

N° d'ordre : 10/2010-M/PH...

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET PEBULAIRES
MINISTÈRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEUR ET DE LA
RECHERCHE SCIENTIFIQUE
UNIVERSITÉ DES SCIENCES ET DE LA TECHNOLOGIE
HOUARI BOUMEDIENNE
FACULTÉ DE PHYSIQUE



Présenté pour l'obtention du Diplôme de MAGISTEREN : PHYSIQUE
Spécialité : Physique Théorique des Basses et Moyennes Energies
Par
TAIBECHE Mohamed

SUJET

CONTRIBUTION A L.ETUDE DE LA COEXISTENCE DE FORMES
DANS LES NOYAUX LOURDS RICHES EN NEUTRONS
PAR LA THEORIE DE HARTREE-FOCK

Soutenu publiquement, le 25 /11/2010, devant le jury composé de :

Mr. M. FELLAH	Professeur	à l'U.S.T.H.B.	Président.
Mr. M. R. OUDIH	Maître de Conférences	à l'U.S.T.H.B.	Directeur de thèse.
Mr. M. DJEBARA	Professeur	à l'U.S.T.H.B.	Examineur.
Mr. A. KELLOU	Maître de Conférences	à l'U.S.T.H.B.	Examineur.
Melle. N. BENHAMOUDA	Maître de Conférences	à l'U.S.T.H.B.	Examinatrice.

Table des matières

Introduction	2
1 Interaction nucléon-nucléon	4
1.1 Interaction nucléon-nucléon libre	4
1.1.1 Propriétés de l'interaction à deux corps	6
1.1.2 Construction de l'interaction nucléon-nucléon	10
1.2 Interaction effective	14
2 Théorie de Hartree-Fock	16
2.1 Déterminant de Slater	17
2.2 Principe variationnel - Equations de Hartree-Fock	17
2.3 Equations de Hartree-Fock en fonction de la matrice densité	25
2.4 Energie Hartree-Fock	29
3 Interaction de Skyrme	31
3.1 Formulation de l'interaction de Skyrme	31
3.2 Fonctionnelle de Skyrme	32
3.3 Fonctionnelle d'énergie	49
3.4 Paramétrisation de l'interaction de Skyrme	52
4 Coexistence de formes et déformation nucléaire	54
4.1 Forme nucléaire	54
4.2 Coexistence de formes	57
4.3 Etude de quelques noyaux autour de $A=180$	57
4.3.1 Forme d'équilibre	58
4.3.2 Propriété de l'état fondamental	67

Conclusion	70
Annexes	72
A Décomposition des fonctions d'onde individuelles	72
B Eléments de matrice de h	75

Table des figures

4-1	Energie totale en fonction du paramètre de déformation β pour les isotopes de $^{176-186}\text{Dy}$	59
4-2	Energie totale en fonction du paramètre de déformation β pour les isotopes de $^{178-188}\text{Er}$	60
4-3	Energie totale en fonction du paramètre de déformation β pour les isotopes de $^{180-190}\text{Yb}$	61
4-4	Energie totale en fonction du paramètre de déformation β pour les isotopes de $^{182-192}\text{Hf}$	62
4-5	Energie totale en fonction du paramètre de déformation β pour les isotopes de $^{184-194}\text{W}$	63
4-6	Energie totale en fonction du paramètre de déformation β pour les isotopes de $^{186-196}\text{Os}$	64
4-7	Evolution du moment quadrupolaire de charge des noyaux $^{176-188}_{66}\text{Dy}$, $^{178-190}_{68}\text{Er}$, $^{180-192}_{70}\text{Yb}$, $^{182-194}_{72}\text{Hf}$, $^{184-196}_{74}\text{W}$ et $^{186-200}_{76}\text{Os}$ en fonction du nombre de neutrons en comparaison aux quelques résultats expérimentaux disponibles [38]	68
4-8	Evolution du rayon quadratique moyen du système neutron, proton et de charge des noyaux $^{176-188}_{66}\text{Dy}$, $^{178-190}_{68}\text{Er}$, $^{180-192}_{70}\text{Yb}$, $^{182-194}_{72}\text{Hf}$, $^{184-196}_{74}\text{W}$ et $^{186-200}_{76}\text{Os}$ en fonction du nombre de neutrons.	69

Liste des tableaux

3.1	Paramètres de l'interaction de Skyrme les plus utilisés dans littérature . .	53
4.1	Energies des isotopes de Dy correspondant aux minima oblate et prolate et leur différence $E_{obl}-E_{prol}$	65
4.2	Energies des isotopes d'Er correspondant aux minima oblate et prolate et leur différence $E_{obl}-E_{prol}$	65
4.3	Energies des isotopes d'Yb correspondant aux minima oblate et prolate et leur différence $E_{obl}-E_{prol}$	66
4.4	Energies des isotopes d'Hf correspondant aux minima oblate et prolate et leur différence $E_{obl}-E_{prol}$	66
4.5	Energies des isotopes de W correspondant aux minima oblate et prolate et leur différence $E_{obl}-E_{prol}$	66
4.6	Energies des isotopes d'Os correspondant aux minima oblate et prolate et leur différence $E_{obl}-E_{prol}$	66

Introduction

L'un des grands défis de la physique nucléaire théorique depuis plus de 50 ans est d'expliquer la structure des noyaux et les phénomènes qui les font intervenir en terme de leurs constituants de base – les nucléons – et de leurs interactions mutuelles.

Le noyau est composé d'un nombre N de neutrons et Z de protons qui s'organisent dans le potentiel qu'ils créent [1]. Les propriétés collectives des nucléons telles que leurs répartitions dans l'espace et les caractéristiques des spectres de rotation et de vibration qui en découlent, ainsi que leurs propriétés individuelles sont des caractéristiques de la force nucléaire liant les nucléons dans le noyau. La forme ou plus communément la déformation du noyau est une observable fondamentale qui permet de mieux comprendre l'interaction nucléaire. La configuration qu'elle choisit pour minimiser l'énergie potentielle du système de $A = Z + N$ nucléons n'est pas nécessairement la sphère. En effet, pour un nombre de protons ou de neutrons proche des nombres magiques, le noyau est généralement sphérique [2] mais si on s'éloigne de ces nombres, la position d'équilibre du noyau peut tendre vers une déformation allongée (prolate) ou vers une déformation aplatie¹ (oblate) ou plus complexe comme une poire ou un tétraèdre [3]. Les nombres magiques étant moins d'une dizaine, la majorité des noyaux se déforme pour se stabiliser. Ce comportement résulte des propriétés microscopiques liées à la structure en couches des protons et des neutrons [2]. Dans certains noyaux une faible réorganisation des protons ou des neutrons suffit pour changer sa forme. Un même noyau est alors susceptible de prendre certaines formes associées à des états d'énergie différente. Lorsque ces états sont très proches en énergie (l'écart d'énergie est de l'ordre du millièème de l'énergie de liaison du noyau) [4], ils se mélangent. Dans ce cas, le noyau peut se trouver, à la fois, dans un état allongé et aplati. Ce phénomène est appelé la coexistence de formes.

L'objet du présent travail est l'étude de la coexistence de formes dans quelques noyaux de la région des terres rares en se basant sur une théorie microscopique du type Hartree-

¹Les deux formes oblate et prolate sont les plus couramment rencontrées.

Fock et une interaction effective de Skyrme [5].

Ce mémoire est organisé comme suit : après cette introduction, l'interaction nucléon-nucléon et ses symétries seront introduites dans un premier chapitre. Il sera montré en particulier que la notion de symétrie qui revet habituellement un caractère descriptif devient constructive du fait de la difficulté à appréhender l'interaction nucléon-nucléon.

Sur la base des différentes symétries une interaction nucléon-nucléon effective sera présentée dans le deuxième chapitre. Il s'agit notamment de l'interaction de Skyrme, qui est une interaction effective phénoménologique de portée nulle qui permet de modéliser de façon simple les interactions entre les nucléons dans le noyau. La forme analytique de cette interaction a été proposée par Skyrme dès 1956 [6] mais a été utilisée extensivement en physique nucléaire seulement depuis les travaux de Brink et Vautherin [7].

La complexité du système nucléaire fait que l'approche utilisée pour son étude dépend autant de notre capacité à résoudre le problème que du type de propriétés que l'on cherche à étudier. Dans le présent travail, nous avons considéré la théorie de Hartree-fock. Cette théorie est une approche variationnelle basée sur l'approximation du champ moyen qui consiste à considérer le noyau comme un ensemble de fermions indépendants en mouvement dans un potentiel moyen à un corps créé par eux-mêmes [8]. Le champ moyen est déduit de façon self-consistante à partir d'une interaction effective (interaction de Skyrme dans le présent travail) [9]. La fonction d'onde de l'état fondamental d'un noyau composé de A nucléons a la forme d'un déterminant de Slater qui s'écrit comme le produit antisymétrisé de A fonctions d'onde individuelles. Ceci fera l'objet du troisième chapitre.

Dans le dernier chapitre, la coexistence de formes sera étudiée dans le cas d'une série d'isotopes pair-pairs de la région des terres rares.

Les conclusions tirées de ce travail seront enfin présentées.

Chapitre 1

Interaction nucléon-nucléon

Pour comprendre la portion de matière nucléaire à basse énergie que constitue le noyau, il faut saisir ce qui assure la cohésion de ses constituants et donc déterminer l'interaction entre nucléons au sein du noyau. La détermination de cette interaction est parmi les problèmes les plus anciens et les plus importants de la physique nucléaire théorique [10]. Depuis plus de 70 ans, de très nombreux théoriciens cherchent à élaborer l'interaction nucléon-nucléon la plus réaliste possible.

1.1 Interaction nucléon-nucléon libre

Généralement, une interaction à deux corps s'écrit dans le formalisme de la seconde quantification :

$$v = \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \langle ij | v | kl \rangle a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k \quad (1.1)$$

où $\langle ij | v | kl \rangle$ est un élément de matrice antisymétrisé et hermitique dans la représentation position-spin-isospin :

$$v = \frac{1}{4} \sum_{\substack{\sigma_1 \tau_1 \\ \sigma_2 \tau_2}} \sum_{\substack{\sigma'_1 \tau'_1 \\ \sigma'_2 \tau'_2}} \int d\vec{r}'_1 \int d\vec{r}'_2 \int d\vec{r}_1 \int d\vec{r}_2 \\ \left\langle \vec{r}'_1 \sigma'_1 \tau'_1, \vec{r}'_2 \sigma'_2 \tau'_2 \left| v \right| \vec{r}_1 \sigma_1 \tau_1, \vec{r}_2 \sigma_2 \tau_2 \right\rangle a_{\vec{r}'_1 \sigma'_1 \tau'_1}^\dagger a_{\vec{r}'_2 \sigma'_2 \tau'_2}^\dagger a_{\vec{r}_1 \sigma_1 \tau_1} a_{\vec{r}_2 \sigma_2 \tau_2} \quad (1.2)$$

avec

$$a_i = \sum_{\sigma\tau} \int d\vec{r} \varphi_i^* (\vec{r}\sigma\tau) a_{\vec{r}\sigma\tau}$$

$$a_{\vec{r}\sigma\tau} = \sum_i \varphi_i (\vec{r}\sigma\tau) a_i$$

L'opérateur v peut être développé en termes des matrices de Pauli dans l'espace du spin et de l'isospin [1] :

$$v = \sum_{ijkl} v_{ijkl} \sigma_i^{(1)} \sigma_j^{(2)} \tau_k^{(1)} \tau_l^{(2)} \quad (1.3)$$

où v_{ijkl} est, en général, un opérateur intégral dans la représentation position :

$$v_{ijkl} |\vec{r}_1 \vec{r}_2\rangle = \int d\vec{r}'_1 \int d\vec{r}'_2 \langle \vec{r}'_1 \vec{r}'_2 | v_{ijkl} |\vec{r}_1 \vec{r}_2\rangle | \vec{r}'_1 \vec{r}'_2 \rangle \quad (1.4)$$

Dans le cas particulier où $\langle \vec{r}'_1 \vec{r}'_2 | v_{ijkl} |\vec{r}_1 \vec{r}_2\rangle$ est de la forme :

$$\langle \vec{r}'_1 \vec{r}'_2 | v_{ijkl} |\vec{r}_1 \vec{r}_2\rangle = \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}'_1) \delta(\vec{r}_2 - \vec{r}'_2) v(\vec{r}_1, \vec{r}_2), \quad \forall i, j, k, l$$

alors v est dit potentiel local. Dans ce cas, l'interaction entre deux particules dépend uniquement des positions \vec{r}_1, \vec{r}_2 . Si, de plus, elle est de la forme :

$$v(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = v_0 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$$

alors l'interaction est dite de contact (de portée nulle). Dans le cas où $v(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ est non nulle uniquement pour les petites valeurs de $|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$ alors l'interaction est dite de courte portée (dans ce sens l'interaction effective de Skyrme est de portée nulle et non locale tandis que l'interaction de Gogny [11] est de courte portée et est exactement locale).

Dans le cas général d'un potentiel non local, on utilise le développement suivant [1] :

$$\begin{aligned} | \vec{r}'_1 \vec{r}'_2 \rangle &= | \vec{r}_1 \vec{r}_2 \rangle + (\vec{r}'_1 - \vec{r}_1) \frac{\partial}{\partial \vec{r}_1} | \vec{r}_1 \vec{r}_2 \rangle + (\vec{r}'_2 - \vec{r}_2) \frac{\partial}{\partial \vec{r}_2} | \vec{r}_1 \vec{r}_2 \rangle + \dots \\ &=: \exp \left\{ (\vec{r}'_1 - \vec{r}_1) \frac{\partial}{\partial \vec{r}_1} + (\vec{r}'_2 - \vec{r}_2) \frac{\partial}{\partial \vec{r}_2} \right\} : | \vec{r}_1 \vec{r}_2 \rangle \end{aligned} \quad (1.5)$$

où $:$ désigne le produit normal, c-à-d : les dérivées $\frac{\partial}{\partial \vec{r}_i}$ ne doivent pas agir sur les coordonnées \vec{r}_i dans le développement de l'exponentielle. La substitution de (1.5) dans

(1.4) conduit à l'équation :

$$\begin{aligned} v_{ijkl} |\vec{r}_1 \vec{r}_2\rangle &= \int d\vec{r}'_1 \int d\vec{r}'_2 \langle \vec{r}'_1 \vec{r}'_2 | v_{ijkl} |\vec{r}_1 \vec{r}_2\rangle \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} (\vec{r}'_1 - \vec{r}_1) \vec{p}_1 + \frac{i}{\hbar} (\vec{r}'_2 - \vec{r}_2) \vec{p}_2 \right\} |\vec{r}'_1 \vec{r}'_2\rangle \\ &= v_{ijkl} (\vec{r}_1 \vec{p}_1 \vec{r}_2 \vec{p}_2) |\vec{r}_1 \vec{r}_2\rangle \end{aligned}$$

Ce qui signifie que le potentiel le plus général peut être représenté par la formule (1.3) où les v_{ijkl} sont des opérateurs qui s'écrivent dans la représentation position sous la forme :

$$v |\vec{r}_1 \sigma_1 \tau_1, \vec{r}_2 \sigma_2 \tau_2\rangle = v_{ijkl} (\vec{r}_1 \vec{p}_1 \vec{\sigma}_1 \vec{\tau}_1 \vec{r}_2 \vec{p}_2 \vec{\sigma}_2 \vec{\tau}_2) |\vec{r}_1 \sigma_1 \tau_1, \vec{r}_2 \sigma_2 \tau_2\rangle \quad (1.6)$$

1.1.1 Propriétés de l'interaction à deux corps

Dans le cas le plus général, le potentiel nucléon-nucléon peut dépendre des positions, des impulsions, des spins et des isospins des deux nucléons en interaction :

$$v = v (\vec{r}, \vec{r}'; \vec{p}, \vec{p}'; \vec{\sigma}, \vec{\sigma}'; \vec{\tau}, \vec{\tau}') \quad (1.7)$$

Malgré que cette interaction n'est pas connue analytiquement, sa forme n'est pas arbitraire. En effet, la nécessité de reproduire certains effets physiques tels que le principe de Pauli et les différentes symétries du système la contraignent à avoir des formes particulières. En plus de l'hermiticité, il s'agit notamment des symétries suivantes :

Invariance par échange de coordonnées

Cette propriété est liée au fait que les nucléons soient des fermions et par conséquent, leur fonction d'onde doit être antisymétrique :

$$v = v (\vec{r}, \vec{r}'; \vec{p}, \vec{p}'; \vec{\sigma}, \vec{\sigma}'; \vec{\tau}, \vec{\tau}') = v = v (\vec{r}', \vec{r}; \vec{p}', \vec{p}; \vec{\sigma}', \vec{\sigma}; \vec{\tau}', \vec{\tau}) \quad (1.8)$$

Dans le cas d'une fonction d'onde de deux nucléons écrite dans la représentation position, spin et isospin :

$$\langle \vec{r}_1 \sigma_1 \tau_1, \vec{r}_2 \sigma_2 \tau_2 | 1, 2 \rangle = \varphi (\vec{r}_1, \vec{r}_2) \chi (\sigma_1, \sigma_2) \xi (\tau_1, \tau_2)$$

quatre combinaisons compatibles avec le principe de Pauli sont possibles (chacune correspondant à une forme complètement antisymétrisée de la fonction d'onde) :

φ	χ	ξ
paire	impaire (état singulet)	paire (état triplet)
paire	paire (état triplet)	impaire (état singulet)
impaire	paire (état singulet)	paire (état singulet)
impaire	impaire (état triplet)	impaire (état triplet)

Invariance par translation

Cette invariance implique que l'interaction ne dépend que de la position d'un nucléon par rapport à l'autre [2]. Par conséquent, la dépendance des positions individuelles \vec{r} et \vec{r}' doit être remplacée par une dépendance de la position relative ($\vec{r} - \vec{r}'$) notée ci-après \vec{r} . L'interaction devient :

$$v = v(\vec{r}; \vec{p}, \vec{p}'; \vec{\sigma}, \vec{\sigma}'; \vec{\tau}, \vec{\tau}') \quad (1.9)$$

Invariance galiléenne

Le potentiel d'interaction reste inchangé sous l'effet d'une transformation dans un autre repère galiléen. Ceci implique que l'interaction dépend seulement de la quantité de mouvement relative ($\vec{p} - \vec{p}'$), ce vecteur sera noté \vec{p} . Le potentiel d'interaction s'écrit alors :

$$v = v(\vec{r}; \vec{p}; \vec{\sigma}, \vec{\sigma}'; \vec{\tau}, \vec{\tau}') \quad (1.10)$$

Invariance par réflexion (parité)

Contrairement à l'interaction faible, l'interaction forte est invariante sous l'action de l'opérateur parité :

$$v(\vec{r}; \vec{p}; \vec{\sigma}, \vec{\sigma}'; \vec{\tau}, \vec{\tau}') = v(-\vec{r}; -\vec{p}; \vec{\sigma}, \vec{\sigma}'; \vec{\tau}, \vec{\tau}') \quad (1.11)$$

Cette propriété peut être vérifiée en considérant uniquement des termes quadratiques de \vec{r} et \vec{p} .

Invariance par renversement du sens du temps

Cette propriété assure que :

$$v(\vec{r}; \vec{p}; \vec{\sigma}, \vec{\sigma}'; \vec{\tau}, \vec{\tau}') = v(\vec{r}; -\vec{p}; -\vec{\sigma}, -\vec{\sigma}'; \vec{\tau}, \vec{\tau}') \quad (1.12)$$

De sorte que l'interaction ne contienne que des termes à nombre pair de \vec{p} et $\vec{\sigma}$, par exemple de la forme

$$\vec{\sigma} \cdot \vec{\sigma}'; (\vec{r} \cdot \vec{\sigma})(\vec{r} \cdot \vec{\sigma}') \quad \text{ou} \quad \vec{L} \cdot \vec{S} = \frac{\hbar}{2} (\vec{r} \wedge \vec{p}) \cdot (\vec{\sigma} + \vec{\sigma}') \quad (1.13)$$

Evidemment, ces termes et d'autres peuvent être combinés à des facteurs de \vec{r} et \vec{p} .

Le renversement du temps T correspond à l'inversion de la coordonnée temporelle $\{t \rightarrow -t\}$ [4], on peut montrer que T est un opérateur anti-linéaire qui s'écrit sous la forme [2]

$$T\Phi(\vec{r}, t) = \Phi^*(\vec{r}, -t) \quad (1.14)$$

afin de laisser l'équation de Schrodinger invariante. Il n'a donc pas de vecteurs propres et n'est donc pas une observable.

Invariance par rotation dans le système de coordonnées d'espace

Cette propriété ne peut être utilisée pour réduire le nombre de variables, par contre, elle implique que le potentiel d'interaction est un scalaire et que tous les termes du potentiel doivent être construits de sorte à avoir un moment angulaire total nul [2]. A partir des vecteurs \vec{r} et \vec{p} , il est possible de construire trois scalaires indépendants, à savoir, \vec{r}^2 , \vec{p}^2 et $\vec{r} \cdot \vec{p} + \vec{p} \cdot \vec{r}$. Toutefois, ce dernier terme ne peut apparaître que sous forme quadratique dû à l'invariance par renversement du sens du temps.

Invariance d'isospin

En 1932, Heisenberg a proposé que le proton et le neutron étaient deux états de la même particule [3]. Cela implique que le neutron et le proton sont des particules identiques. Remarquons que $m_n = 939,57 \text{ Mev}$ et que $m_p = 938,28 \text{ Mev}$, la différence de masse attribuée aux effets électromagnétiques [2].

La proposition d'Heisenberg était bien avant la découverte des quarks. Donc, on a

assigné les deux états de base d'isospin :

$$|p\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ ou } |p\rangle = \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle \quad (1.15)$$

$$|n\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \text{ ou } |n\rangle = \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle \quad (1.16)$$

L'isospin d'un système de deux nucléons donne un état triplet symétrique :

$$\begin{aligned} |11\rangle &= |pp\rangle \\ |10\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|pn\rangle + |np\rangle) \\ |1-1\rangle &= |nn\rangle \end{aligned} \quad (1.17)$$

et un état singulet anti-symétrique :

$$|00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|pn\rangle - |np\rangle) \quad (1.18)$$

et on a :

$$\vec{\tau} \cdot \vec{\tau}' = 3 \quad (1.19)$$

les relations de comutation et anticommutation entre les isospins :

$$[\tau_i, \tau_j] = 2i \sum_k \varepsilon_{ijk} \tau_k \quad \text{et} \quad \{\tau_i, \tau_j\} = 2\delta_{ij} \quad (1.20)$$

montrent que :

$$\tau_i \tau_j = \delta_{ij} + i \sum_k \varepsilon_{ijk} \tau_k \quad (1.21)$$

$$\begin{aligned} (\tau \tau)^2 &= \sum_{ij} \tau_i \tau_i' \tau_j \tau_j' \\ &= \sum_{ij} \left(\delta_{ij} + i \sum_k \varepsilon_{ijk} \tau_k \right) \left(\delta_{ij} + i \sum_k \varepsilon_{ijk} \tau_k' \right) \\ &= \sum_i \delta_{ii} - \sum_{ijkk'} \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{ijk'} \tau_k \tau_{k'} \end{aligned} \quad (1.22)$$

$$\begin{aligned}
\sum_{ijkk'} \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{ijk} \tau_k \tau_{k'} &= \sum_{kk'} (\varepsilon_{1jk} \varepsilon_{1jk'} + \varepsilon_{2jk} \varepsilon_{2jk'} + \varepsilon_{3jk} \varepsilon_{3jk'}) \tau_k \tau_{k'} \\
&= \sum_{kk'} ((\varepsilon_{11k} \varepsilon_{11k'} + \varepsilon_{12k} \varepsilon_{12k'} + \varepsilon_{13k} \varepsilon_{13k'}) \\
&\quad + (\varepsilon_{21k} \varepsilon_{21k'} + \varepsilon_{22k} \varepsilon_{22k'} + \varepsilon_{23k} \varepsilon_{23k'}) \\
&\quad + (\varepsilon_{31k} \varepsilon_{31k'} + \varepsilon_{32k} \varepsilon_{32k'} + \varepsilon_{33k} \varepsilon_{33k'})) \tau_k \tau_{k'} \tag{1.23}
\end{aligned}$$

Les seuls termes non-nuls sont donc :

$$\begin{aligned}
\sum_{ijkk'} \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{ijk} \tau_k \tau_{k'} &= \sum_{kk'} ((\varepsilon_{123} \varepsilon_{123} \tau_3 \tau_3' + \varepsilon_{132} \varepsilon_{1232} \tau_2 \tau_2' + \varepsilon_{213} \varepsilon_{213} \tau_3 \tau_3') \\
&\quad + (\varepsilon_{231} \varepsilon_{231} \tau_1 \tau_1' + \varepsilon_{312} \varepsilon_{312} \tau_2 \tau_2' + \varepsilon_{321} \varepsilon_{321} \tau_1 \tau_1')) \tag{1.24}
\end{aligned}$$

D'où :

$$\begin{aligned}
\sum_{ijkk'} \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{ijk} \tau_k \tau_{k'} &= 2\tau_1 \tau_1' + 2\tau_2 \tau_2' + 2\tau_3 \tau_3' \\
&= 2\tau \tau' \tag{1.25}
\end{aligned}$$

Alors :

$$(\tau \tau')^2 = 3 - 2\tau \tau' \tag{1.26}$$

Donc, on peut écrire le potentiel d'interaction comme :

$$v = v(\vec{r}, \vec{p}, \vec{\sigma}, \vec{\sigma}') + v(\vec{r}, \vec{p}, \vec{\sigma}, \vec{\sigma}') \vec{\tau} \vec{\tau}' \tag{1.27}$$

1.1.2 Construction de l'interaction nucléon-nucléon

Evidemment, toutes les combinaisons possibles déduites des différentes symétries ne sont pas utilisées dans la construction d'une force nucléaire. Dans ce qui suit, nous nous limiterons aux termes les plus importants.

