

N°= d'ordre : 09/2010-M/PH

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

UNIVERSITE DES SCIENCES ET DE LA TECHNOLOGIE
HOUARI BOUMEDIENE - U.S.T.H.B –
FACULTE DE PHYSIQUE



MEMOIRE

Présenté pour l'obtention du diplôme de MAGISTER

Spécialité : Physique Théorique des Basses et Moyennes Energies

Par : Belayadi Adel

Thème

**LE PRINCIPE DE PAULI DANS LA THEORIE
DU CHAMP MOYEN INDEPENDANT DU
TEMPS**

Soutenu le: 21/11/2010 devant le jury composé de :

Mme A. H. HAMICI	Maître de conférences/A à l' USTHB	Président
Mme F. MEKIDECHE-CHAFA	Professeur à l' USTHB	Directeur de thèse
Mr A. SMIDA	Professeur à l' USTHB	Examineur
Mlle A. KERMAOUI	Maître de conférences/A à l' USTHB	Examineur
Mme L. AIT GOUGAM-TRIBECHE	Maître de conférences/B à l' USTHB	Invité

Remerciements

Ce travail a été effectué au Laboratoire de Physique Théorique de la Faculté de Physique de l'USTHB sous la direction de Madame F. MEKIDECHE-CHAFA, professeur à l'USTHB. Je lui exprime ma profonde gratitude pour m'avoir guidée dans ce travail. Je ne saurais la remercier suffisamment pour son aide qu'elle m'a prodigué jusqu'à la fin.

Je remercie vivement Monsieur A.SMIDA, Professeur à l'USTHB, pour avoir accepté la présidence du jury de soutenance.

Je remercie vivement Madame A. H. HAMICI, maître de conférences à l'USTHB, à Mademoiselle A. KERMAOUI, maître de conférence à l'USTHB, et à Madame L. AIT GOUGAM-TRIBECHE, maître de conférences à l'USTHB qui ont bien voulu participer au jury et juger ce travail.

J'adresse mes sincères remerciements à tous mes amis pour leur soutien constant tout au long de la préparation de ce magister.

Ma profonde reconnaissance s'adresse à mes parents qui m'ont appris à aimer la science et pour leur soutien moral.

Je remercie ma femme, mes sœurs et mon frère pour leur soutien moral.

Sommaire

INTRODUCTION	3
Chapitre I : Formalisme général de la Théorie du Champ Moyen Indépendant du Temps	6
I-1 Introduction	7
I-2 Méthode de diagonalisation.....	9
I-3 Méthode d'inversion	11
Chapitre II : Formalisme général de la Théorie du Champ Moyen Indépendant du Temps Antisymétrisée	19
II-1 Introduction	20
II-2 Fonctionnelles variationnelles antisymétriques	22
II-3 La théorie du champ moyen indépendant du temps antisymétrisée.....	27
Chapitre III : Les symétries self-consistantes	39
III-1 Introduction.....	40
III-2 Opérateur unitaire.....	40
III-3 Opérateur anti-unitaire.....	45
Chapitre IV : Diffusion (α-α)	50
IV-1 Introduction	51
IV-2 Application numérique : diffusion élastique (α - α).....	51
IV-3 Résultats numériques et discussion	53
Conclusion	57
Références	61

Introduction

INTRODUCTION

En physique nucléaire et atomique, on a constamment besoin de mesurer des sections efficaces ainsi que de faire des prédictions théoriques sur ces mesures.

Plusieurs travaux [1-7] ayant porté sur l'étude des collisions avec des forces de courte portée à l'aide de la théorie du champ moyen indépendant du temps - TIMF - ont montré la validité de cette approche pour le calcul des amplitudes des collisions.

On sait, à travers les travaux de Giraud et collaborateurs [1,8], que le principe variationnel de Schwinger permet d'obtenir des résolvantes. Ces travaux ont aussi montré que l'utilisation de la théorie du champ moyen indépendant du temps - TIMF - basée sur ce principe variationnel, facilite l'étude des collisions. Cette théorie microscopique semble particulièrement adaptée à l'étude des collision aux énergies intermédiaires.

