, le rayon, les gaps, la déformation et d'autres propriétés sont confrontées aux données expérimentales disponibles.

L'approximation du champ moyen permet de reproduire un grand nombre de propriétés avec un bon accord théorie-expérience dans un cadre aujourd'hui peu coûteux numériquement. Cependant, cette approximation néglige un grand nombre de corrélations dont la prise en compte peut s'avérer nécessaire pour obtenir une description de certains phénomènes. Plusieurs méthodes existent pour aller au-delà du champ moyen statique et nous nous intéressons particulièrement ici au formalisme QRPA (quasiparticle random phase approximation) dont une reformulation récente, la QFAM (quasiparticle finite amplitude method), permet des calculs à grande échelle. Les fonctions de réponses calculées dans ce formalisme montrent que l'étude des structures en clusters mentionnées précédemment s'avère particulièrement importante dans la compréhension des excitations de basse énergie dans les systèmes nucléaires. D'autres mécanismes d'apparition de résonances sont étudiés comme l'excès de neutrons ou l'appariement.

Ces structures en clusters possèdent aussi une grande importance dans la description du phénomène de radioactivité. En effet, une compréhension profonde de la préformation et de l'émission de ces clusters permet d'approcher le phénomène de radioactivité d'un point de vue microscopique. En particulier, le phénomène d'émission spontanée de particules α ne disposait pas, jusqu'à présent, d'une description entièrement microscopique en termes de nucléons seulement. La puissance du formalisme utilisé ici a de plus permis d'identifier un nouveau mode de désintégration théorique où deux particules α sont simultanément émises dos à dos.