Avec les vecteurs $\vec{r} = \vec{r} - \vec{r}'$, $\vec{\sigma}$, $\vec{\sigma}'$, les seuls vrais scalaires que l'on peut former sont :

- 1. une fonction de $r = |\vec{r}|$; $v(r)$

2. le produit scalaire $\vec{\sigma} \cdot \vec{\sigma}'$
3. le produit scalaire $(\vec{\sigma} \cdot \vec{r}) (\vec{\sigma}' \cdot \vec{r})$
4. le produit scalaire $(\vec{\sigma} \wedge \vec{r}) \cdot (\vec{\sigma}' \wedge \vec{r})$
5. et leurs produits.

Les puissances $(\vec{\sigma} \cdot \vec{\sigma}')^n$ pour $n \geq 1$ peuvent être ramenées au cas 1. ou 2. en tenant compte des propriétés des matrices de Pauli :

$$\begin{aligned}\sigma_x^2 &= 1 \\ \sigma_y \sigma_z + \sigma_z \sigma_y &= 0 \\ \sigma_y \sigma_z - \sigma_z \sigma_y &= 2i\sigma_x\end{aligned}$$

et de leur permutations cycliques, et en utilisant la relation habituelle :

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{A}) \cdot (\vec{\sigma} \cdot \vec{B}) = \vec{A} \cdot \vec{B} + i\vec{\sigma} \cdot (\vec{A} \wedge \vec{B}) \quad (1.28)$$

En effet :

$$\begin{aligned}(\vec{\sigma} \cdot \vec{\sigma}')^2 &= (\vec{\sigma} \cdot \vec{\sigma}') (\vec{\sigma} \cdot \vec{\sigma}') = \vec{\sigma}^2 + i\vec{\sigma} \cdot (\vec{\sigma}' \wedge \vec{\sigma}) \\ &= 3 - 2\vec{\sigma} \cdot \vec{\sigma}'\end{aligned} \quad (1.29)$$

$$\begin{aligned}(\vec{\sigma} \cdot \vec{\sigma}')^3 &= (\vec{\sigma} \cdot \vec{\sigma}')^2 (\vec{\sigma} \cdot \vec{\sigma}') = (3 - 2\vec{\sigma} \cdot \vec{\sigma}') (\vec{\sigma} \cdot \vec{\sigma}') \\ &= 7\vec{\sigma} \cdot \vec{\sigma}' - 6\end{aligned} \quad (1.30)$$

Il s'en suit que :

$$\begin{aligned}(\vec{\sigma} \cdot \vec{\sigma}')^n &= A + B\vec{\sigma} \cdot \vec{\sigma}' \quad (1.31) \\ A &= \frac{1}{4} (3 + (-3)^n) \\ B &= \frac{1}{4} (1 - (-3)^n)\end{aligned}$$

Le terme $n = 4$ s'écrit, en utilisant la propriété du produit vectoriel.

$$(\vec{A} \wedge \vec{B}) \cdot (\vec{C} \wedge \vec{D}) = (\vec{A} \wedge \vec{C}) \cdot (\vec{B} \wedge \vec{D}) - (\vec{A} \wedge \vec{D}) \cdot (\vec{B} \wedge \vec{C}) \quad (1.32)$$

$$(\vec{\sigma} \wedge \vec{r}) \cdot (\vec{\sigma}' \wedge \vec{r}) = r^2 \vec{\sigma} \cdot \vec{\sigma}' - (\vec{\sigma} \cdot \vec{r}) \cdot (\vec{\sigma}' \cdot \vec{r}) \quad (1.33)$$

Il est préférable de modifier le terme non central $(\vec{\sigma} \cdot \vec{r}) \cdot (\vec{\sigma}' \cdot \vec{r})$ pour le remplacer par une valeur moyenne nulle dans toutes les directions de \vec{r} , sachant que en coordonnées polaires :

$$\frac{1}{4\pi} \int \int (\vec{A} \cdot \vec{r}) \cdot (\vec{B} \cdot \vec{r}) \sin \theta d\theta d\varphi = \frac{1}{3} r^2 \vec{A} \cdot \vec{B} \quad (1.34)$$

On définit S_{12} par

$$S_{12} = \frac{3}{r^2} (\vec{\sigma} \cdot \vec{r}) \cdot (\vec{\sigma}' \cdot \vec{r}) - \vec{\sigma} \cdot \vec{\sigma}' \quad (1.35)$$

appelé également opérateur tensoriel. Pour établir la formule précédente, on établira au préalable les relations :

$$\begin{aligned} \overline{xy} &= \overline{yz} = \overline{xz} = 0 \\ \text{et } \overline{x^2} &= \overline{y^2} = \overline{z^2} = \frac{1}{3} r^2 \end{aligned}$$

La forme générale de l'interaction nucléon-nucléon ne tenant pas compte de l'isospin est une combinaison donc de 1,2 et de l'opérateur S_{12} soit :

$$v(\vec{r}, \vec{\sigma}) = v_0(\vec{r}) + v_\sigma(\vec{r}) \vec{\sigma} \cdot \vec{\sigma}' + v_T(\vec{r}) S_{12} \quad (1.36)$$

Il s'agit maintenant de tenir compte de l'isospin, dans l'expression précédente.

En tenant compte du fait que certains produits tels que $\vec{r} \cdot \vec{\tau}$ et $\vec{\sigma} \cdot \vec{\tau}$ n'ont aucune signification physique et doivent être exclus, l'interaction devient

$$\begin{aligned} v(\vec{r}, \vec{\sigma}, \vec{\tau}) &= v_0(\vec{r}) + v_\sigma(\vec{r}) \vec{\sigma} \cdot \vec{\sigma}' + v_\tau(\vec{r}) \vec{\tau} \cdot \vec{\tau}' + v_{\sigma\tau}(\vec{r}) (\vec{\sigma} \cdot \vec{\sigma}') (\vec{\tau} \cdot \vec{\tau}') \\ &+ S_{12} [v_T(\vec{r}) + v_{T\tau}(\vec{r}) \vec{\tau} \cdot \vec{\tau}'] \end{aligned} \quad (1.37)$$

Lorsqu'on tient compte des forces dépendant de la vitesse, trois nouvelles quantités scalaires peuvent être formées à partir de \vec{r} et \vec{p}

$$\vec{p}^2 = \vec{p} \cdot \vec{p} \quad \text{et} \quad \vec{r}^2 = \vec{r} \cdot \vec{r} \quad \text{et} \quad \vec{p} \cdot \vec{r} \quad (1.38)$$

Cette dernière n'est pas hermitique, on préfère la remplacer par :

$$\frac{1}{2} [\vec{p} \cdot \vec{r} + \vec{r} \cdot \vec{p}] \quad (1.39)$$

Il faut également tenir compte du scalaire :

$$\begin{aligned}
 \vec{L} \cdot \vec{L} &= \vec{L}^2 \\
 &= (\vec{r} \wedge \vec{p}) \cdot (\vec{r} \wedge \vec{p}) \\
 &= r^2 \cdot p^2 - \frac{1}{4} r^2 (\vec{r} \cdot \vec{p} + \vec{p} \cdot \vec{r})^2
 \end{aligned} \tag{1.40}$$

En tenant compte de ces considérations, on voit que la fonction $v(r)$ doit être remplacée par une fonction plus générale $v(r, p, L)$

Lorsque les spins $\vec{\sigma}, \vec{\sigma}'$ sont inclus, des termes additionnels apparaissent ; le plus important d'entre eux est :

$$\frac{\hbar}{2} (\vec{r} \wedge \vec{p}) \cdot (\vec{\sigma} + \vec{\sigma}') = \vec{L} \cdot \vec{S} \tag{1.41}$$

qui est à l'origine du couplage spin-orbite. Quand les trois termes (qui sont les véritables scalaires), sont pris en compte dans l'interaction nucléon-nucléon la plus générale, cette dernière s'écrit :

$$\begin{aligned}
 v(\vec{r}, \vec{\sigma}, \vec{\tau}) &= v_c + v_{LS} \vec{L} \cdot \vec{S} + v_\sigma \vec{\sigma} \cdot \vec{\sigma}' + v_T S_{12} \\
 &\quad + v_{\sigma p} (\vec{\sigma} \cdot \vec{p}) (\vec{\sigma}' \cdot \vec{p}) + v_{\sigma L} (\vec{\sigma} \cdot \vec{L}) (\vec{\sigma}' \cdot \vec{L})
 \end{aligned} \tag{1.42}$$

où chaque coefficient v_i est de la forme

$$v_i = v_i^{(0)}(r, p, L) + v_i^\tau(r, p, L) \vec{\tau} \cdot \vec{\tau}' \tag{1.43}$$

Puisque la fonction d'onde doit être antisymétrique par l'échange de toutes les coordonnées des deux particules en interaction, le principe de Pauli peut être écrit sous la forme :

$$P_r P_\sigma P_\tau = -1 \tag{1.44}$$

où P_r, P_σ et P_τ sont respectivement les opérateurs d'échange des coordonnées d'espace, de spin et d'isospin. Ainsi, le terme central de l'interaction peut être de la forme :

$$v_c = v_W(r) + v_M(r) P_r + v_B(r) P_\sigma + v_H(r) P_r P_\sigma \tag{1.45}$$

où

$$\begin{aligned}
 v_W &= v_0 - v_\sigma - v_\tau + v_{\sigma\tau} && \rightarrow \text{terme de Wigner} \\
 v_M &= -4v_{\sigma\tau} && \rightarrow \text{terme de Majorana} \\
 v_B &= 2v_\sigma - 2v_{\sigma\tau} && \rightarrow \text{terme de Bartlett} \\
 v_H &= -2v_\tau + 2v_{\sigma\tau} && \rightarrow \text{terme de Heisenberg}
 \end{aligned}
 \tag{1.46}$$

La dépendance radiale des termes v_0 , v_σ , v_τ et $v_{\sigma\tau}$ ne peut être déduite des propriétés d'invariance. Il faut revenir à l'origine microscopique de la force pour la déterminer. De nombreuses tentatives sont alors parties de la description des nucléons en terme de quarks faisant apparaître la force NN comme une force résiduelle (de l'interaction forte). Ainsi, les forces modernes sont souvent composées d'une partie à longue portée attractive décrite par l'échange d'un pion, d'une partie à moyenne portée modélisée par l'échange de deux mésons lourds et d'un coeur dur phénoménologique. Parmi les plus connues et peut-être les plus évoluées des forces NN, on peut citer : les potentiels de Paris, de Bonn ou d'Argonne.

1.2 Interaction effective

Très réalistes tous les potentiels sus-cités se heurtent à un problème majeur : le passage de la situation nucléon-nucléon libres à la situation nucléon-nucléon dans le noyau. En effet, l'interaction de deux nucléons libres (isolés) est assez différente de l'interaction de ces deux mêmes nucléons en présence d'autres nucléons avec lesquels ils peuvent aussi interagir. D'une part, le libre parcours moyen des nucléons est plus grand que la taille du noyau lui-même [12] et d'autre part, ces interactions N-N libres comportent un coeur dur extrêmement répulsif impossible à traiter dans le cadre du problème à N corps . On est donc conduit à utiliser des interactions effectives, interactions des nucléons au sein du noyau, qui ne comportent plus le problème du coeur dur.

Interaction effective microscopique

Pour résoudre le problème de fermions en interaction forte d'innombrables techniques ont été développées dans les années 50 et 60. La plus connue est la méthode de Brückner-Bethe-Goldstone qui consiste à réintégrer la partie répulsive à courte portée par la matrice de Brückner (habituellement appelée matrice G) [10]. Cette dernière est une matrice de réaction pour la diffusion de deux nucléons à l'intérieur du noyau définie par analogie avec la matrice de réaction de la diffusion N-N libre (habituellement appelée matrice T). Ainsi,

la matrice G fournit l'interaction effective entre nucléons indépendants. L'hamiltonien du système est alors écrit en terme de G et en première approximation, l'état fondamental du noyau est considéré comme un état de particules indépendantes. Cet état est obtenu par minimisation de l'énergie du noyau ce qui conduit à des équations du type Hartree-Fock. Cette méthode est dite de Brückner-Hartree-Fock.

Cependant, les calculs avec cette interaction présentent de nombreuses difficultés et malgré les progrès réalisés ces dernières années, les résultats obtenus ne sont pas en très bon accord avec l'expérience.

Interaction effective phénoménologique

La complexité des interactions effectives microscopiques a conduit les théoriciens nucléaristes à adopter des interactions phénoménologiques qui contiennent un certain nombre de paramètres ajustables sur des données expérimentales. En fait, il existe actuellement un grand nombre d'interactions phénoménologiques. Chacune d'elles a été développée pour un problème spécifique et leurs domaines de validité et de succès diffèrent considérablement. Certaines interactions ont été développées pour leur application dans des calculs auto-cohérents afin d'établir les propriétés globales des noyaux telles que les rayons nucléaires et les énergies de liaison. D'autres, pour décrire l'interaction entre les nucléons de valence ou entre les nucléons et les trous. Evidemment, une forme analytique simple de l'interaction effective a été généralement choisie et souvent il a été supposé que cette interaction possède les mêmes propriétés de symétries que celle de l'interaction N-N libre.

On distingue deux types d'interactions effectives phénoménologiques : les interactions de portée finie telles que l'interaction de Gogny [10] et celles de portée nulle telles que la force de Skyrme qui sera abordée dans le troisième chapitre. L'interaction de portée finie permet une meilleure simulation des longues et moyennes portées de l'interaction NN réaliste. Même si l'interaction de Gogny autorise un traitement auto-cohérent des propriétés d'appariement dans le formalisme HFB, celui-ci reste lourd à mettre en œuvre.

Chapitre 2

Théorie de Hartree-Fock

L'approximation de particules indépendantes constitue l'hypothèse fondamentale de base de toutes les théories utilisant l'approximation de champ moyen : dans le noyau, les nucléons évoluent indépendamment les uns des autres sous l'influence d'un potentiel moyen qu'ils créent collectivement. Cette approximation trouve une justification expérimentale solide telle que l'observation des nombres magiques dans le cadre du modèle en couches. Un calcul simple permet de justifier cette approximation en évaluant le libre parcours moyen d'un nucléon dans le noyau : pour un nucléon ayant une énergie cinétique de 10MeV, ce libre parcours moyen vaut environ 15 fm, c'est-à-dire plusieurs fois les dimensions du noyau. L'explication de ce résultat est simple : le principe de Pauli limite fortement les états finaux possibles lors d'une collision de deux nucléons dans le noyau : un nucléon ne « voit » donc quasiment pas les autres nucléons mais ne fait que « ressentir » un potentiel moyen qui le rappelle à l'intérieur du noyau.

En tenant compte uniquement des interactions à deux corps, l'hamiltonien nucléaire s'écrit dans le formalisme de la seconde quantification [2] :

$$\hat{H} = \sum_{ij} t_{ij} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} v_{ijkl} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_k \quad (2.1)$$

où t_{ij} est l'élément de matrice de l'opérateur énergie cinétique et v_{ijkl} sont les éléments de matrice de l'interaction nucléon-nucléon à l'intérieur du noyau. \hat{a}_i^\dagger et \hat{a}_j sont les opérateurs de création et d'annihilation des particules dans les états $|i\rangle$ et $|j\rangle$. Nous ferons en outre l'hypothèse que le caractère effectif de la force se traduit uniquement par une dépendance vis à vis de la densité nucléaire.

2.1 Déterminant de Slater

Le noyau considéré comme un système de A fermions indépendants peut être décrit par la déterminant de Slater [1] :

$$\Psi(1, 2, \dots, A) = \frac{1}{\sqrt{A!}} \begin{vmatrix} \phi_1(1) & \phi_1(2) & \dots & \phi_1(A) \\ \phi_2(1) & \phi_2(2) & \dots & \phi_2(A) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_A(1) & \phi_A(2) & \dots & \phi_A(A) \end{vmatrix} \quad (2.2)$$

qui s'écrit dans le formalisme de la seconde quantification :

$$|\Psi\rangle = \hat{a}_1^+ \hat{a}_2^+ \dots \hat{a}_A^+ |0\rangle \quad (2.3)$$

ou encore :

$$|\Psi\rangle = \prod_{i=1}^A \hat{a}_i^+ |0\rangle \quad (2.4)$$

Ici l'indice des opérateurs de création se rapporte à un ensemble d'états de particules indépendantes avec les fonctions d'onde correspondantes $\phi_i(\vec{r})$, $i = 1, \dots, A$, qui sont à déterminer.

Le déterminant de Slater Ψ est donc un vecteur de l'espace de Hilbert du système de A particules construit à partir des fonctions d'onde $\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_A$ qui appartiennent à l'espace de Hilbert des états individuels (ou états à une particule). Les fonctions d'onde sont supposées orthonormalisées, l'orthonormalité des $\{\phi_i\}$ entraîne automatiquement celle de Ψ .

Il existe plusieurs méthodes pour établir les équations de Hartree-Fock. Nous nous contentons ici d'exposer la méthode habituelle basée sur le principe variationnel.

2.2 Principe variationnel - Equations de Hartree-Fock

Soit Ψ une fonction normalisable, on définit la fonctionnelle d'énergie

$$E[\Psi] = \frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \quad (2.5)$$

Ψ est une fonction propre du spectre discret de H si et seulement si $\delta E = 0$.

Nous avons :

$$\begin{aligned} \delta E \langle \Psi | \Psi \rangle + E \langle \delta \Psi | \Psi \rangle + E \langle \Psi | \delta \Psi \rangle \\ = \langle \delta \Psi | H | \Psi \rangle + \langle \Psi | H | \delta \Psi \rangle \end{aligned} \quad (2.6)$$

$$\text{Si } \delta E = 0 : \langle \delta \Psi | H - E | \Psi \rangle + \langle \Psi | H - E | \delta \Psi \rangle = 0 \quad (2.7)$$

Cette relation doit être vraie pour une variation $\delta \Psi$ quelconque, donc en particulier aussi en remplaçant $\delta \Psi$ par $i\delta \Psi$, c-à-d :

$$-i \langle \delta \Psi | H - E | \Psi \rangle + i \langle \Psi | H - E | \delta \Psi \rangle = 0 \quad (2.8)$$

ce qui implique que :

$$\begin{aligned} \langle \delta \Psi | H - E | \Psi \rangle &= 0 \\ \langle \Psi | H - E | \delta \Psi \rangle &= 0 \end{aligned} \quad (2.9)$$

H est un opérateur hermitique et les équations (2.9) doivent être satisfaites $\forall \delta \Psi$. Celles-ci sont donc équivalentes à l'équation de Schrödinger $(H - E) | \Psi \rangle = 0$.

Il est évident que si Ψ est une solution particulière de l'équation de Schrödinger $H\Psi = E\Psi$, $E[\Psi] = E$ les équations (2.9) sont donc satisfaites et (2.6) implique : $\delta E = 0$.

L'équation

$$\langle \delta \Psi | H - E | \Psi \rangle + \langle \Psi | H - E | \delta \Psi \rangle = \delta \{ \langle \Psi | H | \Psi \rangle - E \langle \Psi | \Psi \rangle \} = 0 \quad (2.10)$$

peut être reformulée comme suit :

$$\delta \langle \Psi | H | \Psi \rangle = 0 \quad (2.11)$$

avec la contrainte

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = 1 \quad (2.12)$$

Dans ce qui suit, il sera commode d'utiliser les opérateurs du champ de nucléons :

$$a^+(x), a(x), \quad x = (\vec{r}, \vec{\sigma}, \vec{\tau}) \quad (2.13)$$

Le premier crée un nucléon de spin σ et d'isospin τ au point \vec{r} , le second est l'opérateur

d'annihilation correspondant. Les nucléons étant des fermions, ces opérateurs obéissent aux relations d'anticommuation :

$$\begin{aligned} \{a(x), a(x')\} &= \{a^+(x), a^+(x')\} = 0 \\ \{a(x), a^+(x')\} &= \delta(x - x') = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \cdot \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{\tau\tau'} \end{aligned} \quad (2.14)$$

Ces opérateurs de champ étant définis, on peut faire correspondre à toute représentation orthonormale $\xi_\alpha(x)$ de l'espace (\mathcal{F}) des états à un nucléon, des opérateurs de création c_α^+ et d'annihilation c_α d'un nucléon dans l'état $|\xi_\alpha\rangle$, cette correspondance s'écrit :

$$\begin{aligned} c_\alpha^+ &= \sum \int dx a^+(x) \xi_\alpha(x) \\ c_\alpha &= \sum \int dx a(x) \xi_\alpha^*(x) \end{aligned} \quad (2.15)$$

Le symbole $\sum \int dx$ a été mis pour $\sum_\sigma \sum_\tau \int d^3 \vec{r}$

Les relations d'anticommuation des $a(x)$ jointes à la propriété d'orthonormalité des ξ_α montrent que les c_α obéissent à des relations d'anticommuation analogues :

$$\begin{aligned} \{c_\alpha, c_\beta\} &= \{c_\alpha^+, c_\beta^+\} = 0 \\ \{c_\alpha, c_\beta^+\} &= \delta_{\alpha\beta} \end{aligned} \quad (2.16)$$

On vérifie sans peine qu'un opérateur agissant dans (\mathcal{F}) (opérateur à un corps) :

$$T = \sum_{i=1}^A t_i \quad (2.17)$$

s'écrit :

$$T = \sum \int dx \sum \int dx' a^+(x) \langle x | t | x' \rangle a(x) \quad (2.18)$$

ou bien :

$$T = \sum_{\alpha\beta} c_\alpha^+ \langle \xi_\alpha | t | \xi_\beta \rangle c_\beta \quad (2.19)$$

De même un opérateur agissant dans (\mathcal{F}) \otimes (\mathcal{F}) (opérateur à deux corps) :

$$v = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^A v_{ij} \quad (2.20)$$

peut être réécrit sous la forme :

$$v = \frac{1}{4} \sum \int dx_1 \sum \int dx_2 \sum \int dx_1 \sum \int dx_2 a^+(x_1) a^+(x_2) \langle x_1 x_2 | v | \widetilde{x_1' x_2'} \rangle a(x_2) a(x_1) \quad (2.21)$$

donc :

$$v = \frac{1}{4} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} c_\alpha^+ c_\beta^+ \langle \xi_\alpha \xi_\beta | v | \widetilde{\xi_\gamma \xi_\delta} \rangle c_\delta c_\gamma \quad (2.22)$$

où l'on a posé :

$$\begin{aligned} | \widetilde{x_1' x_2'} \rangle &= | x_1' x_2' \rangle - | x_2' x_1' \rangle \\ | \widetilde{\xi_\gamma \xi_\delta} \rangle &= | \xi_\gamma \xi_\delta \rangle - | \xi_\delta \xi_\gamma \rangle \end{aligned} \quad (2.23)$$

En seconde quantification, le hamiltonien H s'écrit :

$$H = \sum_{\alpha\beta} t_{\alpha\beta} c_\alpha^+ c_\beta + \frac{1}{4} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} v_{\alpha\beta\widetilde{\gamma\delta}} c_\alpha^+ c_\beta^+ c_\delta c_\gamma \quad (2.24)$$

avec :

$$\begin{aligned} t_{\alpha\beta} &= \langle \xi_\alpha | t | \xi_\beta \rangle \\ v_{\alpha\beta\widetilde{\gamma\delta}} &= \langle \xi_\alpha \xi_\beta | v_{12} | \widetilde{\xi_\gamma \xi_\delta} \rangle \end{aligned} \quad (2.25)$$

Le grand avantage de ce formalisme tiend à l'existence du théorème de Wick [1]. Ce théorème permet d'exprimer tout produit d'opérateurs de création et d'annihilation a,b,c,.....,l en termes de produits normaux et de contractions définis vis à vis d'un état $| \rangle$ quelconque de (F). Les contractions concernent tous les couples d'opérateurs. Elles sont définies par :

$$\widehat{ab} = \langle | ab | \rangle \quad (2.26)$$

Les produits normaux : $abc\dots l$: sont des produits d'opérateurs a,b,c,.....,l réordonnés de telle façon que :

$$\langle | : abc\dots l : | \rangle \quad (2.27)$$

est affectés d'un signe positif ou négatif. L'application du théorème de Wick aux produits

d'opérateurs apparaissant dans (2.23) conduit, aux relations :

$$\begin{aligned}
c_\alpha^+ c_\beta &= \widehat{c_\alpha^+ c_\beta} + : c_\alpha^+ c_\beta : \\
c_\alpha^+ c_\beta^+ c_\delta c_\gamma &= \widehat{c_\alpha^+ c_\beta^+ c_\delta c_\gamma} - \widehat{c_\alpha^+ c_\delta c_\beta^+ c_\gamma} + \widehat{c_\alpha^+ c_\gamma c_\beta^+ c_\delta} \\
&+ \widehat{c_\alpha^+ c_\beta^+} : c_\delta c_\gamma : - \widehat{c_\alpha^+ c_\delta} : c_\beta^+ c_\gamma : + \widehat{c_\alpha^+ c_\gamma} : c_\beta^+ c_\delta : \\
&+ : c_\alpha^+ c_\beta^+ : \widehat{c_\delta c_\gamma} - : c_\alpha^+ c_\delta : \widehat{c_\beta^+ c_\gamma} + : c_\alpha^+ c_\gamma : \widehat{c_\beta^+ c_\delta} \\
&+ : c_\alpha^+ c_\beta^+ c_\delta c_\gamma :
\end{aligned} \tag{2.28}$$

si bien que H peut être réécrit sous la forme :

$$\begin{aligned}
H &= \sum_{\alpha\beta} t_{\alpha\beta} \widehat{c_\alpha^+ c_\beta} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} v_{\alpha\beta\gamma\delta} \widehat{c_\alpha^+ c_\gamma c_\beta^+ c_\delta} + \frac{1}{4} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} v_{\alpha\beta\gamma\delta} \widehat{c_\alpha^+ c_\beta^+ c_\delta c_\gamma} \\
&+ \sum_{\alpha\beta} t_{\alpha\beta} (: c_\alpha^+ c_\beta :) + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} v_{\alpha\beta\gamma\delta} \left(\widehat{c_\alpha^+ c_\gamma} : c_\beta^+ c_\delta : + : c_\alpha^+ c_\gamma : \widehat{c_\beta^+ c_\delta} \right) \\
&+ \frac{1}{4} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} v_{\alpha\beta\gamma\delta} \left(\widehat{c_\alpha^+ c_\beta^+} : c_\delta c_\gamma : + : c_\alpha^+ c_\beta^+ : \widehat{c_\delta c_\gamma} \right) \\
&+ \frac{1}{4} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} v_{\alpha\beta\gamma\delta} (: c_\alpha^+ c_\beta^+ c_\delta c_\gamma :)
\end{aligned} \tag{2.29}$$

car :

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2} \left(\widehat{c_\alpha^+ c_\gamma c_\beta^+ c_\delta} \right) &= \frac{1}{4} \left(\widehat{c_\alpha^+ c_\beta^+ c_\delta c_\gamma} + \widehat{c_\alpha^+ c_\gamma c_\beta^+ c_\delta} \right) \\
\text{et } \frac{1}{2} \left(\widehat{c_\alpha^+ c_\beta^+} : c_\delta c_\gamma : \right) &= \frac{1}{4} \left(\widehat{c_\alpha^+ c_\beta^+} : c_\delta c_\gamma : + \widehat{c_\alpha^+ c_\gamma} : c_\beta^+ c_\delta : \right) \\
\frac{1}{2} (: c_\alpha^+ c_\beta^+ : \widehat{c_\delta c_\gamma}) &= \frac{1}{4} (: c_\alpha^+ c_\beta^+ : \widehat{c_\delta c_\gamma} + : c_\alpha^+ c_\gamma : \widehat{c_\beta^+ c_\delta})
\end{aligned} \tag{2.30}$$

Nous avons tenu compte dans cette expression des relations de symétries (2.23). La commodité de cette décomposition apparaît immédiatement lorsque l'on calcule $\langle | H | \rangle$.