Kessal [9-12] s'est penché sur le cas des potentiels à courte portée, illustré par des exemples de physique nucléaire. Il a testé la validité de la TIMF pour ce type de potentiels.

Dans sa thèse, Mekideche [7] s'est intéressée au problème Coulombien à trois corps tel qu'il se pose pour la description de l'atome d'Hélium. Elle a testé l'approche TIMF et a montré que l'interaction coulombienne peut facilement être introduite dans le formalisme de la TIMF.

Yekken [13], dans son travail, s'est aussi intéressée à l'étude des collisions avec des forces à longue portée toujours à l'aide de la théorie TIMF. Elle a appliqué cette théorie générale à deux cas particuliers de forces à longue portée. Son travail a testé l'efficacité de l'approche TIMF et a montré que les forces Coulombiennes conservent le caractère de bonne approximation qu'elle avait déjà montré pour des systèmes de forces à courte portée.

Dans son mémoire, Kadem [14] a présenté une simplification des équations de Faddeev [15-18] pour le problème à trois corps c'est-à-dire réduire la dimension de ces équations pour rendre leur résolution possible numériquement. La résolution exacte de ce système de trois équations étant très difficile, il était donc nécessaire de faire appel à des méthodes approximatives [19-20].

Dans une première partie, nous rappelons le formalisme de cette théorie ainsi que le procédé itératif menant à la résolution du système d'équations variationnelles self-consistantes.

La TIMF satisfait à la condition de réduction de dimension et remplace l'inversion de l'opérateur à N corps par N inversions à un corps. Mais, cela présente un paradoxe qui est la non linéarité de la TIMF qui approxime un problème initialement linéaire. Ceci est dû à la structure de couplage entre les $2N$ inversions réduites. Malgré ce paradoxe, plusieurs tests numériques portant sur la validité de la TIMF dans le cas de $N = 2, 3, 4$ ont été satisfaisants [7,21].

Dans une seconde phase, nous étendons le champ d'application de la TIMF en traitant une étude sur l'antisymétrisation entre les fermions constitutifs des noyaux qui est un problème traditionnel assez ardu de la théorie des collisions.

Pour valider cette méthode approximative, il est important de ne pas esquiver cette question et donc d'introduire le principe de Pauli dans le formalisme de la TIMF [22,23].

Pour cela, une forme plus adaptée de l'opérateur de transition est définie par l'introduction d'un opérateur d'antisymétrisation. En réécrivant toutes les relations de base qui sous tendent la TIMF, on arrive à un nouveau formalisme celui de la TIMF antisymétrisée.

Dans une troisième partie nous illustrons l'importance de certaines symétries élémentaires comme le renversement du temps, la parité, qui jouent un rôle fondamental en physique. Leur connaissance permet souvent de simplifier considérablement la solution de certains problèmes.

Dans une quatrième partie, nous passons à l'application de la TIMF antisymétrisée, nous traitons en particulier le cas de la diffusion à l'avant (α - α) [23]. C'est précisément un cas où des symétries supplémentaires entre bras et kets (renversement du temps), entre projectile et cible (parité) et entre nucléons eux-mêmes (renversement de spin et isospin) permettent de réduire le nombre d'équations indépendantes à résoudre.

Nous avons choisi de tracer le terme de Born antisymétrisé et non antisymétrisé pour différentes valeurs de l'impulsion et pour diverses valeurs β de la largeur de la fonction de voie gaussienne.

Nous terminons par une conclusion, ainsi que la présentation de perspectives futures.