La méthode de Hartree-Fock a pour but de trouver une représentation à une particule a^+ telle que l'état de particules indépendantes :

$$|\Psi\rangle = \left(\prod_{a=1}^A a^+ |0\rangle \right) \tag{2.31}$$

reproduise au mieux l'état fondamental du système à A nucléons. Le critère est varia-

tionnel : $|\Psi\rangle$ doit minimiser la fonctionnelle :

$$E(\Psi) = \frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \quad (2.32)$$

représentant l'énergie du système. Les expressions écrites plus haut vont nous permettre d'explicitier ce problème de façon très simple.

Nous pouvons maintenant reformuler le problème variationnel dans la notation a . L'Hamiltonien devient

$$\hat{H} = \sum_{k_1 k_2} t_{k_1 k_2} a_{k_1}^+ a_{k_2} + \frac{1}{2} \sum_{k_1 k_2 k_3 k_4} v_{k_1 k_2 k_3 k_4} a_{k_1}^+ a_{k_2}^+ a_{k_4} a_{k_3} \quad (2.33)$$

tel que les indices k sont choisis parmi les indices des états occupés $1, \dots, A$, et même variation $|\delta\Psi\rangle$ prend la forme :

$$|\delta\Psi\rangle = \epsilon a_m^+ a_i |\Psi\rangle$$

Ainsi :

$$\langle \delta\Psi | H | \Psi \rangle = \epsilon^* \langle \Psi | a_i^+ a_m H | \Psi \rangle$$

Le calcul des éléments de matrice de H est donné comme :

$$t_{mi} + \frac{1}{2} \sum_j (v_{mjij} - v_{mjji} - v_{jmij} + v_{jmji}) = 0 \quad (2.34)$$

Notons que i, j représentent les états occupés et m les états inoccupés.

De la définition des éléments de matrice il est clair qu'ils ne changent pas leur valeur si le premier indice est échangé avec la seconde et simultanément le troisième avec le quatrième, ainsi l'équation peut être simplifiée à :

$$t_{mi} + \sum_j (v_{mjij} - v_{mjji}) = 0 \quad (2.35)$$

La notation est encore simplifiée en abrégant le terme antisymétrisé des éléments de matrices :

$$v_{k_1 k_2 k_3 k_4} = v_{k_1 k_2 k_3 k_4} - v_{k_1 k_2 k_4 k_3} \quad (2.36)$$

de sorte que nous obtenions :

$$t_{mi} + \sum_{j=1}^A v_{mjij} = 0 \quad (2.37)$$

Pour comprendre la physique contenue dans cette équation, il faut se rappeler que les différents indices : i désigne un état occupé ($i \leq A$), m les états inoccupés ($m > A$), et j désigne tous les états occupés. L'équation exige ainsi que les états d'une particule doivent être choisis tels que les éléments de matrice

$$h_{kl} = t_{kl} + \sum_{j=1}^A v_{kjlj} \quad (2.38)$$

soient nuls entre les états occupés et inoccupés [2]. Si nous considérons que les indices se réfèrent à des combinaisons arbitraires d'états, ceci définit un opérateur \hat{h} d'une particule, qui s'appelle habituellement l'hamiltonien Hartree-Fock.

L'opérateur \hat{h} est généralement fractionné en quatre parties correspondant aux différents ensembles d'indices : \hat{h}_{PP} (particule-particule), éléments de matrice avec les deux indices se rapportant aux états inoccupés de la particule indépendante, \hat{h}_{hh} (trou-trou) aux états occupés, \hat{h}_{ph} et \hat{h}_{hp} définissent les cas mélangés appropriés. Formellement, la matrice est décomposée comme suit :

$$\hat{h} = \begin{pmatrix} \hat{h}_{hh} & \hat{h}_{hp} \\ \hat{h}_{ph} & \hat{h}_{pp} \end{pmatrix} \quad (2.39)$$

ou, dans une notation plus simple :

$$\hat{h} = \hat{h}_{pp} + \hat{h}_{hh} + \hat{h}_{ph} + \hat{h}_{hp} \quad (2.40)$$

et les conditions deviennent :

$$\hat{h}_{ph} = 0 \text{ et } \hat{h}_{hp} = 0 \quad (2.41)$$

La décomposition de la matrice en bloc montre que les états peuvent être choisis comme pour rendre \hat{h} lui-même diagonal :

$$h_{kl} = t_{kl} + \sum_{j=1}^A v_{kjlj} = \varepsilon_k \delta_{kl} \quad (2.42)$$

avec des énergies ε_k de particules indépendantes. Ceci définit un choix approprié des états de particules $\phi_k(\vec{r})$ eux-mêmes. En insérant la relation de fermeture $\int d\vec{r}' |\vec{r}'\rangle \langle \vec{r}'|$, les

équations (2.42) de Hartree-Fock s'écrivent dans l'espace de configuration :

$$\begin{aligned} \varepsilon_k \phi_k(\vec{r}) = & -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \phi_k(\vec{r}) + \left(\int d^3 \vec{r}' v(\vec{r}' - \vec{r}) \sum_{j=1}^A |\phi_j(\vec{r}')|^2 \right) \phi_k(\vec{r}) \\ & - \sum_{j=1}^A \phi_j(\vec{r}) \int d^3 \vec{r}' v(\vec{r}' - \vec{r}) \phi_j^*(\vec{r}') \phi_k(\vec{r}') \end{aligned} \quad (2.43)$$

Les équations sont tout à fait semblables aux équations de Schrödinger pour des états de particules indépendantes. Le deuxième terme du côté droit est le potentiel moyen

$$U(\vec{r}) = \int d^3 \vec{r}' v(\vec{r}' - \vec{r}) \sum_{j=1}^A |\phi_j(\vec{r}')|^2 \quad (2.44)$$

ce qui a l'interprétation simple du potentiel produit par la distribution de densité des nucléons. Le dernier terme est le terme d'échange, en même temps que le potentiel moyen, il définit le champ moyen. L'approximation de Hartree-Fock s'appelle souvent l'approximation de champs moyen.

Le terme d'échange rend naturellement le problème un peu plus compliqué qu'une équation de Schrödinger simple d'une particule. Puisqu'il transforme l'équation de Schrödinger en équation intégrale, il est beaucoup plus difficile à traiter dans la pratique. Diverses approximations ont été alors introduites. Toutefois, dans le cas d'une interaction de portée nulle (les forces de Skyrme), le terme d'échange peut être combinée avec le terme direct.

Les équations de Hartree-Fock constituent un problème auto-cohérent dans le sens que les fonctions d'onde déterminent le champ moyen et le champ moyen détermine à son tour les fonctions d'onde [10]. Dans la pratique ceci impose une résolution itérative dans laquelle le point de départ est généralement un ensemble de fonctions d'onde de l'oscillateur harmonique qui permet de déterminer le champ moyen à partir d'elles. La solution des équations de Schrödinger fournissent alors un nouvel ensemble de fonctions d'onde, et ce processus est répété jusqu'à une stabilité des résultats.

2.3 Equations de Hartree-Fock en fonction de la matrice densité

Supposons $|\Psi\rangle$ normalisé et introduisons la matrice densité ρ du système dans une représentation orthonormale décrite par des opérateurs c_α^+ . Ses éléments de matrice sont :

$$\rho_{\alpha\beta} = \langle \Psi | c_\beta^+ c_\alpha | \Psi \rangle \quad (2.45)$$

Soit U la matrice (unitaire) qui fait passer de la représentation des c_α^+ à celle des a_a^+ :

$$\begin{aligned} a_a^+ &= \sum_\alpha c_\alpha^+ U_{\alpha a} \\ c_\alpha^+ &= \sum_a a_a^+ U_{\alpha a}^* \end{aligned} \quad (2.46)$$

On obtient :

$$\rho_{\alpha\beta} = \sum_b \sum_a U_{\beta a}^* U_{\alpha b} \langle \Psi | a_b^+ a_a | \Psi \rangle$$

donc :

$$\rho_{\alpha\beta} = \sum_{a=1}^A U_{\alpha a} U_{\beta a}^* \quad (2.47)$$

On en déduit que ρ est hermitienne, idempotente, et sa trace vaut A , le nombre de nucléons :

$$\begin{aligned} \rho^+ &= \rho \\ \rho^2 &= \rho \\ \text{tr}\rho &= A \end{aligned} \quad (2.48)$$

Cette matrice contient toute l'information relative à l'état du noyau et sa donnée est équivalente à celle de $|\Psi\rangle$. Il en résulte que $E(\Psi)$ peut s'exprimer comme seule fonction de ρ . L'expression (2.28) le montre d'ailleurs directement. Les contractions :

$$\begin{aligned} \widehat{c_\alpha c_\beta} &= \langle \Psi | c_\alpha c_\beta | \Psi \rangle \\ \widehat{c_\alpha^+ c_\beta^+} &= \langle \Psi | c_\alpha^+ c_\beta^+ | \Psi \rangle \end{aligned} \quad (2.49)$$

sont identiquement nulles lorsque $|\Psi\rangle$ est du type (2.31), de sorte que

$$\begin{aligned}
E(\Psi) &= \sum_{\alpha\beta} t_{\alpha\beta} \langle \Psi | c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta} | \Psi \rangle \\
&\quad + \frac{1}{4} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \hat{v}_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle \Psi | c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta}^{\dagger} c_{\delta} c_{\gamma} | \Psi \rangle \\
E(\Psi) &= \sum_{\alpha\beta} t_{\alpha\beta} \rho_{\beta\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \hat{v}_{\alpha\beta\gamma\delta} \rho_{\gamma\alpha} \rho_{\delta\beta}
\end{aligned} \tag{2.50}$$

donc :

$$E(\Psi) = E(\rho) = tr(t \cdot \rho) + \frac{1}{2} tr_1 tr_2 v_{12}^{(a)} \rho_1 \rho_2 \tag{2.51}$$

avec :

$$\hat{v}_{\alpha\beta\gamma\delta} = v_{12}^{(a)}$$

$$et \quad \rho_{\gamma\alpha} = \rho_1 \quad , \quad \rho_{\delta\beta} = \rho_2$$

t est la matrice d'éléments $t_{\alpha\beta}$ et $v_{12}^{(a)}$ la matrice bloc $\hat{v}_{\alpha\beta\gamma\delta}$ du potentiel antisymétrisé dans laquelle α et γ se rapportent à la particule 1, β et δ à la particule 2. Les indices 1 et 2 dans les symboles "tr" et dans ρ indiquent de quelle façon les traces doivent être effectuées.

La théorie de la fonctionnelle de la densité - Density Functional Theory (DFT) - [2] stipule qu'il existe une fonctionnelle de l'énergie $E[\rho]$ dépendante de la densité locale du système qui caractérise complètement son état fondamental. Il s'agit du théorème de Hohenberg-Kohn [1]. La DFT est un outil très puissant pour appréhender le problème à N-corps : $|\Psi\rangle$ est une fonction d'onde à $3N$ dimensions tandis que la densité ρ n'en possède que trois. La fonctionnelle en densité a désormais remplacé la notion d'interaction effective.

Pour déterminer la base HF, la fonctionnelle de l'énergie (2.51) doit être minimisée par rapport à toutes les densités ρ , avec la condition que $\rho^2 = \rho$. Ceci est équivalent à la minimisation de (2.51) dans l'espace des déterminants de Slater. Puisque la densité à laquelle on ajoute une petite variation est aussi un projecteur :

$$(\rho + \delta\rho)^2 = \rho + \delta\rho$$

En négligeant les termes quadratiques en $\delta\rho$, on obtient :

$$\delta\rho = \rho \delta\rho + \delta\rho \rho$$

Cela signifie que, dans la base HF où la densité est diagonale, les éléments de matrice particule-particule (pp) et trou-trou (hh) de $\delta\rho$ doivent être nuls :

$$\rho \delta\rho = \delta\rho \rho = 0$$

Par conséquent, pour s'assurer que nous restons dans l'ensemble des déterminants de Slater, nous pouvons ne tenir compte que des variations $\delta\rho_{mi}$ et $\delta\rho_{im}$ des élément de matrice particule-trou (ph) et trou-particule (hp) de la matrice densité ρ dans la base HF.

La variation de l'énergie (2.50) est alors donnée par :

$$\delta E = E[\rho + \delta\rho] - E[\rho] = \sum_{k,k'} h_{k,k'} \delta\rho_{k,k'} = \sum_{mi} h_{mi} \delta\rho_{im} + c.c. \quad (2.52)$$

où la matrice hermitique h est définie par :

$$h_{k,k'} = \frac{\partial E^{HF}[\rho]}{\partial \rho_{k,k'}}$$

Tenant compte de (2.50), on peut écrire :

$$h = t + \Gamma$$

où Γ est le potentiel "self-consistant" défini par :

$$\Gamma_{k,k'} = \sum_{l,l'} v_{k,l,k',l'} \rho_{l,l'}$$

Comme $\delta\rho_{mi}$ peut prendre des valeurs arbitraires, à partir de (2.52) nous pouvons vérifier que la condition $\delta E = 0$ pour la solution HF signifie que les éléments de matrice (ph) de h doivent être nuls :

$$h_{mi} = t_{mi} + \sum_{j=1}^A v_{m,j,i,j} = 0 \quad (\text{pour } i \leq A, m > A) \quad (2.53)$$

ρ doit être diagonale, l'équation (2.53) est alors équivalente à :

$$[h, \rho] = [t + \Gamma[\rho], \rho] = 0 \quad (2.54)$$

C'est une équation non linéaire ; elle montre que h et ρ peuvent être diagonalisés simultanément.

Ainsi, la base de Hartree-Fock est définie comme étant celle où h et ρ sont diagonales en même temps. Dans cette base, l'équation (2.54) nous donne les valeurs propres suivantes :

$$h_{k,k'} = t_{k,k'} + \sum_{i=1}^A v_{k,i,k',i} = \epsilon_k \delta_{k,k'}$$

Puisque cette base est donnée par la transformation unitaire (2.46), on obtient finalement l'ensemble des équations de Hartree-Fock :

$$\sum_l h_{l,l} D_{l,k} = \sum_l \left(t_{l,l} + \sum_{i=1}^A \sum_{p,p'} v_{l,p',l,p} U_{p,i} U_{p',i}^* \right) D_{l,k} = \epsilon_k D_{l,k} \quad (2.55)$$

Les équations HF représentent un problème aux valeurs propres hermitique et non linéaire. La non linéarité de ces équations vient du fait que la matrice h dépend de la densité ρ , qui à son tour dépend des fonctions d'onde individuelles, qui peuvent être déterminées à partir des coefficients $U_{l,k}$, solutions des équations HF. Généralement, pour résoudre un tel ensemble d'équations non linéaires on procède par itération : après avoir fait le choix d'un ensemble de fonctions d'onde d'essai, la matrice densité est calculée et l'hamiltonien HF est construit ; ce dernier est diagonalisé en résolvant l'équation (2.55) puis à partir des solutions $U_{l,k}$, un nouvel ensemble de fonctions d'onde est obtenu. Celles-ci servent à déterminer la densité puis l'hamiltonien HF et ainsi de suite jusqu'à la convergence.

Ainsi, suivant la méthode de Hartree-Fock, on construit un hamiltonien de particules indépendantes :

$$H^{HF} = \sum_{k,k'} h_{k,k'} a_k^+ a_{k'} = \sum_{k,k'} (t_{k,k'} + \Gamma_{k,k'}) a_k^+ a_{k'} \quad (2.56)$$

$$= \sum_{k,k'} \left(t_{k,k'} + \sum_{j=1}^A v_{k,j,k',j} \right) a_k^+ a_{k'} \quad (2.57)$$

$$= \sum_k \epsilon_k a_k^+ a_k \quad (2.58)$$

Donc l'état fondamental est un déterminant de Slater $|HF\rangle$ correspondant à une énergie E stationnaire pour des petites variations de la fonction d'onde. En plus de l'énergie cinétique, l'hamiltonien h contient un champ self-consistant Γ dépendant de la densité nucléaire, ce champ est monoparticulaire et représente la moyenne de toutes les interactions à deux corps. Pour résumer, l'hamiltonien HF décrit le mouvement d'une particule dans un potentiel moyen statique qui résulte de l'interaction moyenne de cette particule avec les autres particules du système.

La méthode HF fournit une bonne approximation de l'état fondamental d'un noyau. En conclusion, la méthode de Hartree-Fock consiste à approcher la dynamique d'un système par le mouvement de particule indépendante. L'état du système est un déterminant de Slater et l'hamiltonien HF est un hamiltonien monoparticulaire. De plus, puisque la base HF est définie à une transformation unitaire près entre états de particules d'une part et états de trou d'autre part, alors seules les corrélations de type (p-h) sont prises en compte.

2.4 Energie Hartree-Fock

L'énergie du système dans son état fondamental, dans l'approximation Hartree-Fock est obtenue en calculant la valeur moyenne de H sur l'état $|\Psi\rangle = \prod_i a_i^+ |0\rangle$ où i se réfère aux états occupés :

$$\begin{aligned} E_0 &= \langle \Psi | H | \Psi \rangle \\ &= \sum_{k_1, k_2} \epsilon_{k_1 k_2} \langle \Psi | a_{k_1}^+ a_{k_2} | \Psi \rangle + \frac{1}{2} \sum_{k_1 k_2 k_3 k_4} v_{k_1 k_2 k_3 k_4} \langle \Psi | a_{k_1}^+ a_{k_2}^+ a_{k_3} a_{k_4} | \Psi \rangle \end{aligned} \quad (2.59)$$

Notons à ce niveau que :

$$\begin{aligned} a_i^+ | \Psi \rangle &= 0 \\ a_m | \Psi \rangle &= 0 \end{aligned} \quad (2.60)$$

où m se réfère aux états inoccupés. Il s'en suit que :

$$\begin{aligned} E_0 &= \sum_i t_{ii} + \frac{1}{2} \sum_{ij} (v_{ijij} - v_{ijji}) \\ &= \sum_i \epsilon_i + \frac{1}{2} \sum_{ij} \bar{v}_{ijij} \end{aligned} \quad (2.61)$$

où

$$\bar{v}_{ijij} = v_{ijij} - v_{ijji} \quad (2.62)$$

Les premiers états excités Hartree-Fock sont définis comme des états à une particule un trou :

$$|mi\rangle = a_m^+ a_i |\Psi\rangle$$

dont l'énergie est donnée par :

$$\begin{aligned} E_{mi} &= \langle mi | H | mi \rangle \\ &= E_0 + \epsilon_m - \epsilon_i - \bar{v}_{mimi} \end{aligned}$$

Il apparait ainsi qu'en plus de la contribution des énergies de particules indépendantes dans l'état excité, le champ moyen également contribue.

De la même façon, des états excités à n particules-ntrous peuvent être déterminés.

Chapitre 3

Interaction de Skyrme

3.1 Formulation de l'interaction de Skyrme

La force de Skyrme est une interaction effective phénoménologique non locale de portée nulle. Sa forme simple la rend facile à utiliser et a pris une réelle importance avec le succès de Vautherin et Brink [7] lors des premières applications aux noyaux sphériques.

La force de Skyrme sous sa forme standard la plus utilisée se présente comme la somme de plusieurs termes [13] :

$$\begin{aligned}
 v(\vec{r}_1, \vec{r}_2) &= t_0 \left(1 + x_0 \hat{P}_\sigma\right) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) && \text{Terme central} \\
 + \frac{1}{2} t_1 \left(1 + x_1 \hat{P}_\sigma\right) \left[\overleftarrow{K}_{12}^2 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) + \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \overrightarrow{K}_{12}^2 \right] && \left. \vphantom{v(\vec{r}_1, \vec{r}_2)} \right\} \text{Termes non locaux (dépendant des vitesses)} \\
 + t_2 \left(1 + x_2 \hat{P}_\sigma\right) \overleftarrow{K}_{12} \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \overrightarrow{K}_{12} && \\
 + \frac{1}{6} t_3 \left(1 + x_3 \hat{P}_\sigma\right) \left[\rho(\vec{R}) \right]^\alpha \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) && \text{Terme dépendant de la densité} \\
 + i W_0 (\vec{\sigma}_1 + \vec{\sigma}_2) \cdot \left[\overleftarrow{K}_{12} \times \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \overrightarrow{K}_{12} \right] && \text{Terme spin-orbite}
 \end{aligned} \tag{3.1}$$

Où

$$\overrightarrow{K}_{12} = \frac{1}{2i} (\overrightarrow{\nabla}_1 - \overrightarrow{\nabla}_2)$$

Est l'opérateur de moment relatif qui agit à droite et \overleftarrow{K}_{12} celui qui agit à gauche et

Avec $\hat{P}_\sigma = \frac{1}{2} (1 + \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2)$ opérateur d'échange de spin.

Les paramètres de la force ($t_0, t_1, t_2, t_3, W_0, x_0, x_1, x_2, x_3$) ont été ajustés sur les données expérimentales [13]. α module la dépendance en densité de l'interaction qui représente l'influence du milieu nucléaire sur l'interaction entre les nucléons.

L'interaction effective de Skyrme se compose généralement d'un potentiel à deux corps

et d'un potentiel à trois corps de portée nulle. Dans les calculs Hartree-Fock ce dernier agit exactement comme un potentiel à deux corps dépendant de la densité. La forme analytique du potentiel à deux corps repose essentiellement sur la remarque suivante : dans un système de nucléons caractérisé par un niveau de Fermi d'impulsion k_F , l'impulsion relative de deux particules ne peut évidemment pas dépasser $2k_F$ [1]. On n'a donc besoin des éléments de matrice de l'interaction que pour un intervalle réduit de valeurs de k de part et d'autre de la valeur de saturation. Dans ces conditions, il est raisonnable d'approximer la forme de l'interaction dans l'espace des impulsions par un développement quadratique de la forme (3.1).

3.2 Fonctionnelle de Skyrme

Dans un premier temps, nous commencerons par établir quelques formules utiles. L'espace des états est supposé invariant par renversement du sens du temps. Ceci signifie que si un état à particule indépendante $|i\rangle$ est occupé alors son renversé par rapport au temps $|\tilde{i}\rangle = T|i\rangle$ est également occupé. Dans le cas des fermions (particules de spin $\frac{1}{2}$), l'opérateur renversement du sens du temps peut s'écrire sous la forme [2] :

$$T = -i\sigma_y K_0 \quad (3.2)$$

où K_0 est l'opérateur conjugaison complexe. La fonction d'onde à particule indépendante est donnée par :

$$\begin{aligned} \Phi_{\tilde{i}}(\vec{r}, \sigma, \tau) &= \langle \vec{r}, \sigma, \tau | T | i \rangle \\ &= \langle \vec{r}, \sigma, \tau | (-i\sigma_y K_0) | i \rangle \\ &= -i \langle \vec{r}, \sigma, \tau | \sigma_y \left(\int \sum_{\sigma', \tau'} |\vec{r}', \sigma', \tau'\rangle \langle \vec{r}', \sigma', \tau'| \right) K_0 | i \rangle d\vec{r}' \\ &= -i \int \sum_{\sigma', \tau'} \langle \vec{r}, \sigma, \tau | \sigma_y | \vec{r}', \sigma', \tau' \rangle \Phi_i^*(\vec{r}', \sigma', \tau') d\vec{r}' \\ &= -i \int \sum_{\sigma', \tau'} \delta_{\vec{r}, \vec{r}'} \delta_{\sigma, \sigma'} \delta_{\tau, \tau'} \langle \sigma | \sigma_y | \sigma' \rangle \Phi_i^*(\vec{r}', \sigma', \tau') d\vec{r}' \\ &= -i \sum_{\sigma'} \langle \sigma | \sigma_y | \sigma' \rangle \Phi_i^*(\vec{r}, \sigma', \tau) \end{aligned} \quad (3.3)$$

où \vec{r} représente l'ensemble des coordonnées d'espace, σ est le spin et τ est l'isospin du nucléon.

Notons que :

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_{+\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_{-\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3.4)$$

et que :

$$\langle \sigma | \sigma_y | \sigma \rangle = -2i\sigma\delta_{-\sigma,\sigma'} \quad (3.5)$$

d'où :

$$\Phi_i(\vec{r}, \sigma, \tau) = -2\sigma\Phi_i^*(\vec{r}, -\sigma, \tau) \quad (3.6)$$

Par ailleurs :

$$\begin{aligned} \sum_i \Phi_i^*(\vec{r}, \sigma_1, \tau) \Phi_i(\vec{r}, \sigma_2, \tau) &= \frac{1}{2} \sum_i \{ \Phi_i^*(\vec{r}, \sigma_1, \tau) \Phi_i(\vec{r}, \sigma_2, \tau) \\ &\quad + \Phi_i^*(\vec{r}, \sigma_1, \tau) \Phi_i(\vec{r}, \sigma_2, \tau) \} \\ &= \frac{1}{2} \sum_i \{ \Phi_i^*(\vec{r}, \sigma_1, \tau) \Phi_i(\vec{r}, \sigma_2, \tau) \\ &\quad + 4\sigma_1\sigma_2\Phi_i(\vec{r}, -\sigma_1, \tau) \Phi_i^*(\vec{r}, -\sigma_2, \tau) \} \end{aligned} \quad (3.7)$$

Il apparait alors que si $\sigma_1 = \sigma_2$:

$$\begin{aligned} \sum_i \Phi_i^*(\vec{r}, \sigma, \tau) \Phi_i(\vec{r}, \sigma, \tau) &= \frac{1}{2} \sum_i \{ |\Phi_i(\vec{r}, \sigma, \tau)|^2 + |\Phi_i(\vec{r}, -\sigma, \tau)|^2 \} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i,\sigma} |\Phi_i(\vec{r}, \sigma, \tau)|^2 \\ &= \frac{1}{2} \rho_\tau(\vec{r}) \end{aligned} \quad (3.8)$$

$$\rho_\tau(\vec{r}) = \sum_{i,\sigma} |\Phi_i(\vec{r}, \sigma, \tau)|^2 \quad (3.9)$$

Dans le cas où $\sigma_1 \neq \sigma_2$, on a $\sigma_1 = -\sigma_2 = \sigma$:

$$\begin{aligned} \sum_i \Phi_i^*(\vec{r}, \sigma, \tau) \Phi_i(\vec{r}, -\sigma, \tau) &= \frac{1}{2} \sum_i \Phi_i^*(\vec{r}, \sigma, \tau) \Phi_i(\vec{r}, -\sigma, \tau) \\ &\quad - \Phi_i(\vec{r}, -\sigma, \tau) \Phi_i^*(\vec{r}, \sigma, \tau) = 0 \end{aligned} \quad (3.10)$$

Il s'en suit que :

$$\sum_i \Phi_i^*(\vec{r}, \sigma_1, \tau) \Phi_i(\vec{r}, \sigma_2, \tau) = \frac{1}{2} \rho_\tau(\vec{r}) \delta_{\sigma_1, \sigma_2} \quad (3.11)$$

En utilisant les identités suivantes :

$$\begin{aligned} \langle \sigma | \sigma_x | \sigma \rangle &= \delta_{\sigma, -\sigma} \\ \langle \sigma | \sigma_y | \sigma \rangle &= -2i\sigma \delta_{-\sigma, \sigma} \\ \langle \sigma | \sigma_z | \sigma \rangle &= 2\sigma \delta_{\sigma, \sigma} \end{aligned} \quad (3.12)$$

et le fait que la trace des matrices de Pauli est nulle, on établit que :

$$\begin{aligned} \sum_{i, \sigma, \sigma'} \Phi_i^*(\vec{r}, \sigma, \tau) \langle \sigma | \vec{\sigma} | \sigma \rangle \Phi_i(\vec{r}, \sigma', \tau) &= \frac{1}{2} \rho_\tau(\vec{r}) \sum_{\sigma} \langle \sigma | \vec{\sigma} | \sigma \rangle \\ &= \frac{1}{2} \rho_\tau(\vec{r}) \text{Tr}(\vec{\sigma}) = 0 \end{aligned} \quad (3.13)$$

En présence d'une interaction à deux corps v_{12} , l'état à deux particules :

$$\begin{aligned} |ij\rangle_{antisym} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \{|ij\rangle - |ji\rangle\} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (1 - P) |ij\rangle \end{aligned} \quad (3.14)$$

est utilisé, où P est l'opérateur d'échange. Puisque $v_{ij} = v_{ji}$ ($[p, v_{ij}] = 0$) alors, il suffit de calculer les éléments de matrice de $\frac{1}{2} \sum_{i,j} v_{ij}$ sur un déterminant de Slater :

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \frac{1}{2} \sum_{i,j} v_{ij} | \Psi \rangle &= \frac{1}{2} \sum_{i,j} \langle ij | v_{12} | ij \rangle_{antisym} \\ &= \frac{1}{4} \sum_{i,j} \langle ij | (1 - P) v_{12} (1 - P) | ij \rangle \\ &= \frac{1}{4} \sum_{i,j} \langle ij | (1 - P)^2 v_{12} | ij \rangle \\ &= \frac{1}{4} \sum_{i,j} \langle ij | (1 - 2P + 1) v_{12} | ij \rangle \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i,j} \langle ij | (1 - P) v_{12} | ij \rangle \end{aligned} \quad (3.15)$$

où

$$P = P_r P_\sigma P_\tau \quad (3.16)$$

$$P_\sigma = \frac{1}{2} (1 + \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2) \quad (3.17)$$

La conservation de la parité et le traitement séparé des systèmes neutron et proton impliquent que relation (2.61) :

$$\frac{1}{2} \langle \Psi | \sum_{i,j} v_{ij} | \Psi \rangle = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \langle ij | v_{12} (1 - P_\sigma \delta_{\tau,\tau'}) | ij \rangle \quad (3.18)$$

Calculons maintenant la contribution des différents termes de l'interaction de Skyrme à la densité d'énergie.

Pour le premier terme en t_0 , on a :

$$\int H_0(\vec{r}) d\vec{r} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \langle ij | t_0 (1 + x_0 P_\sigma) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) (1 - P_\sigma \delta_{\tau,\tau'}) | ij \rangle \quad (3.19)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} t_0 (1 + x_0 P_\sigma) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) (1 - P_\sigma \delta_{\tau,\tau'}) &= \frac{1}{2} \{ t_0 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) + t_0 x_0 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) P_\sigma \\ &\quad - t_0 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) P_\sigma \delta_{\tau,\tau'} - t_0 x_0 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) P_\sigma^2 \delta_{\tau,\tau'} \} \\ &= \frac{1}{2} \{ t_0 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) + \frac{t_0 x_0}{2} \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \\ &\quad + \frac{t_0 x_0}{2} \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 \\ &\quad - \frac{t_0}{2} \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \delta_{\tau,\tau'} - \frac{t_0}{2} \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \delta_{\tau,\tau'} \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 \\ &\quad - t_0 x_0 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \delta_{\tau,\tau'} \} \\ &= \frac{t_0}{4} (2 + x_0) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) - \frac{t_0}{4} (1 + 2x_0) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \delta_{\tau,\tau'} \\ &\quad + \frac{t_0 x_0}{4} \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 - \frac{t_0}{4} \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \delta_{\tau,\tau'} \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 \end{aligned} \quad (3.20)$$

La substitution du premier terme de (3.20) dans (3.19) conduit à :

$$\begin{aligned}
& \sum_{i,j} \langle i, j | \frac{t_0}{4} (2 + x_0) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) | i, j \rangle \\
&= \frac{t_0}{4} (2 + x_0) \sum_{i,j,\sigma,\sigma',\tau,\tau'} \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \Phi_i^*(\vec{r}_1, \sigma, \tau) \\
&\quad \Phi_j^*(\vec{r}_2, \sigma', \tau') \Phi_i(\vec{r}_1, \sigma, \tau) \Phi_j(\vec{r}_2, \sigma', \tau') \\
&= \frac{t_0}{4} (2 + x_0) \sum_{i,j,\sigma,\sigma',\tau,\tau'} \int d\vec{r} \Phi_i^*(\vec{r}, \sigma, \tau) \Phi_i(\vec{r}, \sigma, \tau) \Phi_j^*(\vec{r}, \sigma', \tau') \Phi_j(\vec{r}, \sigma', \tau') \\
&= \frac{t_0}{4} (2 + x_0) \int d\vec{r} \sum_{i,\sigma,\tau} |\Phi_i(\vec{r}, \sigma, \tau)|^2 \sum_{j,\sigma',\tau'} |\Phi_j(\vec{r}, \sigma', \tau')|^2 \\
&= \frac{t_0}{4} (2 + x_0) \int d\vec{r} \rho^2(\vec{r}) \tag{3.21}
\end{aligned}$$

La substitution du deuxième terme de (3.20) dans (3.19) conduit à :

$$\begin{aligned}
& \sum_{i,j} \langle i, j | -\frac{t_0}{4} (1 + 2x_0) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \delta_{\tau,\tau'} | i, j \rangle \\
&= -\frac{t_0}{4} (1 + 2x_0) \sum_{i,j} \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \delta_{\tau,\tau'} \Phi_i^*(\vec{r}_1, \sigma, \tau) \\
&\quad \Phi_j^*(\vec{r}_2, \sigma', \tau') \Phi_i(\vec{r}_1, \sigma, \tau) \Phi_j(\vec{r}_2, \sigma', \tau') \\
&= -\frac{t_0}{4} (1 + 2x_0) \int d\vec{r} \sum_{\tau} \sum_{i,\sigma} \sum_{j,\sigma'} |\Phi_i(\vec{r}, \sigma, \tau)|^2 |\Phi_j(\vec{r}, \sigma', \tau')|^2 \\
&= -\frac{t_0}{4} (1 + 2x_0) \int d\vec{r} \sum_{\tau} \rho_{\tau}^2(\vec{r}) \\
&= -\frac{t_0}{4} (1 + 2x_0) \int d\vec{r} \{ \rho_n^2(\vec{r}) + \rho_p^2(\vec{r}) \} \tag{3.22}
\end{aligned}$$

Compte tenu de (3.13), on montre que l'élément de matrice du troisième terme de (3.20) est donné par :

$$\sum_{i,j} \langle i, j | \frac{t_0 x_0}{4} \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 | i, j \rangle = 0 \tag{3.23}$$

de même

$$\sum_{i,j} \langle i, j | -\frac{t_0}{4} \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \delta_{\tau,\tau'} \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 | i, j \rangle = 0 \tag{3.24}$$

Ainsi, on obtient :

$$\int H_0(\vec{r}) d\vec{r} = \int d\vec{r} \left[\frac{t_0}{4} (2 + x_0) \rho^2(\vec{r}) - \frac{t_0}{4} (1 + 2x_0) \{ \rho_n^2(\vec{r}) + \rho_p^2(\vec{r}) \} \right] \tag{3.25}$$

D'où

$$H_0(\vec{r}) = \frac{t_0}{4} (2 + x_0) \rho^2(\vec{r}) - \frac{t_0}{4} (1 + 2x_0) \{ \rho_n^2(\vec{r}) + \rho_p^2(\vec{r}) \} \quad (3.26)$$

Calculons maintenant les éléments de matrices du deuxième terme (en t_1) :

$$\int H_1(\vec{r}) d\vec{r} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \langle ij | \frac{t_1}{2} (1 + x_1 P_\sigma) \{ \vec{K}_{12}^2 + \overleftarrow{K}_{12}^2 \} \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) (1 - P_\sigma \delta_{\tau,\tau'}) |ij\rangle \quad (3.27)$$

Sachant que :

$$\vec{K}_{12}^2 = \frac{-1}{4} \left(\vec{\nabla}_1^2 + \vec{\nabla}_2^2 - 2\vec{\nabla}_1 \vec{\nabla}_2 \right), \quad (3.28)$$

on montre que :

$$\begin{aligned} \int H_1(\vec{r}) d\vec{r} &= \frac{1}{4} \sum_{i,j} \langle ij | -\frac{t_1}{4} (1 + x_1 P_\sigma) (1 - P_\sigma \delta_{\tau,\tau'}) \\ &\quad \left(\vec{\nabla}_1^2 + \vec{\nabla}_2^2 - 2\vec{\nabla}_1 \vec{\nabla}_2 + \overleftarrow{\nabla}_1^2 + \overleftarrow{\nabla}_2^2 - 2\overleftarrow{\nabla}_1 \overleftarrow{\nabla}_2 \right) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) |ij\rangle \end{aligned} \quad (3.29)$$

ou encore :

$$\begin{aligned} \int H_1(\vec{r}) d\vec{r} &= \frac{1}{4} \sum_{i,j} \langle ij | -\frac{t_1}{4} \left\{ \left(1 + \frac{x_1}{2} \right) - \left(\frac{1}{2} + x_1 \right) \delta_{\tau,\tau'} + \frac{1}{2} (x_1 - 1) \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 \right\} \\ &\quad \left(\vec{\nabla}_1^2 + \vec{\nabla}_2^2 + \overleftarrow{\nabla}_1^2 + \overleftarrow{\nabla}_2^2 - 2\vec{\nabla}_1 \vec{\nabla}_2 - 2\overleftarrow{\nabla}_1 \overleftarrow{\nabla}_2 \right) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) |ij\rangle \end{aligned} \quad (3.30)$$

Le premier terme dans (3.30) s'écrit :

$$\begin{aligned} &\frac{t_1}{4} \left(1 + \frac{x_1}{2} \right) \sum_{i,j} \langle i, j | \vec{\nabla}_1^2 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) |i, j\rangle \\ &= \frac{t_1}{4} \left(1 + \frac{x_1}{2} \right) \sum_{i,j} \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \\ &\quad \Phi_i^*(\vec{r}_1, \sigma, \tau) \Phi_j^*(\vec{r}_2, \sigma', \tau') \vec{\nabla}_1^2 \Phi_i(\vec{r}_1, \sigma, \tau) \Phi_j(\vec{r}_2, \sigma', \tau) \\ &= \frac{t_1}{4} \left(1 + \frac{x_1}{2} \right) \int d\vec{r} \sum_{i,\sigma,\tau} \Phi_i^*(\vec{r}, \sigma, \tau) \vec{\nabla}^2 \Phi_i(\vec{r}, \sigma, \tau) \\ &\quad \sum_{j,\sigma',\tau'} \Phi_j^*(\vec{r}, \sigma', \tau') \Phi_j(\vec{r}, \sigma', \tau) \\ &= \frac{t_1}{4} \left(1 + \frac{x_1}{2} \right) \int d\vec{r} \sum_{i,\sigma,\tau} \Phi_i^*(\vec{r}, \sigma, \tau) \vec{\nabla}^2 \Phi_i(\vec{r}, \sigma, \tau) \rho(\vec{r}) \end{aligned} \quad (3.31)$$

or

$$\begin{aligned}
\vec{\nabla}^2 \rho(\vec{r}) &= \sum_{i,\sigma,\tau} \vec{\nabla} \vec{\nabla} \{ \Phi_i^*(\vec{r}, \sigma, \tau) \Phi_i(\vec{r}, \sigma, \tau) \} \\
&= \sum_{i,\sigma,\tau} \vec{\nabla} \left\{ \left(\vec{\nabla} \Phi_i^*(\vec{r}, \sigma, \tau) \right) \Phi_i(\vec{r}, \sigma, \tau) + \Phi_i^*(\vec{r}, \sigma, \tau) \left(\vec{\nabla} \Phi_i(\vec{r}, \sigma, \tau) \right) \right\} \\
&= \sum_{i,\sigma,\tau} \left\{ \left(\vec{\nabla}^2 \Phi_i^*(\vec{r}, \sigma, \tau) \right) \Phi_i(\vec{r}, \sigma, \tau) + \left(\vec{\nabla} \Phi_i^*(\vec{r}, \sigma, \tau) \right) \left(\vec{\nabla} \Phi_i(\vec{r}, \sigma, \tau) \right) \right. \\
&\quad \left. + \left(\vec{\nabla} \Phi_i^*(\vec{r}, \sigma, \tau) \right) \left(\vec{\nabla} \Phi_i(\vec{r}, \sigma, \tau) \right) + \Phi_i^*(\vec{r}, \sigma, \tau) \left(\vec{\nabla}^2 \Phi_i(\vec{r}, \sigma, \tau) \right) \right\} \quad (3.32)
\end{aligned}$$

En posant :

$$t_\tau(\vec{r}) = \sum_{i,\sigma} \vec{\nabla} \Phi_i^*(\vec{r}, \sigma, \tau) \vec{\nabla} \Phi_i(\vec{r}, \sigma, \tau) \quad (3.33)$$

$$t(\vec{r}) = \sum_{\tau} t_\tau(\vec{r}) \quad (3.34)$$

et sachant que :

$$\left(\vec{\nabla}^2 \Phi_i^*(\vec{r}, \sigma, \tau) \right) \Phi_i(\vec{r}, \sigma, \tau) = \Phi_i^*(\vec{r}, \sigma, \tau) \left(\vec{\nabla}^2 \Phi_i(\vec{r}, \sigma, \tau) \right) \quad (3.35)$$

on établit que :

$$\vec{\nabla}^2 \rho(\vec{r}) = 2\Phi_i^*(\vec{r}, \sigma, \tau) \vec{\nabla}^2 \Phi_i(\vec{r}, \sigma, \tau) + 2t(\vec{r}) \quad (3.36)$$

d'où

$$\Phi_i^*(\vec{r}, \sigma, \tau) \vec{\nabla}^2 \Phi_i(\vec{r}, \sigma, \tau) = -t(\vec{r}) + \frac{1}{2} \vec{\nabla}^2 \rho(\vec{r}) \quad (3.37)$$

et

$$\begin{aligned}
&\frac{t_1}{4} \left(1 + \frac{x_1}{2} \right) \sum_{i,j} \langle i, j | \vec{\nabla}_1^2 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) | i, j \rangle \\
&= \frac{t_1}{4} \left(1 + \frac{x_1}{2} \right) \int d\vec{r} \rho(\vec{r}) \left\{ -t_\tau(\vec{r}) + \frac{1}{2} \vec{\nabla}^2 \rho(\vec{r}) \right\} \quad (3.38)
\end{aligned}$$

De même, on montre que :

$$\begin{aligned} & \frac{t_1}{4} \left(1 + \frac{x_1}{2}\right) \sum_{i,j} \langle i, j | \overrightarrow{\nabla}_2^2 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) | i, j \rangle \\ &= \frac{t_1}{4} \left(1 + \frac{x_1}{2}\right) \int d\vec{r} \rho(\vec{r}) \left\{ -t(\vec{r}) + \frac{1}{2} \overrightarrow{\nabla}^2 \rho(\vec{r}) \right\}, \end{aligned} \quad (3.39)$$

que :

$$\begin{aligned} & \frac{t_1}{4} \left(1 + \frac{x_1}{2}\right) \sum_{i,j} \langle i, j | \overleftarrow{\nabla}_1^2 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) | i, j \rangle \\ &= \frac{t_1}{4} \left(1 + \frac{x_1}{2}\right) \int d\vec{r} \rho(\vec{r}) \left\{ -t(\vec{r}) + \frac{1}{2} \overrightarrow{\nabla}^2 \rho(\vec{r}) \right\} \end{aligned} \quad (3.40)$$

et que :

$$\begin{aligned} & \frac{t_1}{4} \left(1 + \frac{x_1}{2}\right) \sum_{i,j} \langle i, j | \overleftarrow{\nabla}_2^2 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) | i, j \rangle \\ &= \frac{t_1}{4} \left(1 + \frac{x_1}{2}\right) \int d\vec{r} \rho(\vec{r}) \left\{ -t(\vec{r}) + \frac{1}{2} \overrightarrow{\nabla}^2 \rho(\vec{r}) \right\} \end{aligned} \quad (3.41)$$

On en déduit également que :

$$\begin{aligned} & -\frac{t_1}{4} \left(\frac{1}{2} + x_1\right) \sum_{i,j} \langle i, j | \overrightarrow{\nabla}_1^2 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \delta_{\tau,\tau'} | i, j \rangle \\ &= -\frac{t_1}{4} \left(\frac{1}{2} + x_1\right) \sum_{i,j,\sigma,\sigma',\tau,\tau'} \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \\ & \Phi_i^*(\vec{r}_1, \sigma, \tau) \Phi_j^*(\vec{r}_2, \sigma', \tau') \overrightarrow{\nabla}_1^2 \Phi_i(\vec{r}_1, \sigma, \tau) \Phi_j(\vec{r}_2, \sigma', \tau) \delta_{\tau,\tau'} \\ &= -\frac{t_1}{4} \left(\frac{1}{2} + x_1\right) \int d\vec{r} \sum_{i,\sigma,\tau} \Phi_i^*(\vec{r}, \sigma, \tau) \overrightarrow{\nabla}^2 \Phi_i(\vec{r}, \sigma, \tau) \\ & \sum_{j,\sigma',\tau'} \Phi_j^*(\vec{r}, \sigma', \tau') \Phi_j(\vec{r}, \sigma', \tau) \delta_{\tau,\tau'} \\ &= -\frac{t_1}{4} \left(\frac{1}{2} + x_1\right) \sum_{\tau} \int d\vec{r} \left\{ -t_{\tau}(\vec{r}) + \frac{1}{2} \overrightarrow{\nabla}^2 \rho_{\tau}(\vec{r}) \right\} \rho_{\tau}(\vec{r}) \\ &= -\frac{t_1}{4} \left(\frac{1}{2} + x_1\right) \int d\vec{r} \left\{ -t_n(\vec{r}) \rho_n(\vec{r}) - t_p(\vec{r}) \rho_p(\vec{r}) \right. \\ & \left. + \frac{1}{2} \rho_n(\vec{r}) \overrightarrow{\nabla}^2 \rho_n(\vec{r}) + \frac{1}{2} \rho_p(\vec{r}) \overrightarrow{\nabla}^2 \rho_p(\vec{r}) \right\} \end{aligned} \quad (3.42)$$

de même

$$\begin{aligned}
& -\frac{t_1}{4} \left(\frac{1}{2} + x_1 \right) \sum_{i,j} \langle i, j | \overleftrightarrow{\nabla}_2^2 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \delta_{\tau, \tau'} | i, j \rangle \\
& = -\frac{t_1}{4} \left(\frac{1}{2} + x_1 \right) \sum_{i,j,\sigma,\sigma',\tau,\tau'} \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \\
& \Phi_i^*(\vec{r}_1, \sigma, \tau) \Phi_j^*(\vec{r}_2, \sigma', \tau') \overleftrightarrow{\nabla}_2^2 \Phi_i(\vec{r}_1, \sigma, \tau) \Phi_j(\vec{r}_2, \sigma', \tau) \delta_{\tau, \tau'} \\
& = -\frac{t_1}{4} \left(\frac{1}{2} + x_1 \right) \int d\vec{r} \sum_{i,\sigma,\tau} \Phi_i^*(\vec{r}, \sigma, \tau) \Phi_i(\vec{r}, \sigma, \tau) \\
& \sum_{j,\sigma',\tau'} \Phi_j^*(\vec{r}, \sigma', \tau') \overleftrightarrow{\nabla}^2 \Phi_j(\vec{r}, \sigma', \tau') \delta_{\tau, \tau'} \\
& = -\frac{t_1}{4} \left(\frac{1}{2} + x_1 \right) \sum_{\tau} \int d\vec{r} \left\{ -t_{\tau}(\vec{r}) + \frac{1}{2} \overleftrightarrow{\nabla}^2 \rho_{\tau}(\vec{r}) \right\} \rho_{\tau}(\vec{r}) \\
& = -\frac{t_1}{4} \left(\frac{1}{2} + x_1 \right) \int d\vec{r} \left\{ -t_n(\vec{r}) \rho_n(\vec{r}) - t_p(\vec{r}) \rho_p(\vec{r}) \right. \\
& \left. + \frac{1}{2} \rho_n(\vec{r}) \overleftrightarrow{\nabla}^2 \rho_n(\vec{r}) + \frac{1}{2} \rho_p(\vec{r}) \overleftrightarrow{\nabla}^2 \rho_p(\vec{r}) \right\} \tag{3.43}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{t_1}{4} \left(\frac{1}{2} + x_1 \right) \sum_{i,j} \langle i, j | \overleftarrow{\nabla}_1^2 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \delta_{\tau, \tau'} | i, j \rangle \\
& = -\frac{t_1}{4} \left(\frac{1}{2} + x_1 \right) \int d\vec{r} \left\{ -t_n(\vec{r}) \rho_n(\vec{r}) - t_p(\vec{r}) \rho_p(\vec{r}) \right. \\
& \left. + \frac{1}{2} \rho_n(\vec{r}) \overleftrightarrow{\nabla}^2 \rho_n(\vec{r}) + \frac{1}{2} \rho_p(\vec{r}) \overleftrightarrow{\nabla}^2 \rho_p(\vec{r}) \right\} \tag{3.44}
\end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned}
& -\frac{t_1}{4} \left(\frac{1}{2} + x_1 \right) \sum_{i,j,\sigma,\sigma',\tau,\tau'} \langle i, j | \overleftrightarrow{\nabla}_2^2 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \delta_{\tau, \tau'} | i, j \rangle \\
& = -\frac{t_1}{4} \left(\frac{1}{2} + x_1 \right) \int d\vec{r} \left\{ -t_n(\vec{r}) \rho_n(\vec{r}) - t_p(\vec{r}) \rho_p(\vec{r}) \right. \\
& \left. + \frac{1}{2} \rho_n(\vec{r}) \overleftrightarrow{\nabla}^2 \rho_n(\vec{r}) + \frac{1}{2} \rho_p(\vec{r}) \overleftrightarrow{\nabla}^2 \rho_p(\vec{r}) \right\} \tag{3.45}
\end{aligned}$$

Par ailleurs,

$$\begin{aligned}
& \frac{t_1}{4} \left(1 + \frac{x_1}{2}\right) \sum_{i,j} \langle i, j | -2 \overrightarrow{\nabla}_1 \overrightarrow{\nabla}_2 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) | i, j \rangle \\
&= \frac{-t_1}{2} \left(1 + \frac{x_1}{2}\right) \int d\vec{r} \sum_{i,\sigma,\tau} \Phi_i^*(\vec{r}, \sigma, \tau) \overrightarrow{\nabla} \Phi_i(\vec{r}, \sigma, \tau) \\
& \quad \sum_{j,\sigma',\tau'} \Phi_j^*(\vec{r}, \sigma', \tau') \overrightarrow{\nabla} \Phi_j(\vec{r}, \sigma', \tau') \\
&= \frac{-t_1}{8} \left(1 + \frac{x_1}{2}\right) \int d\vec{r} \left(\overrightarrow{\nabla} \rho(\vec{r})\right)^2
\end{aligned} \tag{3.46}$$

De même, on montre que :

$$\begin{aligned}
& \frac{t_1}{4} \left(1 + \frac{x_1}{2}\right) \sum_{i,j} \langle i, j | -2 \overleftarrow{\nabla}_1 \overleftarrow{\nabla}_2 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) | i, j \rangle \\
&= \frac{-t_1}{2} \left(1 + \frac{x_1}{2}\right) \int d\vec{r} \sum_{i,\sigma,\tau} \Phi_i^*(\vec{r}, \sigma, \tau) \overleftarrow{\nabla} \Phi_i(\vec{r}, \sigma, \tau) \\
& \quad \sum_{j,\sigma',\tau'} \Phi_j^*(\vec{r}, \sigma', \tau') \overleftarrow{\nabla} \Phi_j(\vec{r}, \sigma', \tau') \\
&= \frac{-t_1}{2} \left(1 + \frac{x_1}{2}\right) \int d\vec{r} \sum_{i,\sigma,\tau} \left(\overleftarrow{\nabla} \Phi_i(\vec{r}, \sigma, \tau)\right)^* \Phi_i(\vec{r}, \sigma, \tau) \\
& \quad \sum_{j,\sigma',\tau'} \left(\overleftarrow{\nabla} \Phi_j(\vec{r}, \sigma', \tau')\right)^* \Phi_j(\vec{r}, \sigma', \tau') \\
&= \frac{-t_1}{2} \left(1 + \frac{x_1}{2}\right) \int d\vec{r} \frac{1}{2} \overleftarrow{\nabla} \rho(\vec{r}) \frac{1}{2} \overleftarrow{\nabla} \rho(\vec{r}) \\
&= \frac{-t_1}{8} \left(1 + \frac{x_1}{2}\right) \int d\vec{r} \left(\overleftarrow{\nabla} \rho(\vec{r})\right)^2
\end{aligned} \tag{3.47}$$

On en déduit alors que :

$$\begin{aligned}
& -\frac{t_1}{4} \left(\frac{1}{2} + x_1 \right) \sum_{i,j} \langle i, j | -2 \overrightarrow{\nabla}_1 \overrightarrow{\nabla}_2 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \delta_{\tau, \tau'} | i, j \rangle \\
& = \frac{t_1}{2} \left(\frac{1}{2} + x_1 \right) \sum_{i,j,\sigma,\sigma',\tau,\tau'} \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \\
& \Phi_i^*(\vec{r}_1, \sigma, \tau) \overrightarrow{\nabla}_1 \Phi_i(\vec{r}_1, \sigma, \tau) \Phi_j^*(\vec{r}_2, \sigma', \tau) \overrightarrow{\nabla}_2 \Phi_j(\vec{r}_2, \sigma', \tau) \delta_{\tau, \tau'} \\
& = \frac{t_1}{2} \left(\frac{1}{2} + x_1 \right) \int d\vec{r} \sum_{\tau} \frac{1}{2} \overrightarrow{\nabla} \rho_{\tau}(\vec{r}) \frac{1}{2} \overrightarrow{\nabla} \rho_{\tau}(\vec{r}) \\
& = \frac{t_1}{2} \left(\frac{1}{2} + x_1 \right) \int d\vec{r} \frac{1}{4} \sum_{\tau} \left(\overrightarrow{\nabla} \rho_{\tau}(\vec{r}) \right)^2 \\
& = \frac{t_1}{8} \left(\frac{1}{2} + x_1 \right) \int d\vec{r} \left\{ \left(\overrightarrow{\nabla} \rho_n(\vec{r}) \right)^2 + \left(\overrightarrow{\nabla} \rho_p(\vec{r}) \right)^2 \right\} \tag{3.48}
\end{aligned}$$

et que :

$$\begin{aligned}
& -\frac{t_1}{4} \left(\frac{1}{2} + x_1 \right) \sum_{i,j} \langle i, j | -2 \overleftarrow{\nabla}_1 \overleftarrow{\nabla}_2 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \delta_{\tau, \tau'} | i, j \rangle \\
& = \frac{t_1}{2} \left(\frac{1}{2} + x_1 \right) \sum_{i,j,\sigma,\sigma',\tau,\tau'} \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \\
& \Phi_i^*(\vec{r}_1, \sigma, \tau) \Phi_j^*(\vec{r}_2, \sigma', \tau) \overleftarrow{\nabla}_1 \overleftarrow{\nabla}_2 \Phi_i(\vec{r}_1, \sigma, \tau) \Phi_j(\vec{r}_2, \sigma', \tau) \delta_{\tau, \tau'} \\
& = \frac{t_1}{2} \left(\frac{1}{2} + x_1 \right) \int d\vec{r} \sum_{i,\sigma,\tau} \left(\overrightarrow{\nabla} \Phi_i(\vec{r}, \sigma, \tau) \right)^* \Phi_i(\vec{r}, \sigma, \tau) \\
& \sum_{j,\sigma',\tau'} \left(\overrightarrow{\nabla} \Phi_j(\vec{r}, \sigma', \tau) \right)^* \Phi_j(\vec{r}, \sigma', \tau) \delta_{\tau, \tau'} \\
& = \frac{t_1}{2} \left(\frac{1}{2} + x_1 \right) \int d\vec{r} \frac{1}{4} \sum_{\tau} \left(\overrightarrow{\nabla} \rho_{\tau}(\vec{r}) \right)^2 \\
& = \frac{t_1}{8} \left(\frac{1}{2} + x_1 \right) \int d\vec{r} \left\{ \left(\overrightarrow{\nabla} \rho_n(\vec{r}) \right)^2 + \left(\overrightarrow{\nabla} \rho_p(\vec{r}) \right)^2 \right\} \tag{3.49}
\end{aligned}$$

En utilisant l'identité suivante [2] :

$$\begin{aligned}
\left(\overrightarrow{\nabla}_1 \overrightarrow{\nabla}_2 \right) (\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2) & = \frac{1}{3} \left(\overrightarrow{\nabla}_1 \vec{\sigma}_1 \right) \left(\overrightarrow{\nabla}_2 \vec{\sigma}_2 \right) + \frac{1}{2} \left(\overrightarrow{\nabla}_1 \times \vec{\sigma}_1 \right) \left(\overrightarrow{\nabla}_2 \times \vec{\sigma}_2 \right) \\
& \quad + \left[\overrightarrow{\nabla}_1 \times \vec{\sigma}_1 \right]^{(2)} \left[\overrightarrow{\nabla}_2 \times \vec{\sigma}_2 \right]^{(2)} \tag{3.50}
\end{aligned}$$

et sachant que dans le cas de la symétrie axiale et la symétrie par renversement du temps,

considérées dans le présent travail, on a :

$$\sum_{i,\sigma,\tau} \Phi_i^* (\vec{r}, \sigma, \tau) \left(\vec{\nabla} \vec{\sigma} \right) \Phi_i (\vec{r}, \sigma, \tau) = \sum_{i,\sigma,\tau} \Phi_i^* (\vec{r}, \sigma, \tau) \left[\vec{\nabla} \times \vec{\sigma} \right]^{(2)} \Phi_i (\vec{r}, \sigma, \tau) = 0 \quad (3.51)$$

On montre que :

$$\begin{aligned} & \frac{t_1}{2} (x_1 - 1) \sum_{i,j} \langle i, j | \vec{\nabla}_1 \vec{\nabla}_2 \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 \delta (\vec{r}_1 - \vec{r}_2) | i, j \rangle \\ &= \frac{t_1}{4} (x_1 - 1) \sum_{i,j,\sigma,\sigma',\tau,\tau'} \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \delta (\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \Phi_i^* (\vec{r}_1, \sigma, \tau) \left(\vec{\nabla}_1 \times \vec{\sigma}_1 \right) \Phi_i (\vec{r}_1, \sigma, \tau) \\ & \Phi_j^* (\vec{r}_2, \sigma', \tau') \left(\vec{\nabla}_2 \times \vec{\sigma}_2 \right) \Phi_j (\vec{r}_2, \sigma', \tau') \\ &= -\frac{t_1}{4} (x_1 - 1) \int \vec{J}^2 d\vec{r} \end{aligned} \quad (3.52)$$

où

$$\vec{J} = -i \sum_{i,\sigma,\tau} \Phi_i^* (\vec{r}, \sigma, \tau) \left(\vec{\nabla} \times \vec{\sigma} \right) \Phi_i (\vec{r}, \sigma, \tau) \quad (3.53)$$

De même :

$$\begin{aligned} & \frac{t_1}{2} (x_1 - 1) \sum_{i,j} \langle i, j | \overleftarrow{\nabla}_1 \overleftarrow{\nabla}_2 \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 \delta (\vec{r}_1 - \vec{r}_2) | i, j \rangle \\ &= -\frac{t_1}{4} (x_1 - 1) \int \vec{J}^2 d\vec{r} \end{aligned} \quad (3.54)$$

et

$$\begin{aligned} & - \left(\frac{1}{2} + x_1 \right) \sum_{i,j} \langle i, j | \vec{\nabla}_1 \vec{\nabla}_2 \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 \delta (\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \delta_{\tau,\tau'} | i, j \rangle \\ &= - \left(\frac{1}{2} + x_1 \right) \sum_{i,j} \langle i, j | \overleftarrow{\nabla}_1 \overleftarrow{\nabla}_2 \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 \delta (\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \delta_{\tau,\tau'} | i, j \rangle \\ &= \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + x_1 \right) \int \left(\vec{J}_n^2 + \vec{J}_p^2 \right) d\vec{r} \end{aligned} \quad (3.55)$$

Tout calcul fait, le terme en t_1 s'écrit :

$$\begin{aligned}
\int H_1(\vec{r}) d\vec{r} &= \frac{1}{16}t_1 \left(1 + \frac{x_1}{2}\right) \int d\vec{r} \left[4t\rho - 2\rho\vec{\nabla}^2\rho + (\vec{\nabla}\rho)^2\right] \\
&\quad - \frac{1}{16}t_1 \left(\frac{1}{2} + x_1\right) \int d\vec{r} \{4t_n\rho_n + 4t_p\rho_p - 2\rho_n\vec{\nabla}^2\rho_n \\
&\quad - 2\rho_p\vec{\nabla}^2\rho_p + (\vec{\nabla}\rho_n)^2 + (\vec{\nabla}\rho_p)^2\} \\
&\quad + \frac{1}{16}t_1 \int d\vec{r} \left[-x_1\vec{J}^2 + \vec{J}_n^2 + \vec{J}_p^2\right]
\end{aligned} \tag{3.56}$$

d'où :

$$\begin{aligned}
H_1(\vec{r}) &= \frac{1}{16}t_1 \left(1 + \frac{x_1}{2}\right) \left[4t(\vec{r})\rho(\vec{r}) - 3\rho(\vec{r})\vec{\nabla}^2\rho(\vec{r})\right] \\
&\quad - \frac{1}{16}t_1 \left(\frac{1}{2} + x_1\right) \{4t_n(\vec{r})\rho_n(\vec{r}) + 4t_p(\vec{r})\rho_p(\vec{r}) \\
&\quad - 3\rho_n(\vec{r})\vec{\nabla}^2\rho_n(\vec{r}) - 3\rho_p(\vec{r})\vec{\nabla}^2\rho_p(\vec{r})\} \\
&\quad + \frac{1}{16}t_1 \left[-x_1\vec{J}^2 + \vec{J}_n^2 + \vec{J}_p^2\right]
\end{aligned} \tag{3.57}$$

Pour le terme en t_2 :

$$t_2(1 + x_2P_\sigma)\overleftarrow{K}_{12}\delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)\overrightarrow{K}_{12} \tag{3.58}$$

remarquons que :

$$(1 + x_2P_\sigma)(1 - P_\sigma\delta_{\tau,\tau'}) = 1 + \frac{x_2}{2} - \left(\frac{1}{2} + x_2\right)\delta_{\tau,\tau'} + \frac{1}{2}(x_2 - 1)\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 \tag{3.59}$$

$$\overleftarrow{K}_{12}\overrightarrow{K}_{12} = \frac{1}{4}\left(\overleftarrow{\nabla}_1\overrightarrow{\nabla}_1 - \overleftarrow{\nabla}_1\overrightarrow{\nabla}_2 - \overleftarrow{\nabla}_2\overrightarrow{\nabla}_1 + \overleftarrow{\nabla}_2\overrightarrow{\nabla}_2\right) \tag{3.60}$$

Nous avons alors à calculer :

$$\begin{aligned}
& \frac{t_2}{4} \left(1 + \frac{x_2}{2}\right) \sum_{i,j} \langle i, j | \overleftarrow{\nabla}_1 \overrightarrow{\nabla}_1 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) | i, j \rangle \\
&= \frac{t_2}{4} \left(1 + \frac{x_2}{2}\right) \sum_{i,j,\sigma,\sigma',\tau,\tau'} \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \\
& \quad \left(\overrightarrow{\nabla} \Phi_i(\vec{r}, \sigma, \tau) \right)^* \Phi_j^*(\vec{r}_2, \sigma', \tau) \left(\overrightarrow{\nabla} \Phi_i(\vec{r}, \sigma, \tau) \right) \Phi_j(\vec{r}_2, \sigma', \tau) \\
&= \frac{t_2}{4} \left(1 + \frac{x_2}{2}\right) \sum_{i,j,\sigma,\sigma',\tau,\tau'} \int d\vec{r} \left| \overrightarrow{\nabla} \Phi_i(\vec{r}, \sigma, \tau) \right|^2 \left| \Phi_j(\vec{r}, \sigma', \tau) \right|^2 \\
&= \frac{t_2}{4} \left(1 + \frac{x_2}{2}\right) \int d\vec{r} t(\vec{r}) \rho(\vec{r})
\end{aligned} \tag{3.61}$$

De même :

$$\begin{aligned}
& \frac{t_2}{4} \left(1 + \frac{x_2}{2}\right) \sum_{i,j} \langle i, j | \overleftarrow{\nabla}_2 \overrightarrow{\nabla}_2 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) | i, j \rangle \\
&= \frac{t_2}{4} \left(1 + \frac{x_2}{2}\right) \int d\vec{r} t(\vec{r}) \rho(\vec{r})
\end{aligned} \tag{3.62}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{t_2}{4} \left(1 + \frac{x_2}{2}\right) \sum_{i,j} \langle i, j | -\overleftarrow{\nabla}_1 \overrightarrow{\nabla}_2 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) | i, j \rangle \\
&= -\frac{t_2}{4} \left(1 + \frac{x_2}{2}\right) \sum_{i,j,\sigma,\sigma',\tau,\tau'} \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \\
& \quad \left(\overrightarrow{\nabla}_1 \Phi_i(\vec{r}_1, \sigma, \tau) \right)^* \Phi_j^*(\vec{r}_2, \sigma', \tau) \Phi_i(\vec{r}_1, \sigma, \tau) \left(\overrightarrow{\nabla}_2 \Phi_j(\vec{r}_2, \sigma', \tau) \right) \\
&= -\frac{t_2}{4} \left(1 + \frac{x_2}{2}\right) \sum_{i,j,\sigma,\sigma',\tau,\tau'} \int d\vec{r} \frac{1}{2} \overrightarrow{\nabla} \rho(\vec{r}) \frac{1}{2} \overrightarrow{\nabla} \rho(\vec{r}) \\
&= -\frac{t_2}{16} \left(1 + \frac{x_2}{2}\right) \int d\vec{r} \left(\overrightarrow{\nabla} \rho(\vec{r}) \right)^2
\end{aligned} \tag{3.63}$$

De même :

$$\begin{aligned}
& \frac{t_2}{4} \left(1 + \frac{x_2}{2}\right) \sum_{i,j} \langle i, j | -\overleftarrow{\nabla}_2 \overrightarrow{\nabla}_1 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) | i, j \rangle \\
&= -\frac{t_2}{16} \left(1 + \frac{x_2}{2}\right) \int d\vec{r} \left(\overrightarrow{\nabla} \rho(\vec{r}) \right)^2,
\end{aligned} \tag{3.64}$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{t_2}{4} \left(\frac{1}{2} + x_2 \right) \sum_{i,j} \langle i, j | \overleftarrow{\nabla}_1 \overrightarrow{\nabla}_1 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \delta_{\tau, \tau'} | i, j \rangle \\
& = -\frac{t_2}{4} \left(\frac{1}{2} + x_2 \right) \sum_{i,j,\sigma,\sigma',\tau,\tau'} \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \\
& \quad \left(\overrightarrow{\nabla}_1 \Phi_i(\vec{r}_1, \sigma, \tau) \right)^* \Phi_j^*(\vec{r}_2, \sigma', \tau') \left(\overrightarrow{\nabla}_1 \Phi_i(\vec{r}_1, \sigma, \tau) \right) \Phi_j(\vec{r}_2, \sigma', \tau') \delta_{\tau, \tau'} \\
& = -\frac{t_2}{4} \left(\frac{1}{2} + x_2 \right) \sum_{\tau} \sum_{i,j,\sigma,\sigma'} \int d\vec{r} \left| \overrightarrow{\nabla} \Phi_i(\vec{r}, \sigma, \tau) \right|^2 \left| \Phi_j(\vec{r}, \sigma', \tau) \right|^2 \\
& = -\frac{t_2}{4} \left(\frac{1}{2} + x_2 \right) \int d\vec{r} \left\{ t_n(\vec{r}) \rho_n(\vec{r}) + t_p(\vec{r}) \rho_p(\vec{r}) \right\}, \tag{3.65}
\end{aligned}$$

De même :

$$\begin{aligned}
& -\frac{t_2}{4} \left(\frac{1}{2} + x_2 \right) \sum_{i,j} \langle i, j | \overleftarrow{\nabla}_2 \overrightarrow{\nabla}_2 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \delta_{\tau, \tau'} | i, j \rangle \\
& = -\frac{t_2}{4} \left(\frac{1}{2} + x_2 \right) \int d\vec{r} \left\{ t_n(\vec{r}) \rho_n(\vec{r}) + t_p(\vec{r}) \rho_p(\vec{r}) \right\}, \tag{3.66}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{t_2}{4} \left(\frac{1}{2} + x_2 \right) \sum_{i,j} \langle i, j | -\overleftarrow{\nabla}_1 \overrightarrow{\nabla}_2 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \delta_{\tau, \tau'} | i, j \rangle \\
& = \frac{t_2}{4} \left(\frac{1}{2} + x_2 \right) \sum_{i,j,\sigma,\sigma',\tau,\tau'} \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \\
& \quad \left(\overrightarrow{\nabla}_1 \Phi_i(\vec{r}_1, \sigma, \tau) \right)^* \Phi_j^*(\vec{r}_2, \sigma', \tau') \Phi_i(\vec{r}_1, \sigma, \tau) \left(\overrightarrow{\nabla}_2 \Phi_j(\vec{r}_2, \sigma', \tau') \right) \\
& = \frac{t_2}{4} \left(\frac{1}{2} + x_2 \right) \sum_{\tau} \int d\vec{r} \frac{1}{2} \overrightarrow{\nabla} \rho_{\tau}(\vec{r}) \frac{1}{2} \overrightarrow{\nabla} \rho_{\tau}(\vec{r}) \\
& = \frac{t_2}{16} \left(\frac{1}{2} + x_2 \right) \int d\vec{r} \left\{ \left(\overrightarrow{\nabla} \rho_n(\vec{r}) \right)^2 + \left(\overrightarrow{\nabla} \rho_p(\vec{r}) \right)^2 \right\}, \tag{3.67}
\end{aligned}$$

De même :

$$\begin{aligned}
& -\frac{t_2}{4} \left(\frac{1}{2} + x_2 \right) \sum_{i,j} \langle i, j | -\overleftarrow{\nabla}_2 \overrightarrow{\nabla}_1 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \delta_{\tau, \tau'} | i, j \rangle \\
& = \frac{t_2}{16} \left(\frac{1}{2} + x_2 \right) \int d\vec{r} \left\{ \left(\overrightarrow{\nabla} \rho_n(\vec{r}) \right)^2 + \left(\overrightarrow{\nabla} \rho_p(\vec{r}) \right)^2 \right\}, \tag{3.68}
\end{aligned}$$

On montre ainsi que :

$$\begin{aligned} & \frac{t_2}{8} (x_2 - 1) \sum_{i,j} \langle i, j | \overleftarrow{\nabla}_1 \overrightarrow{\nabla}_2 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 | i, j \rangle \\ &= \frac{t_2}{16} (x_2 - 1) \int d\vec{r} \vec{J}^2 \end{aligned} \quad (3.69)$$

et que :

$$\begin{aligned} & \frac{t_2}{8} (x_2 - 1) \sum_{i,j} \langle i, j | \overleftarrow{\nabla}_1 \overrightarrow{\nabla}_1 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 | i, j \rangle \\ &= \frac{t_2}{8} (x_2 - 1) \sum_{i,j} \langle i, j | \overleftarrow{\nabla}_1 \overrightarrow{\nabla}_1 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 \delta_{\tau, \tau'} | i, j \rangle \\ &= 0 \end{aligned} \quad (3.70)$$

Donc :

$$\begin{aligned} \int H_2(\vec{r}) d\vec{r} &= \frac{1}{2} \sum_{i,j} \langle i, j | t_2 (1 + x_2 P_\sigma) \overleftarrow{K}_{12} \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \overrightarrow{K}_{12} | i, j \rangle \\ &= \frac{t_2}{8} \left(1 + \frac{x_2}{2}\right) \int d\vec{r} \left[2t(\vec{r}) \rho(\vec{r}) - \frac{1}{2} \left(\overrightarrow{\nabla} \rho(\vec{r})\right)^2 \right] \\ &+ \frac{t_2}{8} \left(\frac{1}{2} + x_2\right) \int d\vec{r} \{ 2t_n(\vec{r}) \rho_n(\vec{r}) + 2t_p(\vec{r}) \rho_p(\vec{r}) \\ &- \frac{1}{2} \left(\overrightarrow{\nabla} \rho_n(\vec{r})\right)^2 - \frac{1}{2} \left(\overrightarrow{\nabla} \rho_p(\vec{r})\right)^2 \} \\ &- \frac{t_2}{16} \int d\vec{r} \left[x_2 \vec{J}^2 + \vec{J}_n^2 + \vec{J}_p^2 \right] \end{aligned} \quad (3.71)$$

d'où :

$$\begin{aligned} H_2(\vec{r}) &= \frac{t_2}{16} (2 + x_2) \left[2t(\vec{r}) \rho(\vec{r}) + \frac{1}{2} \rho(\vec{r}) \overrightarrow{\nabla}^2 \rho(\vec{r}) \right] \\ &+ \frac{t_2}{16} (1 + 2x_2) \{ 2t_n(\vec{r}) \rho_n(\vec{r}) + 2t_p(\vec{r}) \rho_p(\vec{r}) \\ &+ \frac{1}{2} \rho_n(\vec{r}) \overrightarrow{\nabla}^2 \rho_n(\vec{r}) + \frac{1}{2} \rho_p(\vec{r}) \overrightarrow{\nabla}^2 \rho_p(\vec{r}) \} \\ &- \frac{t_2}{16} \left[x_2 \vec{J}^2 + \vec{J}_n^2 + \vec{J}_p^2 \right] \end{aligned} \quad (3.72)$$

Concernant le terme en t_3 :

$$\frac{t_3}{6} (1 + x_3 P_\sigma) \rho^\alpha \left(\overrightarrow{R} \right) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \quad (3.73)$$

nous avons :

$$(1 + x_3 P_\sigma)(1 - P) = 1 + \frac{x_3}{2} + \frac{1}{2} \delta_{\tau,\tau'} + \frac{1}{2} x_3 \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 - \frac{1}{2} \delta_{\tau,\tau'} \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 - x_3 \delta_{\tau,\tau'} \quad (3.74)$$

Ainsi

$$\begin{aligned} \int H_3(\vec{r}) d\vec{r} &= \frac{1}{2} \sum_{i,j} \langle i, j | \frac{t_3}{6} (1 + x_3 P_\sigma) \rho^\alpha(\vec{R}) \\ &\delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) (1 - P_\sigma \delta_{\tau,\tau'}) | i, j \rangle \\ &= \frac{t_3}{12} \left(1 + \frac{x_3}{2}\right) \sum_{i,j} \langle i, j | \rho^\alpha(\vec{R}) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) | i, j \rangle \\ &- \frac{t_3}{24} \sum_{i,j} \langle i, j | \rho^\alpha(\vec{R}) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \delta_{\tau,\tau'} | i, j \rangle \\ &+ \frac{t_3 x_3}{24} \sum_{i,j} \langle i, j | \rho^\alpha(\vec{R}) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 | i, j \rangle \\ &- \frac{t_3}{24} \sum_{i,j} \langle i, j | \rho^\alpha(\vec{R}) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 \delta_{\tau,\tau'} | i, j \rangle \\ &- \frac{t_3 x_3}{12} \sum_{i,j} \langle i, j | \rho^\alpha(\vec{R}) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \delta_{\tau,\tau'} | i, j \rangle \\ &= \frac{t_3}{12} \left(1 + \frac{x_3}{2}\right) \int \rho^{\alpha+2} d\vec{r} - \frac{t_3}{24} \int \rho^\alpha (\rho_n^2 + \rho_p^2) d\vec{r} - \frac{t_3 x_3}{12} \int \rho^\alpha (\rho_n^2 + \rho_p^2) d\vec{r} \end{aligned} \quad (3.75)$$

D'où

$$H_3(\vec{r}) = \frac{t_3}{12} \rho^\alpha \left[\left(1 + \frac{x_3}{2}\right) \rho^2 - \left(\frac{1}{2} + x_3\right) (\rho_n^2 + \rho_p^2) \right] \quad (3.76)$$

Il reste à déterminer le terme spin-orbite :

$$iW_0 (\vec{\sigma}_1 + \vec{\sigma}_2) \cdot \left[\overleftarrow{K}_{12} \times \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \overrightarrow{K}_{12} \right] \quad (3.77)$$

soit :

$$\int H_{so} d\vec{r} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \langle ij | iW_0 (\vec{\sigma}_1 + \vec{\sigma}_2) \cdot \left[\overleftarrow{K}_{12} \times \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \overrightarrow{K}_{12} \right] (1 - P_\sigma \delta_{\tau,\tau'}) | ij \rangle \quad (3.78)$$

En tenant compte des propriétés des matrices de Pauli et de la relation (3.28), on montre

que :

$$\begin{aligned}
\int H_{so} d\vec{r} &= \frac{1}{2} i W_0 \sum_{i,j} \langle i, j | \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) (1 + \delta_{\tau_i, \tau_j}) \vec{\nabla}_j \left(\vec{\nabla}_i \times \vec{\sigma}_i \right) | i, j \rangle \\
&= \frac{1}{2} i W_0 \sum_{i,j,\sigma,\sigma',\tau,\tau'} \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) (1 + \delta_{\tau_i, \tau_j}) \\
&\Phi_j^* (\vec{r}_2, \sigma', \tau) \vec{\nabla}_j \Phi_j (\vec{r}_2, \sigma', \tau) \Phi_i^* (\vec{r}_1, \sigma, \tau) \left(\vec{\nabla}_i \times \vec{\sigma}_i \right) \Phi_i (\vec{r}_1, \sigma, \tau) \\
&= -\frac{W_0}{2} \int d\vec{r} \left(\rho \vec{\nabla} \cdot \vec{J} + \rho_n \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_n + \rho_p \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_p \right) \tag{3.79}
\end{aligned}$$

Il s'en suit que

$$H_{so} = -\frac{W_0}{2} \left(\rho \vec{\nabla} \cdot \vec{J} + \rho_n \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_n + \rho_p \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_p \right) \tag{3.80}$$

La fonctionnelle d'énergie de Skyrme s'écrit donc :

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{Sk}(\vec{r}) &= \frac{t_0}{4} (2 + x_0) \rho^2(\vec{r}) - \frac{t_0}{4} (1 + 2x_0) \{ \rho_n^2(\vec{r}) + \rho_p^2(\vec{r}) \} \\
&+ \frac{1}{16} t_1 \left(1 + \frac{x_1}{2} \right) \left[4t\rho - 3\rho \vec{\nabla}^2 \rho \right] \\
&- \frac{1}{16} t_1 \left(\frac{1}{2} + x_1 \right) \left[4t_n \rho_n + 4t_p \rho_p - 3\rho_n \vec{\nabla}^2 \rho_n - 3\rho_p \vec{\nabla}^2 \rho_p \right] \\
&+ \frac{1}{16} t_1 \left[-x_1 \vec{J}^2 + \vec{J}_n^2 + \vec{J}_p^2 \right] \\
&+ \frac{t_2}{16} (2 + x_2) \left[2t(\vec{r}) \rho(\vec{r}) + \frac{1}{2} \rho(\vec{r}) \vec{\nabla}^2 \rho(\vec{r}) \right] \\
&+ \frac{t_2}{16} (1 + 2x_2) \{ 2t_n(\vec{r}) \rho_n(\vec{r}) + 2t_p(\vec{r}) \rho_p(\vec{r}) \\
&+ \frac{1}{2} \rho_n(\vec{r}) \vec{\nabla}^2 \rho_n(\vec{r}) + \frac{1}{2} \rho_p(\vec{r}) \vec{\nabla}^2 \rho_p(\vec{r}) \} \\
&- \frac{t_2}{16} \left[x_2 \vec{J}^2 + \vec{J}_n^2 + \vec{J}_p^2 \right] \\
&+ \frac{t_3}{12} \rho^\alpha \left[\left(1 + \frac{x_3}{2} \right) \rho^2 - \left(\frac{1}{2} + x_3 \right) (\rho_n^2 + \rho_p^2) \right] \\
&- \frac{W_0}{2} \left(\rho \vec{\nabla} \cdot \vec{J} + \rho_n \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_n + \rho_p \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_p \right) \tag{3.81}
\end{aligned}$$

3.3 Fonctionnelle d'énergie

L'énergie du noyau prend donc la forme d'une intégrale sur les coordonnées d'espace [2] :

$$E = \int d\vec{r} \mathcal{H}(\vec{r}) \tag{3.82}$$

avec :

$$\mathcal{H}(\vec{r}) = \mathcal{H}_{cin}(\vec{r}) + \mathcal{H}_{Sk}(\vec{r}) + \mathcal{H}_{coul}(\vec{r}) \quad (3.83)$$

où

$$\mathcal{H}_{cin}(\vec{r}) = \left(1 - \frac{1}{A}\right) \frac{-\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 \quad (3.84)$$

est la fonctionnelle d'énergie cinétique, $\mathcal{H}_{coul}(r)$ est la fonctionnelle d'énergie coulombienne et $\mathcal{H}_{Sk}(r)$ la fonctionnelle d'énergie de Skyrme qui s'écrit compte tenu des calculs précédents sous la forme :

$$\mathcal{H}_{Sk}(\vec{r}) = \mathcal{H}_{vol}(\vec{r}) + \mathcal{H}_{surf}(\vec{r}) + \mathcal{H}_{so}(\vec{r}) \quad (3.85)$$

avec

$$\mathcal{H}_{cin}(\vec{r}) = \left(1 - \frac{1}{A}\right) \frac{-\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 \quad (3.86)$$

$$\mathcal{H}_{vol}(\vec{r}) = B_1 \rho^2 + B_2 \sum_{\tau} \rho_{\tau}^2 + B_3 \rho \tau + B_4 \sum_{\tau} \rho_{\tau} \tau_{\tau} + B_7 \rho^{\alpha+2} + B_8 \rho^{\alpha} \sum_{\tau} \rho_{\tau}^2 \quad (3.87)$$

$$\mathcal{H}_{surf}(\vec{r}) = B_5 \rho \nabla^2 \rho + B_6 \sum_{\tau} \rho_{\tau} \nabla^2 \rho_{\tau} \quad (3.88)$$

$$\mathcal{H}_{so}(\vec{r}) = B_9 \left(\rho \vec{\nabla} \cdot \vec{J} + B_6 \sum_{\tau} \rho_{\tau} \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_{\tau} \right) \quad (3.89)$$

Les constantes B_i sont combinaisons des paramètres de Skyrme [14] :

$$\begin{aligned}
B_1 &= \frac{1}{2}t_0 \left(1 + \frac{1}{2}x_0\right) \\
B_2 &= -\frac{1}{2}t_0 \left(\frac{1}{2} + x_0\right) \\
B_3 &= \frac{1}{4} \left[t_1 \left(1 + \frac{1}{2}x_1\right) + t_2 \left(1 + \frac{1}{2}x_2\right) \right] \\
B_4 &= -\frac{1}{4} \left[t_1 \left(\frac{1}{2} + x_1\right) - t_2 \left(\frac{1}{2} + x_2\right) \right] \\
B_5 &= -\frac{1}{16} \left[3t_1 \left(1 + \frac{1}{2}x_1\right) - t_2 \left(1 + \frac{1}{2}x_2\right) \right] \\
B_6 &= \frac{1}{16} \left[3t_1 \left(\frac{1}{2} + x_1\right) + t_2 \left(\frac{1}{2} + x_2\right) \right] \\
B_7 &= \frac{1}{12}t_3 \left(1 + \frac{1}{2}x_3\right) \\
B_8 &= -\frac{1}{12}t_3 \left(\frac{1}{2} + x_3\right) \\
B_9 &= -\frac{1}{2}W_0 \\
B_{10} &= \frac{1}{4}t_0x_0 \\
B_{11} &= -\frac{1}{4}t_0 \\
B_{12} &= \frac{1}{24}t_3x_3 \\
B_{13} &= -\frac{1}{24}t_3
\end{aligned}$$

La fonctionnelle d'énergie coulombienne est donnée par [15] :

$$\mathcal{H}_{coul}(\vec{r}) = \frac{1}{2}\rho v_{dir}(\vec{r}) - v_{ech}(\vec{r}) \quad (3.90)$$

où le potentiel coulombien direct s'exprime par :

$$v_{dir}(r) = e^2 \int d^3r' \frac{\rho_p(r')}{|r - r'|} \quad (3.91)$$

et le terme d'échange peut s'écrire, en utilisant l'approximation de Slater [16], comme suit :

$$v_{ech}(r) \simeq \frac{3}{4}e^2 \left(\frac{3}{\pi}\right)^{\frac{1}{3}} \rho_p^{\frac{4}{3}}(r) \quad (3.92)$$

3.4 Paramétrisation de l'interaction de Skyrme

Depuis les premières paramétrisations de Vautherin et Brink [7], la plupart des auteurs ont exigé une bonne description des propriétés des états fondamentaux (énergies et rayons) des noyaux [3]. Après ces premières investigations, il est apparu indispensable de prendre en compte un certain nombre de données expérimentales nouvelles concernant la matière nucléaire. C'est ainsi que de nouvelles paramétrisations ont été construites pour décrire les propriétés des états excités des noyaux [2], les résonances géantes [1], les barrières de fission dans la région des actinides [5], les distributions de charge des noyaux sphériques [17], les déplacements d'énergie coulombienne [18], les propriétés des étoiles à neutrons, les corrélations d'appariement dans un traitement de type Hartree-Fock-Bogoliubov [19], approche qui est très utilisée pour étudier les lignes d'instabilité (drip lines) neutron et proton.

Des ajustements systématiques ont également été réalisés dans le but d'étudier les corrélations qui existent dans les états fondamentaux des noyaux en ajustant par exemple les spectres de particules individuelles [9]. Au moment où l'on s'intéresse de plus en plus aux noyaux dans des conditions extrêmes de déformation ou d'isospin, conditions de plus en plus proche de l'instabilité du milieu nucléaire, il est fondamental de se poser la question de savoir si, parmi toutes ces interactions, certaines sont capables d'apporter des informations prédictives fiables dans de telles conditions extrêmes. C'est le but principal des « Forces de Lyon » [20] qui utilisent une équation d'état de la matière de neutrons pour tenter de mieux rendre compte des propriétés des noyaux très riches en neutrons.

Outre les paramétrisations conduisant à des formules de masse macroscopiques ou microscopiques [1]. Il existe à l'heure actuelle plus d'une centaine de paramétrisations traduisant bien la facilité avec laquelle on peut s'adapter à des conditions d'études particulières en utilisant ce type d'interaction effective de portée nulle. Le tableau présente quelques paramétrisations, les plus répondues dans la littérature.

Enfin, dans le but de justifier le choix de l'interaction de Skyrme dans la présente étude rappelons que :

- Vautherin et Brink [7] ont montré qu'avec une forme aussi simple on peut correctement reproduire énergies de liaison et rayons à travers la table des noyaux.
- La forme mathématique très simple permet d'une part la construction d'une fonctionnelle pour l'énergie totale d'un noyau mais permet également des calculs Hartree-

Paramètre	SLy4 [16]	SKM*	SKP
$t_0(\text{Mev}fm^3)$	-2488, 91	-2645, 00	-2931, 70
$t_1(\text{Mev}fm^5)$	486, 82	410, 00	320, 62
$t_2(\text{Mev}fm^5)$	-546, 39	-135, 00	-337, 41
$t_3(\text{Mev}fm^{3+3\alpha})$	13777, 0	15595, 0	18708, 97
x_0	0, 834	0, 090	0, 29215
x_1	-0, 344	0, 000	0, 65318
x_2	-1, 000	0, 000	-0, 53732
x_3	1, 354	0, 000	0, 18103
α	$\frac{1}{6}$	1/6	1/6
$W_0(\text{Mev}fm^5)$	123, 0	130, 0	100, 0

Tab. 3.1 : Paramètres de l'interaction de Skyrme les plus utilisés dans littérature

Fock (HF) très aisés dans la représentation \vec{r} .

- L'argument le plus fort est certainement dû aux travaux de Negele et Vautherin [7] qui ont établi un lien entre les forces NN réalistes et ce type d'interaction phénoménologique. Leur raisonnement est basé sur une approximation de densité locale (LDA) de la matrice G dérivée d'une force NN réaliste. La matrice réaction obtenue exhibe une dépendance vis-à-vis de la matrice densité dont on peut faire un développement (DME). On obtient ainsi une fonctionnelle $H\left(\rho(\vec{r}), \vec{\nabla}\rho(\vec{r}), t(\vec{r})\right)$ des densités locales $\rho(\vec{r}), t(\vec{r})$ pour la densité d'énergie d'un noyau.

Notons également que la fonctionnelle de Skyrme contient déjà des termes de corrélations au-delà de Hartree-Fock : les paramètres de la fonctionnelle (t_0, t_1, \dots) données dans le tableau (3.1) sont ajustés sur les observables des noyaux finis, comme les rayons et les énergies de liason. Ces paramétrisations tiennent donc compte de l'ensemble des corrélations, puisqu'elles sont ajustées sur l'expérience. En outre le terme en t_3 , dépendant de la densité est l'illustration d'un terme de corrélation supplémentaire au-delà des termes de Hartree-Fock.

Chapitre 4

Coexistence de formes et déformation nucléaire

4.1 Forme nucléaire

L'existence d'états d'équilibre nucléaire déformés est due aux effets de couches. En effet dans le cadre d'une description semi-classique des propriétés moyennes des noyaux, telle que le modèle de la goutte liquide, le minimum de l'énergie en fonction de la déformation correspond toujours à la forme sphérique [19]. Les succès de la description des noyaux en termes de modèle en couches [2] ont entraîné la prise en considération des nombres magiques de protons ou de neutrons. Pour de tels nombres magiques, correspondant à une faible densité de niveaux au voisinage de la surface de Fermi, les effets de couches sont liants et stabilisent les noyaux correspondants dans une forme sphérique. Par contre, au fur et à mesure que l'on s'éloigne de ces nombres magiques, la densité de niveaux augmente au voisinage de la surface de Fermi, produisant un effet de couches anti-liant. C'est ainsi que le minimum de l'énergie du noyau en fonction de la déformation se déplace vers des déformations non nulles où la densité du spectre de particules individuelles présente à nouveau un minimum [21]. Dans le cas de la symétrie axiale et la symétrie gauche-droite (réflexion par rapport à un plan perpendiculaire à l'axe de symétrie), la valeur absolue du moment quadrupolaire Q augmente avec le nombre de nucléons en partant de zéro en début de couche jusqu'à un maximum en milieu de couche et décroît vers zéro en fin de couche [22]. Pour la symétrie axiale considérée, le signe du moment quadrupolaire indique si le noyau est de forme allongée (signe +) ou de forme aplatie (signe -) [23]. Les données expérimentales montrent que le plus souvent les noyaux dans

leur état d'équilibre sont de forme allongée sauf en fin de couches [20].

Le rayon de la surface du noyau peut être paramétrisée à partir de la sphère corrigée par les harmoniques sphériques normalisées [24] :

$$R = R(\theta, \varphi) = R_0 \left(1 + \alpha_{00} + \sum_{\lambda=1}^{\infty} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} \alpha_{\lambda\mu}^* Y_{\lambda\mu}(\theta, \varphi) \right) \quad (4.1)$$

où R_0 est le rayon d'une sphère de même volume. α_{00} est une constante qui décrit les changements du volume nucléaire. Sachant que l'incompressibilité du fluide nucléaire est assez élevée, le volume du noyau peut être donné pour toute déformation par :

$$v = \frac{4}{3} \pi R_0^3$$

Ceci définit la constante α_{00} jusqu'au second ordre :

$$\alpha_{00} = -\frac{1}{4\pi} \sum_{\lambda \geq 1, \mu} |\alpha_{\lambda\mu}|^2$$

Le terme $\lambda = 1$ décrit principalement (au moins pour les petites déformations) une translation de l'ensemble du système. Les trois paramètres $\alpha_{1\mu}$ peuvent être fixés par la condition que l'origine coïncide avec le centre de masse :

$$\int_v \vec{r} d^3\vec{r} = 0$$

Les termes $\lambda = 2$ représentent une déformation quadrupolaire et $\lambda = 3$ une déformation octupolaire. La majorité des noyaux ont une déformation ellipsoïdale présentant un axe de symétrie ce qui implique une déformation majoritairement quadrupolaire. Dans ce cas R est défini en termes des paramètres de déformation β_i par :

$$R(r) = R_0(\beta_i) [1 + \beta_2 Y_{20}(r) + \beta_4 Y_{40}(r) + \dots] \quad (4.2)$$

où $R_0(\beta_i)$ est une fonction des paramètres de déformation telle que le volume de la distribution soit conservé quelle que soit la déformation, c'est-à-dire telle que :

$$[R_0(\beta_i)]^{-3} \propto \int_{-1}^{+1} d(\cos \theta) [1 + \beta_2 Y_{20}(\cos \theta) + \beta_4 Y_{40}(\cos \theta) + \dots]^3 \quad (4.3)$$

Afin de pouvoir déterminer la dépendance de l'énergie en fonction de la déformation

[25], le noyau est soumis à un champ extérieur (contrainte). Dans le présent cas (symétrie axiale), cette contrainte est réalisée en ajoutant à l'hamiltonien nucléaire une fonction dépendant du moment quadrupolaire de masse [26] :

$$\hat{Q}_{20} = \sqrt{\frac{16\pi}{5}} \sum_{i=1}^A \hat{r}_i^2 Y_{20}(\theta_i, \varphi_i) \quad (4.4)$$

dont le noyau doit adopter la valeur. Ainsi pour que le déterminant prenne une autre déformation quadrupolaire que celle de l'équilibre, on minimise l'hamiltonien auxiliaire $\langle \Psi | H' | \Psi \rangle$ au lieu de $\langle \Psi | H | \Psi \rangle$ défini par :

$$\delta (\langle \Psi | H' | \Psi \rangle) = \delta \left[\langle \Psi | H | \Psi \rangle + f \left(\mu, \langle \hat{Q}_{20} \rangle \right) \right] = 0 \quad (4.5)$$

où $f \left(\mu, \langle \hat{Q}_{20} \rangle \right)$ est une fonction de la valeur moyenne de \hat{Q}_{20} et μ est un paramètre à ajuster de sorte que $\langle \hat{Q}_{20} \rangle$ prenne la valeur souhaitée. La fonction f est considérée quadratique en $\langle \hat{Q}_{20} \rangle$, de la forme :

$$f \left(\mu, \langle \hat{Q}_{20} \rangle \right) = C \left(\langle \hat{Q}_{20} \rangle - \mu \right)^2 \quad (4.6)$$

ce qui revient à chercher le point de tangence d'une parabole et de la courbe $E(Q_{20})$ où la courbe d'énergie potentielle $E(\hat{Q}_{20})$ est indépendante de l'expression de $f \left(\mu, \langle \hat{Q}_{20} \rangle \right)$. Seule l'accessibilité des régions de déformations explorées est différente. L'application du principe variationnel nous montre que la valeur $\langle \hat{Q}_{20} \rangle$ obtenue correspond au point de tangence entre les courbes $E(Q_{20})$ et $-f \left(\mu, \langle \hat{Q}_{20} \rangle \right)$:

$$\frac{dE(Q_{20})}{dQ_{20}} = - \frac{\partial f \left(\mu, \langle \hat{Q}_{20} \rangle \right)}{\partial \langle \hat{Q}_{20} \rangle} \quad (4.7)$$

L'utilisation de la contrainte quadratique assure qu'il n'y a qu'une seule valeur de Q_{20} et une seule solution, pour un μ donné. Par contre, la contrainte linéaire peut fournir plus d'une solution pour μ .

4.2 Coexistence de formes

Dans certaines régions de masse du tableau périodique, les déformations prolates et oblates sont prédites avec un très faible écart en énergie (quelques centaines de keV pour une énergie de liaison proche du GeV) [27]. Ceci implique, d'une part, une très forte compétition entre ces deux déformations pour l'état fondamental du noyau et d'autre part, qu'une faible interaction résiduelle est capable de coupler deux états de Hartree-Fock ayant deux déformations différentes. Ce phénomène est appelé la coexistence de formes¹. Celle-ci est étudiée aussi bien du point de vue expérimental que théorique depuis plus de 20 ans. Toutefois, la difficulté à obtenir des preuves expérimentales directes de ce phénomène montre l'importance des investigations théoriques dans l'orientation des études expérimentales.

Parmi les preuves indirectes du phénomène de coexistence de formes [28], on peut citer celle basée sur l'étude systématique de la bande rotationnelle bâtie sur l'état fondamental. En effet, dans certains noyaux cette étude a montré que la séquence des états rotationnels était perturbée par l'existence d'un état, de large déformation opposée, à basse énergie dont la fonction d'onde se mélange à la fonction d'onde de l'état fondamental [29]. Ce mélange de configurations perturbe toutes les caractéristiques rotationnelles du noyau à bas spins.

L'observation expérimentale, dans plusieurs noyaux, d'une transition monopolaire électrique [30] vers l'état fondamental 0^+ a prouvé l'existence d'un second état 0^+ [10] à basse énergie dont la fonction d'onde se mélange fortement à celle de l'état fondamental et indique un changement important de la déformation (passage d'une forme oblate à une forme prolates par exemple). Ce changement radical de forme à une faible énergie d'excitation [31] fait de ces noyaux des sujets idéaux pour l'étude de la déformation [32].

4.3 Etude de quelques noyaux autour de $A=180$

Dans cette section, nous nous proposons d'étudier la coexistence de formes dans quelques noyaux riches en neutrons en utilisant l'approche du champ moyen auto-cohérent de Hartree-Fock. Les énergies et les fonctions d'onde individuelles sont déterminées par minimisation de l'énergie totale formulées en termes de l'interaction effective de Skyrme SLy4. Pour ce faire dans le cas de noyaux déformés, l'hamiltonien à un corps de Hartree-

¹En se basant sur des études antérieures, nous avons considéré dans nos calculs qu'une coexistence de formes existe dans un noyau dès que $|E_{obl} - E_{prol}| < 500 \text{ keV}$. [33]

Fock est diagonalisé dans une base d'états à une particule. Dans la présente étude, la base choisie est une base d'oscillateur harmonique déformé à symétrie axiale². La taille de cette base doit être suffisante pour assurer l'indépendance des résultats par rapport au choix des paramètres de la base. Pour les noyaux de la région des terres rares riches en neutrons considérés, nous avons utilisé une base contenant 14 couches majeures de l'oscillateur.

4.3.1 Forme d'équilibre

Dans un premier temps, pour déterminer la forme d'équilibre et discerner la coexistence de forme [34], nous nous sommes intéressés à l'étude de l'évolution de l'énergie du système en fonction du paramètre de déformation β . Ce dernier est relié au moment quadrupolaire de masse par [29] :

$$\beta = \sqrt{\frac{\pi}{5}} \frac{\langle \hat{Q}_{20} \rangle}{\langle \hat{r}^2 \rangle} \quad (4.8)$$

Nous nous sommes particulièrement intéressés à six séries d'isotopes riches en neutrons de la région des terres rares. Il s'agit notamment de : ${}_{66}^{176-186}\text{Dy}$, ${}_{68}^{178-198}\text{Er}$, ${}_{70}^{180-190}\text{Yb}$, ${}_{72}^{182-192}\text{Hf}$, ${}_{74}^{184-194}\text{W}$ et ${}_{76}^{186-196}\text{Os}$. L'ensemble des courbes tracées sont présentés sur les figures 4-1 à 4-6.

Il apparait des figures que dans tous les cas il y a toujours un minimum prolate et un minimum oblate même pour $N \sim 120$ où le minimum prolate ne constitue qu'un léger affaissement dans la courbe de l'énergie. Ce résultat nous mène à la conclusion que deux bandes rotationnelles, une construite sur l'état prolate et l'autre sur l'état oblate, pourraient être observées dans le spectre rotationnel des noyaux considérés [35].

Les deux minima deviennent proches en énergie dans plusieurs noyaux (coexistence de formes) et sont toujours séparés par une barrière assez importante (souvent $> 10\text{MeV}$) autour de la forme sphérique dont la taille globalement diminue avec l'augmentation du nombre de nucléons (protons ou neutrons). Par ailleurs, on constate que la coexistence apparait entre les deux formes prolate et oblate pour des valeurs du paramètre de déformation très voisines en valeur absolue.

Afin de mieux distinguer les noyaux présentant une coexistence de forme dans l'ensemble des noyaux étudiés, la différence d'énergie entre les deux minima oblate et prolate

²Voir annexe A

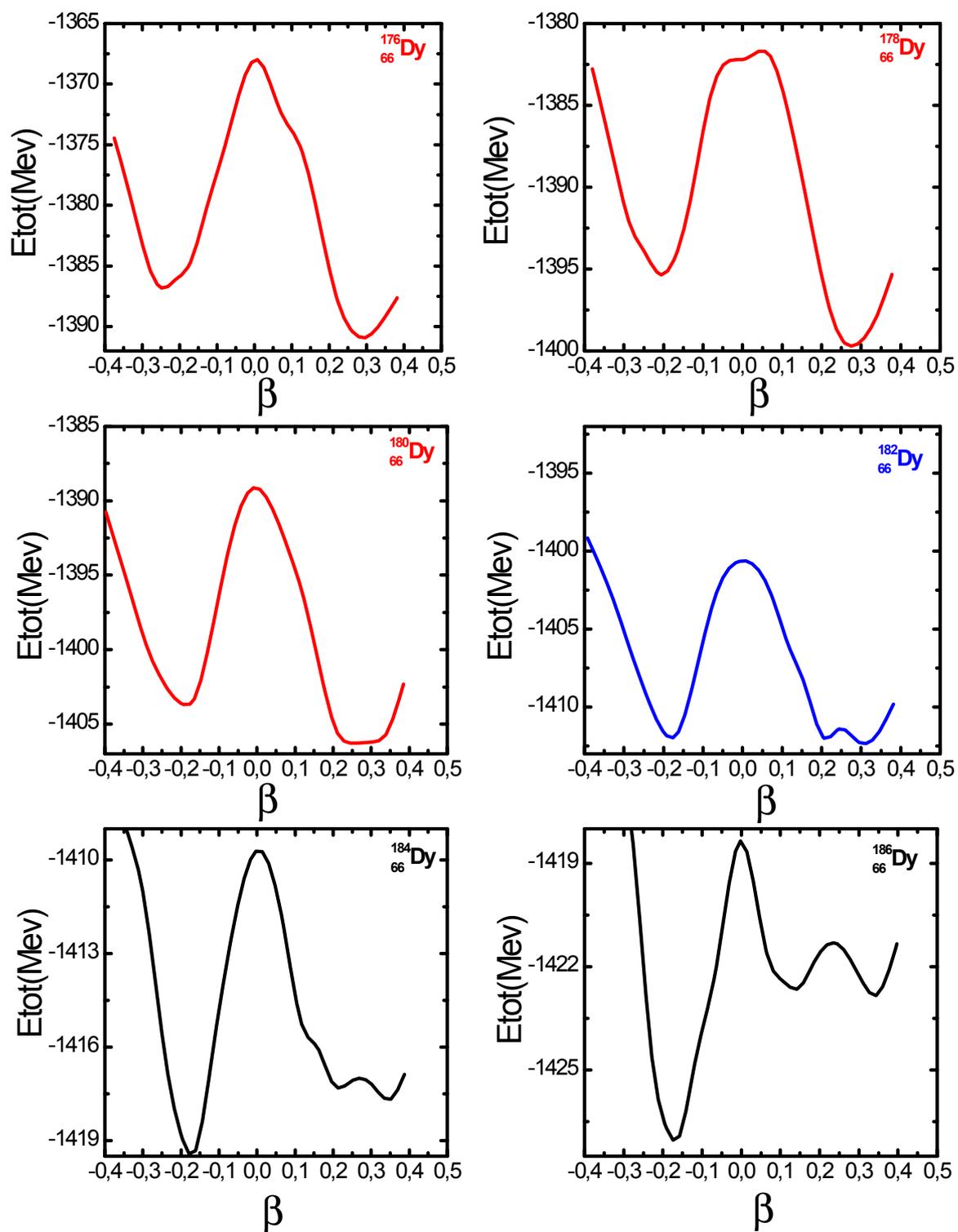


Fig. 4-1 : Energie totale en fonction du paramètre de déformation β pour les isotopes de $^{176-186}\text{Dy}$.

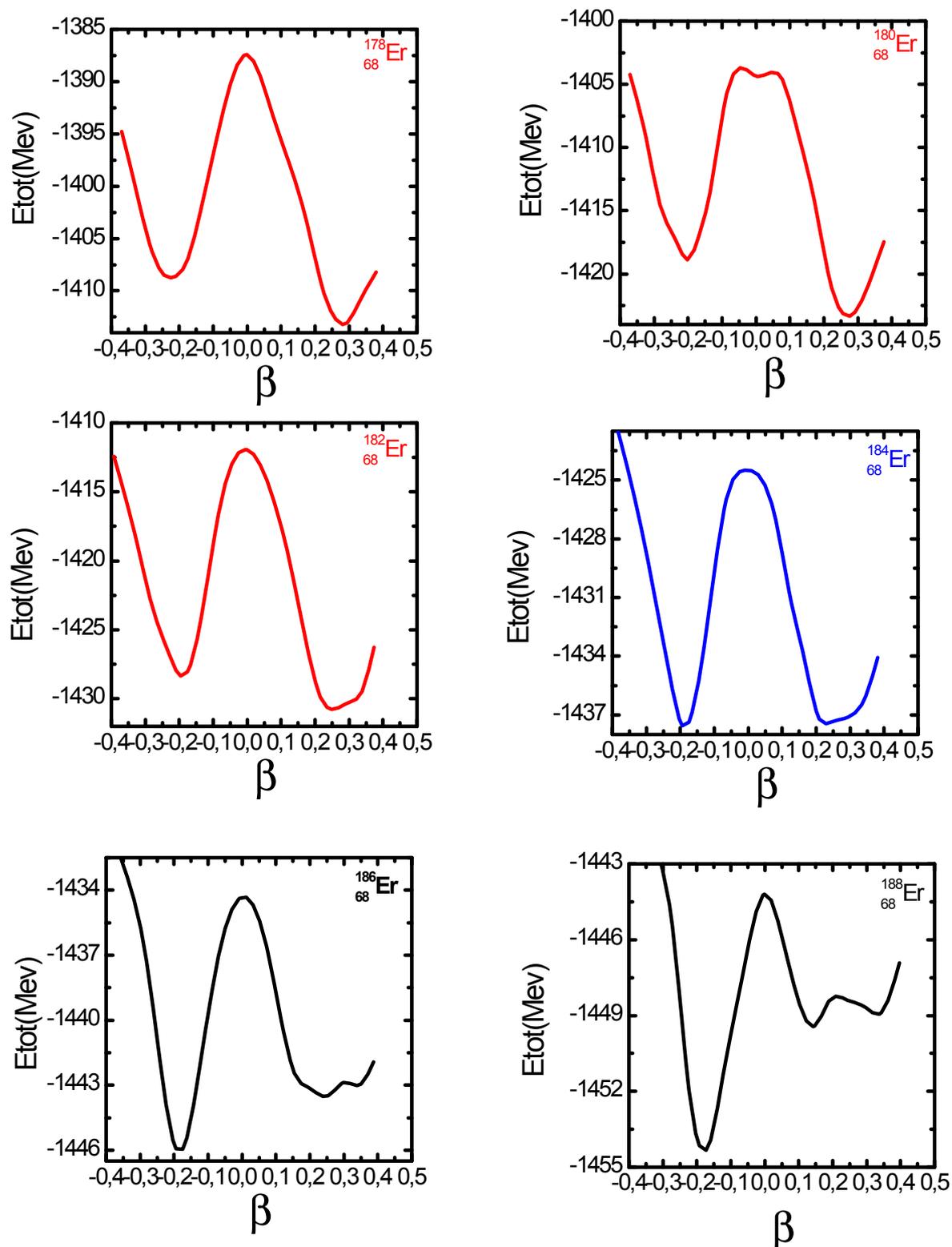


Fig. 4-2 : Energie totale en fonction du paramètre de déformation β pour les isotopes de $^{178-188}\text{Er}$.

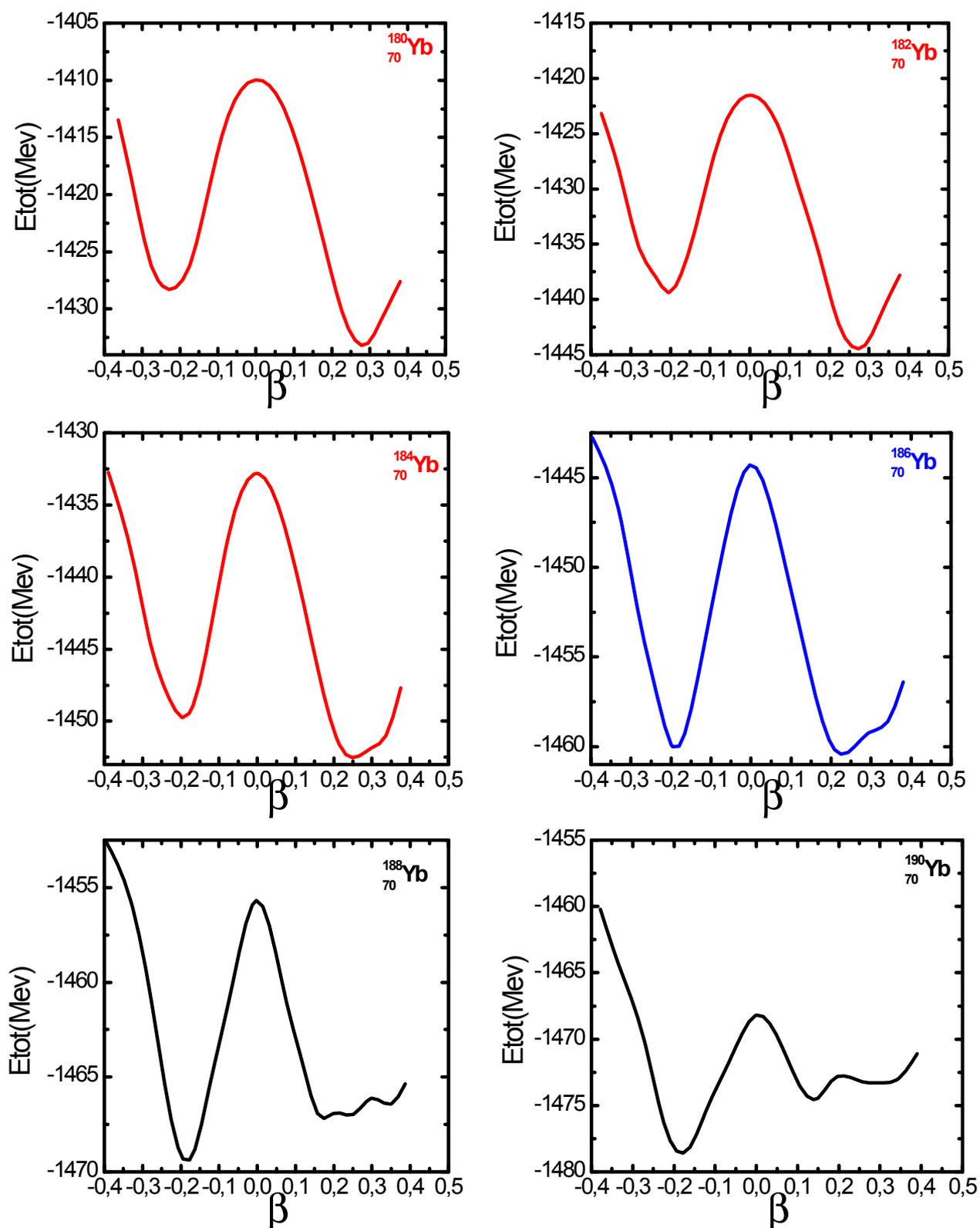


Fig. 4-3 : Energie totale en fonction du paramètre de déformation β pour les isotopes de $^{180-190}\text{Yb}$.

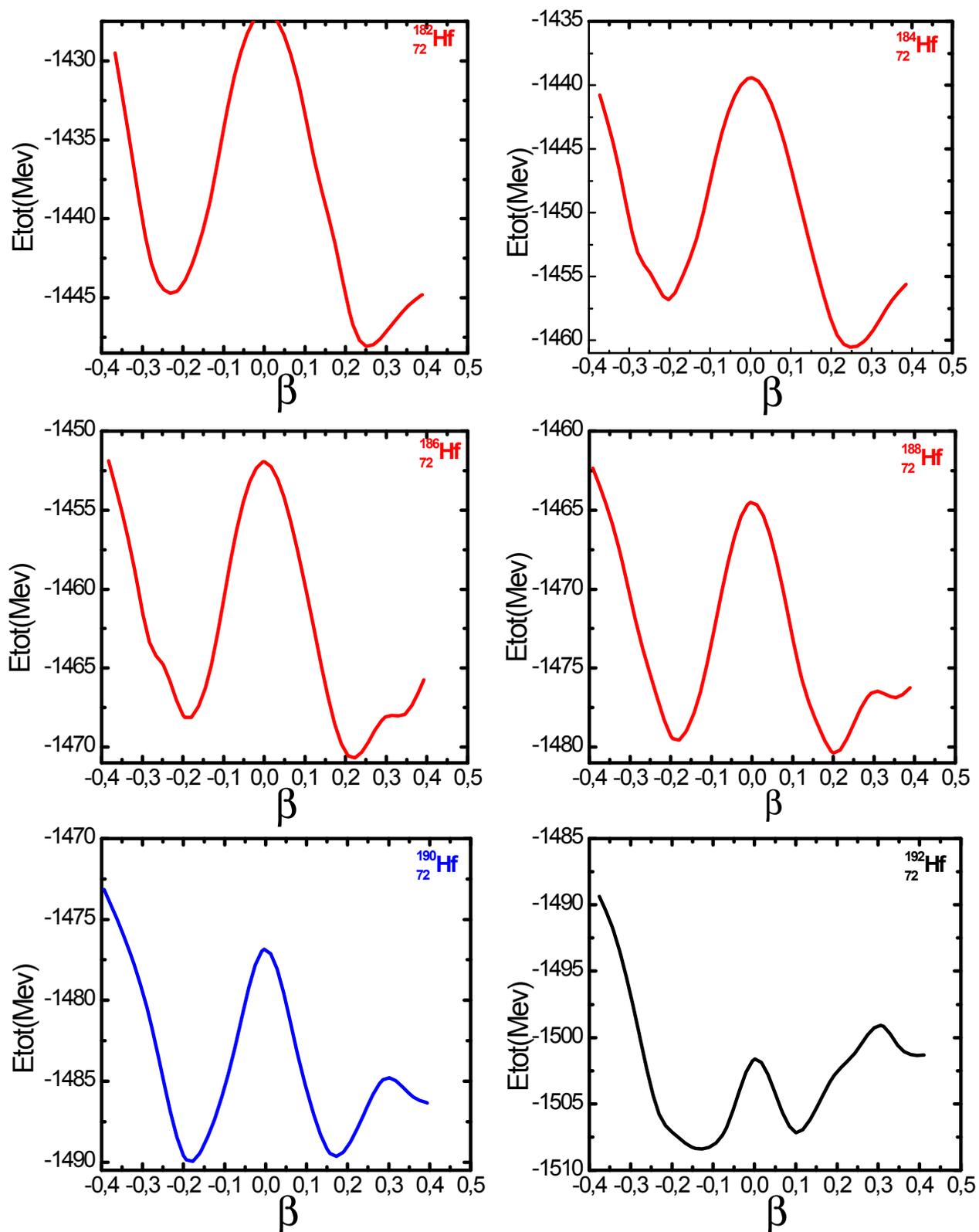


Fig. 4-4 : Energie totale en fonction du paramètre de déformation β pour les isotopes de $^{182-192}\text{Hf}$.

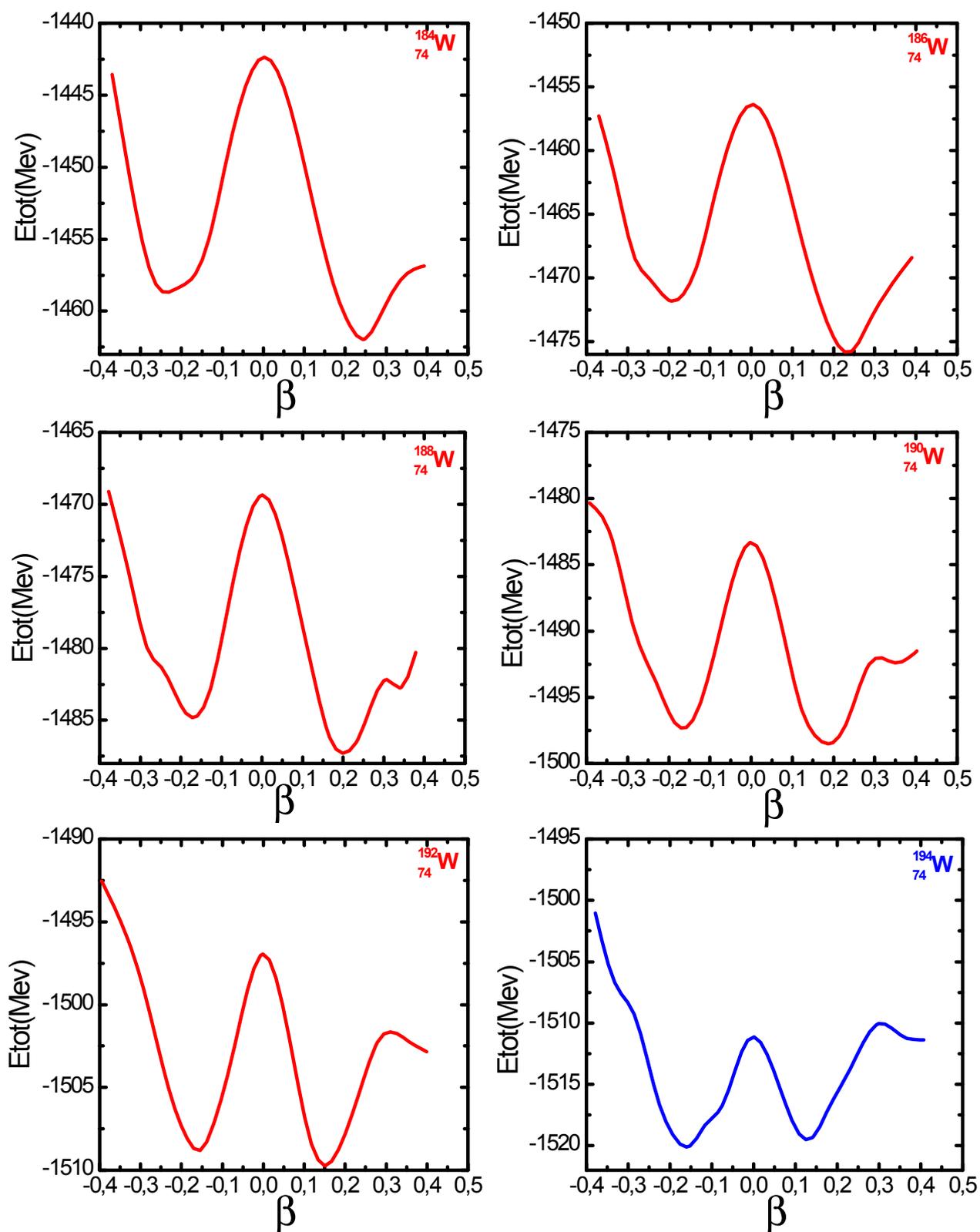


Fig. 4-5 : Energie totale en fonction du paramètre de déformation β pour les isotopes de $^{184-194}\text{W}$.

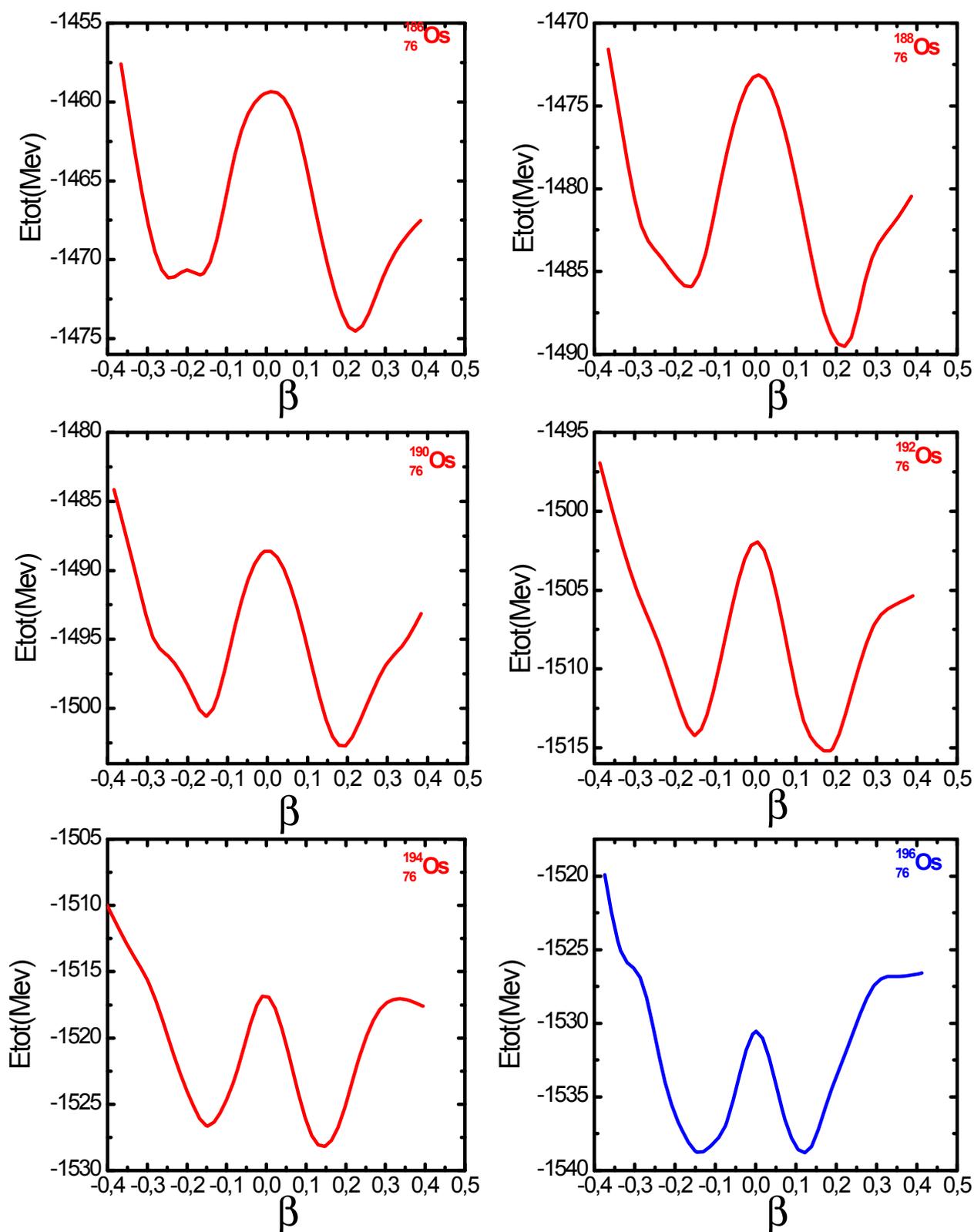


Fig. 4-6 : Energie totale en fonction du paramètre de déformation β pour les isotopes de $^{186-196}\text{Os}$.

N	$E_{\text{oblate}}(\text{MeV})$	$E_{\text{prolate}}(\text{MeV})$	$E_{\text{obl}}-E_{\text{prol}}(\text{MeV})$
110	-1386,856	-1390,999	-4,142
112	-1395,426	-1399,691	-4,265
114	-1403,761	-1406,289	-2,528
116	-1412,020	-1412,374	-0,354
118	-1419,488	-1417,677	1,811
120	-1427,057	-1422,842	4,215
122	-1432,813	-1430,376	2,437

Tab. 4.1 : Energies des isotopes de Dy correspondant aux minima oblate et prolate et leur différence $E_{\text{obl}}-E_{\text{prol}}$

N	$E_{\text{oblate}}(\text{MeV})$	$E_{\text{prolate}}(\text{MeV})$	$E_{\text{obl}}-E_{\text{prol}}(\text{MeV})$
110	-1408,752	-1413,201	4,449
112	-1418,855	-1423,400	4,545
114	-1428,334	-1430,819	2,485
116	-1437,647	-1437,464	-0,183
118	-1446,047	-1443,534	-2,513
120	-1454,342	-1449,450	-4,892
122	-1460,342	-1454,084	-6,258

Tab. 4.2 : Energies des isotopes d'Er correspondant aux minima oblate et prolate et leur différence $E_{\text{obl}}-E_{\text{prol}}$

a été calculée et portée sur les tableaux 4.1 à 4.6.

Les résultats de ce calcul montre que pour les noyaux les plus légers (les moins riches en neutrons) l'état fondamental est prédit prolate alors que le premier état 0^+ excité est de forme oblate. Par contre quand le nombre de neutrons augmente la différence d'énergie entre les deux minima diminue puis s'inverse pour que le minimum absolu corresponde à la forme oblate.

Dans le cas des isotopes du Dy, d'Er et d'Yb : il apparaît des tableaux 4.1, 4.2 et 4.3 que pour un nombre de neutrons $N \leq 114$ les noyaux sont de forme prolate $(0, 2)\beta(0, 3)$. Quand le nombre de neutrons augmente, on constate que les deux minima se rapprochent en énergie jusqu'à $N = 116$, où on observe une coexistence de formes. Les isotopes les plus lourds acquièrent une forme oblate. Ces remarques restent valables dans le cas du Hf et du Os où la coexistence de forme apparaît pour $N = 118$ et 120 respectivement.

La seule exception est le noyau de W pour lequel nos calculs ne montrent aucune coexistence de formes.

N	E_{oblate} (MeV)	E_{prolate} (MeV)	$E_{\text{obl}}-E_{\text{prol}}$ (MeV)
110	-1428,264	-1433,201	4,938
112	-1439,361	-1444,469	5,108
114	-1449,833	-1452,476	2,643
116	-1460,095	-1460,402	0,307
118	-1469,434	-1467,168	-2,267
120	-1478,595	-1474,521	-4,074
122	-1485,374	-1482,908	-2,466

Tab. 4.3 : Energies des isotopes d'Yb correspondant aux minima oblate et prolate et leur différence $E_{\text{obl}}-E_{\text{prol}}$

N	E_{oblate} (MeV)	E_{prolate} (MeV)	$E_{\text{obl}}-E_{\text{prol}}$ (MeV)
110	-1444,700	-1448,128	3,428
112	-1456,734	-1460,540	3,806
114	-1468,209	-1470,628	2,419
116	-1479,619	-1480,321	0,702
118	-1489,987	-1489,642	-0,346
120	-1500,121	-1497,654	-2,466
122	-1508,412	-1507,155	-1,257

Tab. 4.4 : Energies des isotopes d'Hf correspondant aux minima oblate et prolate et leur différence $E_{\text{obl}}-E_{\text{prol}}$

N	E_{oblate} (MeV)	E_{prolate} (MeV)	$E_{\text{obl}}-E_{\text{prol}}$ (MeV)
110	-1458,728	-1461,985	3,257
112	-1471,792	-1475,847	4,054
114	-1484,775	-1487,257	2,482
116	-1497,338	-1498,476	1,138
118	-1508,780	-1509,646	0,865
120	-1520,096	-1519,512	-0,584
122	-1530,506	-1529,742	-0,764

Tab. 4.5 : Energies des isotopes de W correspondant aux minima oblate et prolate et leur différence $E_{\text{obl}}-E_{\text{prol}}$

N	E_{oblate} (MeV)	E_{prolate} (MeV)	$E_{\text{obl}}-E_{\text{prol}}$ (MeV)
110	-1471,147	-1474,519	3,372
112	-1485,948	-1489,545	3,596
114	-1500,581	-1502,712	2,131
116	-1514,218	-1515,274	1,056
118	-1526,614	-1528,174	1,559
120	-1538,792	-1538,792	0
122	-1551,1276	-1550,096	-1,032

Tab. 4.6 : Energies des isotopes d'Os correspondant aux minima oblate et prolate et leur différence $E_{\text{obl}}-E_{\text{prol}}$

4.3.2 Propriété de l'état fondamental

La transition de forme se manifeste généralement sur les valeurs du moment quadrupolaire et du rayon quadratique moyen à travers un brusque changement dans l'allure de leur courbes en fonction du nombre de nucléons. Ceci est illustré sur les deux figures 4-7 et 4-8.

Une des caractéristiques principales des noyaux riches en neutrons est le développement des peaux de neutron définies comme la différence entre les rayons neutron et proton.

En effet, étant loin de la ligne de la stabilité, on peut voir clairement la grande différence entre les rayons quadratiques moyens neutron et ainsi le développement d'une peau de neutron.

Le rayon quadratique de charge a été également évalué en employant la relation suivante [36] :

$$r_c = \sqrt{\langle r_p^2 \rangle + 0.64} \quad (4.9)$$

en tenant compte de la taille finie du proton.

On peut voir le changement brusque dans la systématique des rayons de charge calculés. Ces changements apparaissent pour $N=116$ dans le cas des isotopes du Dy, d'Er et d'Yb, $N=118$ dans le cas des isotopes du Hf et du W et $N=120$ dans le cas des isotopes de l'Os. Ils sont provoqués par le changement de la forme de l'état fondamental.

Dans la figure 4-7, le moment quadrupolaire électrique des différents noyaux dans leur état fondamental est représenté en fonction du nombre de neutrons en comparaison aux quelques résultats expérimentaux disponibles.

Il apparait de la figure que nos calculs et les résultats expérimentaux présente une tendance semblable. Les changements dans l'allure des courbes du moment quadrupolaire confirme les points de transition de forme observés dans les courbes des rayons quadratiques moyens [37]. En effet, nos calculs prévoient une transition de phase soudaine de la forme prolata à la forme oblate. Les noyaux étudiés les plus lourds préfèrent une forme oblate dans leur état fondamental.

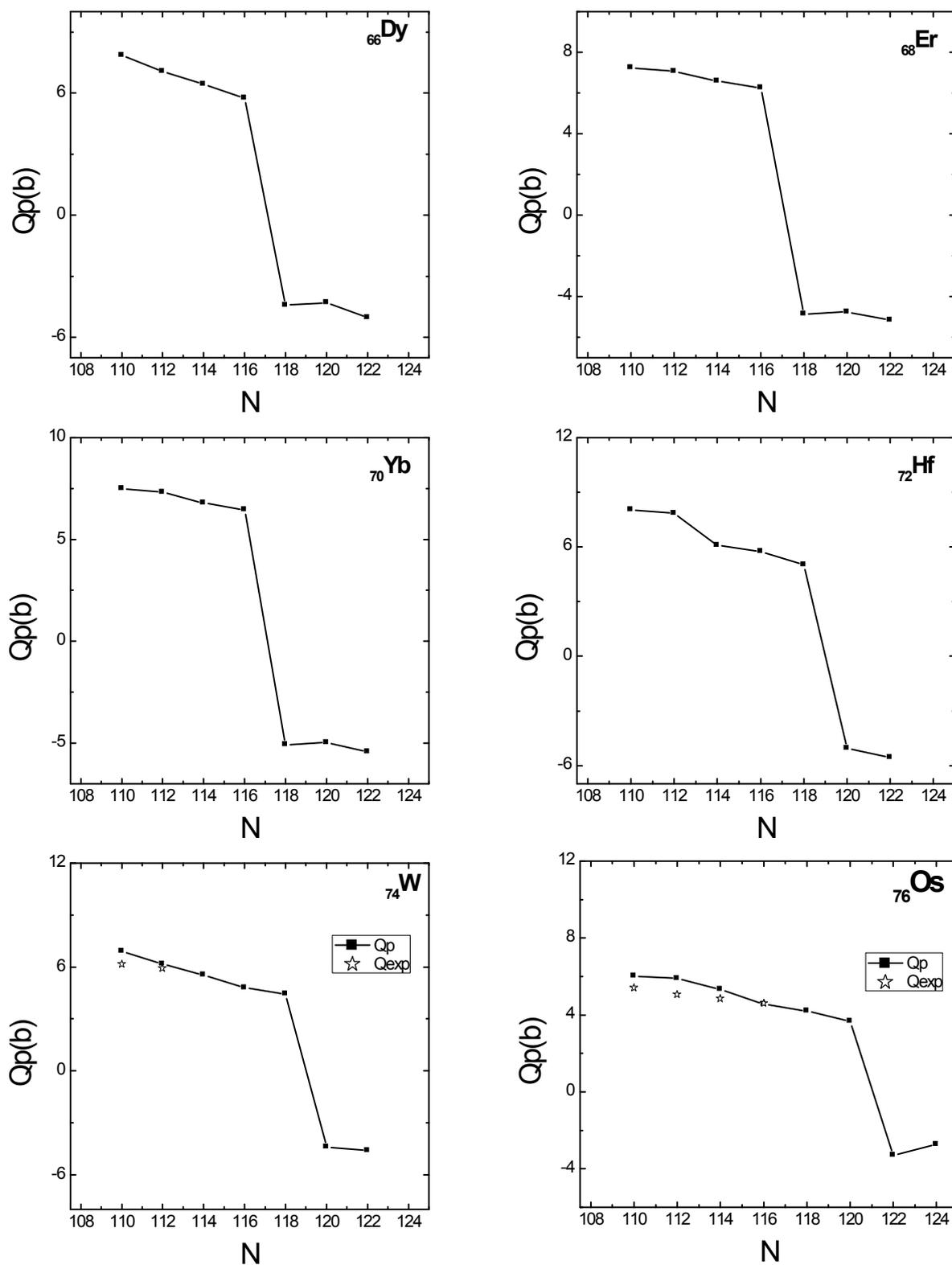


Fig. 4-7 : Evolution du moment quadrupolaire de charge des noyaux $^{176-188}_{66}\text{Dy}$, $^{178-190}_{68}\text{Er}$, $^{180-192}_{70}\text{Yb}$, $^{182-194}_{72}\text{Hf}$, $^{184-196}_{74}\text{W}$ et $^{186-200}_{76}\text{Os}$ en fonction du nombre de neutrons en comparaison aux quelques résultats expérimentaux disponibles [38]

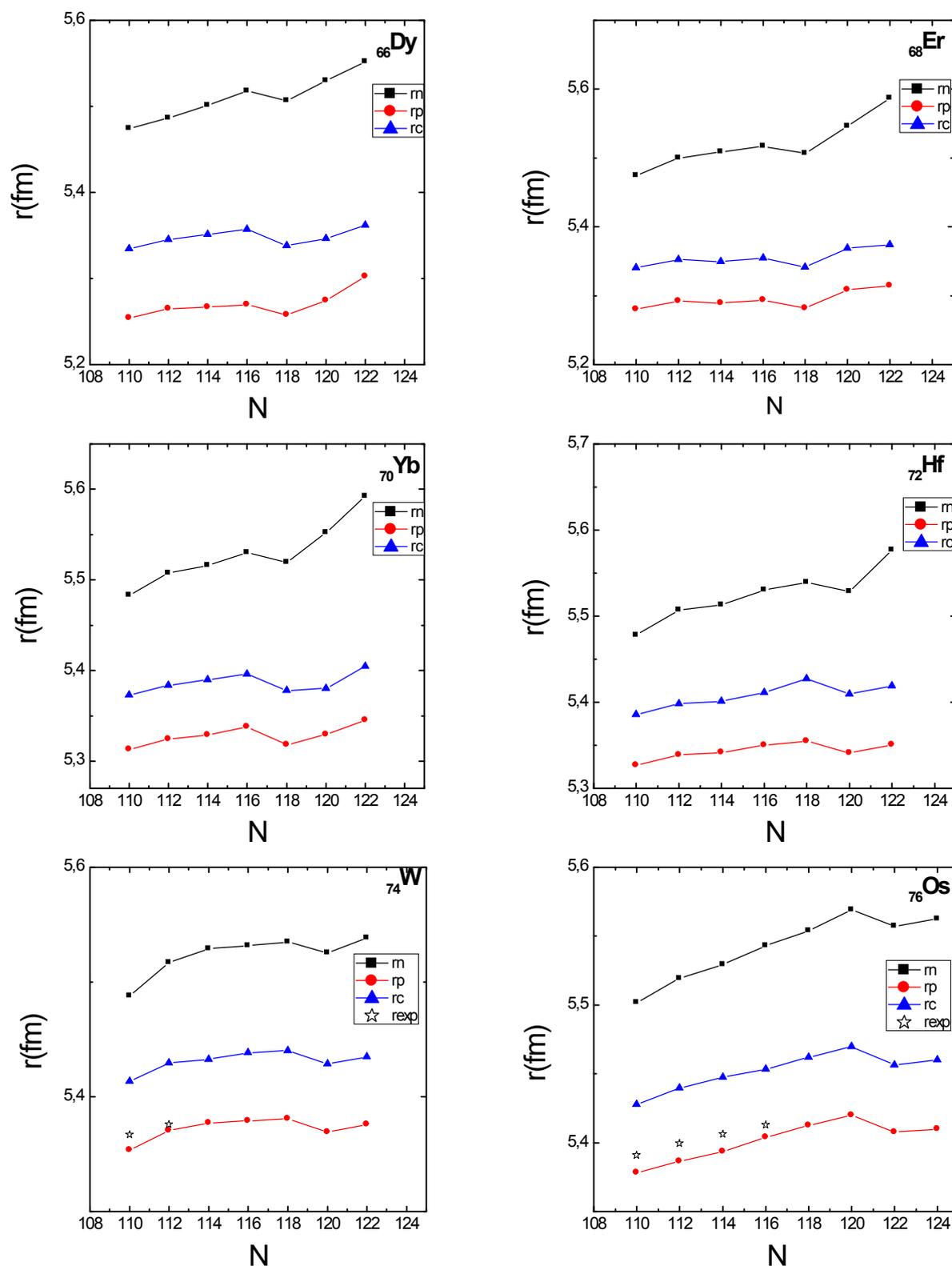


Fig. 4-8 : Evolution du rayon quadratique moyen du système neutron, proton et de charge des noyaux $^{176-188}\text{Dy}$, $^{178-190}\text{Er}$, $^{180-192}\text{Yb}$, $^{182-194}\text{Hf}$, $^{184-196}\text{W}$ et $^{186-200}\text{Os}$ en fonction du nombre de neutrons.

Conclusion

Dans le présent travail, la coexistence de formes dans quelques noyaux riches en neutrons est étudiée dans le cadre de la théorie Hartree-Fock- Skyrme.

Nous nous sommes intéressés dans un premier temps à l'interaction nucléon-nucléon et ses symétries. Il a été montré en particulier que la notion de symétrie qui est habituellement de nature descriptive devient constructive du fait de la difficulté à appréhender l'interaction nucléon-nucléon. Sur la base des différentes symétries, l'interaction nucléon-nucléon effective de Skyrme a été introduite.

La complexité du système nucléaire fait que l'approche utilisée pour son étude dépend autant de notre capacité à résoudre le problème que du type de propriétés que l'on cherche à étudier. Dans le présent travail, la théorie de Hartree-fock développée dans la représentation position a été considérée. La méthode est basée sur une fonctionnelle de la densité d'énergie formulées en termes de l'interaction effective nucléon-nucléon de Skyrme SLy4 dépendante de cette densité. Cette interaction effective phénoménologique étant de portée nulle, elle a permis de modéliser de façon simple les interactions entre les nucléons dans le noyau.

L'application de la méthode à plusieurs noyaux lourds de la région des terres rares a montré l'existence de deux minima, un prolate et l'autre oblate. Ce résultat implique que deux bandes rotationnelles, une construite sur l'état prolate et l'autre sur l'état oblate, pourraient être observées dans le spectre rotationnel des noyaux considérés.

Une concurrence entre les deux déformations (coexistence de formes) a été observée pour un nombre de neutrons voisin de 116 pour l'ensemble des noyaux étudiés à l'exception du noyau de W pour lequel les calculs n'ont montré aucune coexistence de formes.

L'étude du comportement du moment quadrupolaire et du rayon quadratique moyen en fonction du nombre de nucléons a confirmé les transitions de formes observées sur les courbes de l'énergie de liaison.

Dans le cas des noyaux présentant une coexistence de formes, l'inclusion des effets

d'appariement et des effets dynamiques (tels que la restauration des symétries brisées et le mélange de configurations) qui ne sont pas pris en compte dans le présent travail peuvent jouer un rôle non négligeable. Ceci pourrait faire l'objet d'études futures.

Annexe A

Décomposition des fonctions d'onde individuelles

Le développement des fonctions d'onde individuelles sur une base $\phi_\alpha(r, \sigma)$ est donné par :

$$\varphi_i(r, \sigma, \tau) = \chi_\tau \sum_\alpha C_\alpha^{(i)} \phi_\alpha(r, \sigma)$$

tel que χ_τ est la fonction d'isospin, qui demontre que les coefficients $C_\alpha^{(i)}$ sont les composantes du vecteur propre de h_{HF} associé à la valeur propre e_i :

$$\sum_\beta h_{\alpha\beta}^{(\tau)} C_\beta^{(i)} = e_i C_\alpha^{(i)}$$

Avec

$$\begin{aligned} h_{\alpha\beta}^{(\tau)} &= \langle \phi_\alpha | h_{\alpha\beta}^{(\tau)} | \phi_\beta \rangle \\ &= \int d^3r \phi_\alpha^*(r, \sigma) h_{HF}^{(\tau)} \phi_\beta(r, \sigma) \end{aligned}$$

La base de décomposition des fonctions d'onde individuelles qu'on a utilisé est l'oscillateur harmonique (B.O.H.S.A) [16] à symétrie axiale son les mêmes :

$$\varphi_\alpha(r, \sigma) = \chi_\Sigma Z_{n_z}(z) R_{n_r}^\Lambda(r) \Phi^\Lambda(\varphi)$$

où $R_{n_r}^\Lambda(r)$ est la fonction radiale choisie de sorte que $\Phi_{n_r}^\Lambda(r, \varphi) = R_{n_r}^\Lambda(r)\Phi^\Lambda(\varphi)$ soit fonction propre de l'oscillateur harmonique radial :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Phi_{n_r}^\Lambda(r, \sigma) + \frac{1}{2}mw_\perp^2r^2\Phi_{n_r}^\Lambda(r, \sigma) = E_{n_r}^\Lambda\Phi_{n_r}^\Lambda(r, \sigma)$$

avec $E_{n_r}^\Lambda = \hbar w_\perp(n_\perp + 1)$, $n_\perp = 2n_r + |\Lambda|$, $n_r \in N$ et $\Lambda \in Z$. La fonction $R_{n_r}^\Lambda$ normée à l'unité s'écrit alors :

$$R_{n_r}^\Lambda(r) = N_{n_r}^\Lambda\sqrt{2}\beta_\perp e^{-\frac{a}{2}}a^{\frac{\Lambda}{2}}L_{n_r}^\Lambda(a)$$

où $\beta_\perp = \sqrt{\frac{mw_\perp}{\hbar}}$ et $a = \beta_\perp r^2$. La fonction $L_{n_r}^\Lambda$ est le polynôme de laguerre de degré n_r , de norme $\frac{1}{N_{n_r}^\Lambda}$. On associe, sur l'intervalle $[0, +\infty[$, les polynômes orthogonaux de laguerre à la fonction de poids $e^{-a}a^\Lambda$:

$$\int_0^\infty da e^{-a}a^\Lambda L_{n_r}^\Lambda(a)L_{n_r'}^\Lambda(a) = \frac{\delta_{n_r n_r'}}{(N_{n_r}^\Lambda)^2}$$

La fonction $Z_{n_z}(z)$ est une fonction propre de l'oscillateur harmonique à une dimension suivant la direction z :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 Z_{n_z}(z) + \frac{1}{2}mw_z^2z^2 Z_{n_z}(z) = E_{n_z}Z_{n_z}(z)$$

avec $E_{n_z} = \hbar w_z(n_z + 1)$, $n_z \in N$. la fonction $Z_{n_z}(z)$ normée à un est donné par :

$$Z_{n_z}(z) = N_{n_z}\sqrt{\beta_z}H_{n_z}(\xi)e^{-\frac{\xi^2}{2}}$$

où $\beta_z = \sqrt{\frac{mw_z}{\hbar}}$ et $\xi = \beta_z z$. la fonction H_{n_z} est le polynôme d'Hermite de degré n_z , de norme $\frac{1}{N_{n_z}}$. On associe, sur l'intervalle $]-\infty, +\infty[$, les polynômes orthogonaux d'Hermite à la fonction de poids $e^{-\xi^2}$:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\xi e^{-\xi^2} H_{n_z}(\xi) = \frac{\delta_{n_z n_z'}}{(N_{n_z})^2}$$

Dans le cas où on ne peut pas utiliser la base complète à cause des raisons évidentes d'une part et les noyaux de notre étude sont connus pour être des noyaux déformés et axiaux d'autre part. Dans ce cas on décompose les fonctions d'onde individuelles sur une base tronquée de l'oscillateur harmonique axialement déformé (B.O.H.S.A) qui se caractérise par deux paramètres ω_\perp et ω_z . On définit les autres paramètres :

$$q = \frac{w_{\perp}}{w_z}$$

$$b = \sqrt{\frac{mw_0}{\hbar}}$$

où q est le paramètre de déformation, b est la constante de l'oscillateur harmonique sphérique et $\omega_0 = (w_{\perp}^2 w_z)^{\frac{1}{2}}$. Il existe plusieurs types de prescription pour la troncature de la base, on peut inclure tous les états propres de l'oscillateur déformé jusqu'à un certain nombre de quanta N (N représente la taille de la base) c'est ce que nous appellerons la prescription de troncature 1 :

$$n_{\perp} + n_z \leq N$$

tel que n_z est le nombre de quanta dans la direction de symétrie z et n_{\perp} est le nombre de quanta dans les directions perpendiculaires à l'axe de symétrie. Une autre prescription (la prescription de troncature 2) utilise la coupure en énergie suivante :

$$\hbar w_{\perp}(n_{\perp} + 1) + \hbar w_z(n_z + \frac{1}{2}) \leq \hbar w_0(N_0 + 2)$$

Les deux prescriptions sont équivalentes dans le cas sphérique. Dans tous les calculs réalisés dans le cadre de ce travail, nous avons considéré 14 couches majeures d'oscillateur et la deuxième prescription de troncature qui est mieux adaptée aux cas des noyaux déformés.

Annexe B

Eléments de matrice de h

La réduction de la résolution des équations de Hartree-Fock à la décomposition des fonction d'onde individuelles sur la base (infinie mais dénombrable) de l'oscillateur harmonique à symétrie axiale (B.O.H.S.A), et après on fait la diagonalisation de la matrice du Hamiltonien de Hartree-Fock dans cette base. Etant infinie, cette base doit évidemment être tronquée dans tout calcul pratique. Comme cela a été proposé dans la référence [35].

On définit un état propre quelconque de cette base par les quatre nombres quantiques usuels n_z , n_\perp , Λ et Σ . L'élément de matrice de h entre deux états $|\alpha\rangle = |n_z, n_\perp, \Lambda, \Sigma\rangle$, et $|\beta\rangle = |n'_z, n'_\perp, \Lambda', \Sigma'\rangle$ s'écrit :

$$\begin{aligned} h_{\alpha\beta} &= \langle\alpha| h |\beta\rangle \\ &= \langle\alpha| -\vec{\nabla} \frac{\hbar^2}{2m_\tau^*(r)} \vec{\nabla} + U_\tau(r) + \vec{\nabla} W_\tau(r) \left(-i\vec{\nabla} \cdot \vec{\sigma}\right) |\beta\rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle\alpha| -\vec{\nabla} \frac{\hbar^2}{2m_\tau^*(r)} \vec{\nabla} |\beta\rangle &= \frac{\hbar^2}{2m^*(a, \xi)} N_{n_z} N_{n'_z} N_{n_r}^\Lambda N_{n'_r}^{\Lambda'} \int_0^{+\infty} da a^{\Lambda-1} e^{-a} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi} d\xi \times \\ &\quad \{ \beta_z^2 \tilde{H}_{n_z}(\xi) L_{n_r}^\Lambda(a) a + \beta_\perp^2 H_{n_z}(\xi) H_{n'_z}(\xi) \\ &\quad \times [\tilde{L}_{n_r}^\Lambda(a) \tilde{L}_{n'_r}^{\Lambda'}(a) + \Lambda \Lambda' L_{n_r}^\Lambda(a) L_{n'_r}^{\Lambda'}(a)] \} \end{aligned}$$

où $n_r = \frac{(n_\perp - \Lambda)}{2}$.

Damgaard et all. [39] ont calculé le terme du potentiel central et potentiel spin-orbite.

Ils s'expriment respectivement comme :

$$\langle \alpha | U(r) | \beta \rangle = \delta_{\Lambda\Lambda'} \delta_{\Xi\Xi'} N_{n_z} N_{n'_z} N_{n_r}^\Lambda N_{n'_r}^{\Lambda'} \int_0^{+\infty} da a^\Lambda e^{-a} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2} d\xi \times \\ H_{n_z}(\xi) H_{n'_z}(\xi) L_{n_r}^\Lambda(a) L_{n'_r}^{\Lambda'}(a) U(a, \xi)$$

$$\langle \alpha | \vec{\nabla} W_\tau(r) \left(-i \vec{\nabla} \cdot \vec{\sigma} \right) | \beta \rangle = N_{n_z} N_{n'_z} N_{n_r}^\Lambda N_{n'_r}^{\Lambda'} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2} d\xi \int_0^{+\infty} da a^{\frac{(\Lambda+\Lambda'-2)}{2}} e^{-a} \\ \times \left\{ -2\delta_{\Sigma\Sigma'} \delta_{\Lambda\Lambda'} \Sigma \Lambda \beta_\perp^2 H_{n_z}(\xi) H_{n'_z}(\xi) \left[\tilde{L}_{n_r}^\Lambda(a) L_{n'_r}^{\Lambda'}(a) + L_{n_r}^\Lambda(a) \tilde{L}_{n'_r}^{\Lambda'}(a) \right] \right. \\ + (1 - \delta_{\Sigma\Sigma'}) \beta_z \beta_\perp a^{\frac{1}{2}} \{ \tilde{H}_{n_z}(\xi) H_{n'_z}(\xi) L_{n_r}^\Lambda(a) \\ \times \left[(\Lambda' - \Lambda) \tilde{L}_{n_r}^\Lambda(a)(a) + \Lambda' L_{n'_r}^{\Lambda'}(a) \right] \\ \left. + \tilde{H}_{n'_z}(\xi) H_{n_z}(\xi) L_{n'_r}^{\Lambda'}(a) \left[(\Lambda' - \Lambda) \tilde{L}_{n_r}^\Lambda(a) + \Lambda L_{n_r}^\Lambda(a) \right] W(a, \xi) \right\}$$

Dans le cas général les intégrales sont calculées grâce aux formules d'intégration de Gauss-Hermite à 20 points (pour la variable ξ) et de Gauss-laguerre à 10 points (pour la variable a). L'étude de L.Bonneau sur la fission [27] confirme que ceci est suffisant pour des déformations faibles. Pour effectuer les intégrations on utilise les valeurs positives de ξ_p car ces états possèdent la symétrie de réflexion par rapport à un plan équatorial, ce qui impose aux états à une particule d'être des états propres de l'opérateur de parité.

Bibliographie

- [1] P. Ring and P. Schuk "*The Nuclear Many Body Problem*" (Springer, Berlin ; 1980).
- [2] W Greiner. J. A. Maruhn "*Nuclear Models*" (Springer, Berlin, 1995).
- [3] A. Bohr, B. R. Mottelson "*Nuclear Structure*" (Benjamin, New York, 1969).
- [4] A. Messiah, "*Mécanique quantique*" (Dunod, paris, 1960).
- [5] Ph. Quentin, Jour. Phys. 11 (1973) 101.
- [6] Ph. Quentin, H. Flocard, Ann. Rev. Nucl. Part. Sc. 28, (1978).523.
- [7] D. Vautherin and D. M. Brink, Phys. Rev. C5(1972) 626.
- [8] Dirk Röder, Jörg Ruppert , Dirk H. Rischke. Nucl. Phys A 775 (2006) 127.
- [9] D. R. Hartree ; Proc. Com. Phil. Soc. 24 (1928) 89.
- [10] J.F. Berger, École Int. Joliot-Curie de Phys. Nucl, Maubuisson, France, 1991.
- [11] M. Angeles Pérez-García. Phys. Rev.C80 (2009) 045804.
- [12] J. W. Holt, N. Kaiser, and W. Weise. Phys. Rev. C81.(2010) 024002.
- [13] B. K. Agrawal, S. Shlomo, and V. Kim Au. Phys. Rev. C70 (2004) 057302.
- [14] D. Davesne, M. Martini, K. Bennaceur, and J. Meyer. Phys. Rev. C 80, (2009) 024314.
- [15] J. Erler, P. Klüpfel, P. G. Reinhard. arXiv :1009.0624.
- [16] M.V. Stoitsov, J. Dobaczewski, W. Nazarewicz, P. Ring. Phys. Rev. C167 (2005) 43-63.
- [17] J. Terasaki, H. Flocard, P. H. Heenen, P. Bonche. arXiv :nucl-th/9612058.
- [18] H. Nakada, . Phys. Rev. C81 (2010) 027301.
- [19] F. Minato, S. Chiba, K. Hagino. Nucl. Phys. A831. (2009) 150–162.
- [20] K. T. Lesko. Phys. Rev. 20. (1990)65.
- [21] D. L. Hendrie. Phys. Rev. 31. 7. (1973)478.

-
- [22] H. Chandra. *Pyhs. Rev.*4. (1969)185.
- [23] R. P. Chasman. *Pyhs. Rev.* 3. (1983)28.
- [24] Ph. Quentin, *Jour. Phys.* 36 (1975)29.
- [25] W. J. Swiatecki. *Pyhs. Rev.* 4. (1956)104.
- [26] Krishna Kumar. *Phys. Rev.* 28. (1973) 249.
- [27] M. B. Smith, et all. *Phys. Rev.* C61. (2000) 034314.
- [28] N. Hinohara, T. Nakatsukasa, M. Matsuo, K. Matsuyanagi. *Phys.Rev.*C80(2009) 014305.
- [29] K. Kaneko, M. Hasegawa, and T. Mizusaki. *Phys. Rev C* 70. (2004)051301.
- [30] M. Bender, P. Bonche, and P.-H. Heenen. *Phys. Rev. C* 74. (2006)024312.
- [31] Masaaki Kimura, Hisashi Horiuchi. *Nucl. Phys.* A767. (2006) 58.
- [32] M. A. Cardona, S. Lunardi and D. Bazzacco, G. de Angelis and V. Roca. *Phys Rev.* C2. (1991)44.
- [33] Ph. Quentin, *Jour. Phys.* 11 (1975)5-29
- [34] A. Leviatan. *Nucl. Phys.* A 788. (2007)100.
- [35] F. Minato, S. Chiba, K. Hagino. *Phys. Rev.*A831 (2009) 150.
- [36] I. Angeli, *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, V87 (2004) 185.
- [37] M.R. Oudih, M. Fella, N.H. Allal, and N. Benhamouda. *Nucl. Phys.* A834. (2010) 479.
- [38] S. RAMAN, C.W. NESTOR JR., P. TIKKANEN, *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, V78, (2001)128.
- [39] M. Grasso, Thèse de doctorat. Université Paris Sud 11 (2010).