CHAPITRE I

Formalisme général de la Théorie du Champ

Moyen Indépendant du Temps

Formalisme général de la théorie du champ moyen indépendant du temps

I-1 Introduction

Dans la théorie des collisions, l'équation centrale est l'équation de Lippmann Schwinger qui exprime l'état du système $|\psi\rangle$ [24]:

$$|\psi\rangle = |\vec{k}\rangle + GV|\psi\rangle \quad (\text{I-1})$$

où l'opérateur de Green $G = (E-H)^{-1}$ joue un rôle important avec E l'énergie du système et H son hamiltonien. \vec{k} est le vecteur d'onde initial. Notons que le calcul de G s'avère ardu lorsque le nombre de particules N est grand ($N \geq 2$) [25, 26]

Considérons un système à N particules régi par un hamiltonien H qui s'écrit :

$$H = \sum_i t_i + \sum_{j>i} v_{ij} \quad (\text{I-2})$$

où t_i représente l'énergie cinétique à un corps et v_{ij} l'énergie d'interaction à deux corps. Précisons que seul ce type d'interaction à deux corps est considéré dans notre étude.

Parmi les grandeurs caractéristiques de la collision de deux corps, citons les sections efficaces différentielle et totale. La section efficace différentielle par rapport à l'angle de solide Ω est théoriquement donnée par la relation suivante [24] :

$$\frac{d\sigma_{i \rightarrow f}}{d\Omega_{i \rightarrow f}} = \frac{2\pi}{\hbar v_i} |T_{i \rightarrow f}|^2 \rho_f(E) \quad (\text{I-3})$$

où v_i est la vitesse relative initiale et $\rho_f(E)$ désigne la densité des états finaux [24] .

L'amplitude de transition $T_{i \rightarrow f}$, entre les voies initiale (i) et finale (f), est définie comme suit [23,24]:

$$T_{i \rightarrow f} = \langle \psi' / T / \psi \rangle \quad (\text{I-4})$$

$$T = V' + V' G V \quad (\text{I-5})$$

ψ et ψ' sont respectivement les fonctions d'ondes des voies initiale et finale. V et V' sont les potentiels de ces mêmes voies respectivement.

Ces deux équations (I-4, I-5) nous donnent le terme de Born :

$$T^B = \langle \psi' / V' / \psi \rangle \quad (\text{I-6})$$

Ainsi que l'amplitude de propagation :

$$D = \langle \psi' / V' G V / \psi \rangle \quad (\text{I-7})$$

En posant

$$|\chi\rangle = V|\psi\rangle, \quad |\chi'\rangle = V'|\psi'\rangle \quad (\text{I-8})$$

les fonctions de voies, l'amplitude de propagation D devient :

$$D = \langle \chi' / G / \chi \rangle \quad (\text{I-9})$$

En général, beaucoup d'efforts sont consacrés au calcul de l'amplitude de propagation. A cet effet, nous nous sommes particulièrement intéressés aux deux méthodes les plus utilisées, à savoir la méthode de diagonalisation et la méthode d'inversion.

I-2 Méthode de diagonalisation

De nombreux travaux [27,30] ont été consacrés à la diagonalisation de l'hamiltonien H du système. Parmi les méthodes utilisées, citons les approches de Hartree et Hartree-Fock. Pour cela, considérons la fonctionnelle de Rayleigh- Ritz donnée par [24]:

$$F(\phi, \phi') = \langle \phi' | (H - E) | \phi \rangle \quad (\text{I-10})$$

où ϕ, ϕ' sont respectivement des fonctions flexibles et E un multiplicateur de Lagrange.

On obtient l'équation de Schrödinger si les stationnarités de F par rapport à $|\phi\rangle$ et $\langle \phi'|$ sont vérifiées; à savoir :

$$\frac{\partial F}{\partial \langle \phi'|} = 0 \Rightarrow \quad (H - E)|\phi\rangle = 0 \quad (\text{I-11.a})$$

$$\frac{\partial F}{\partial |\phi\rangle} = 0 \Rightarrow \quad \langle \phi'| (H - E) = 0 \quad (\text{I-11.b})$$

Les approches de Hartree et Hartree-Fock se basent sur une expression particulière des solutions des équations précédentes. Il s'agit de décomposer les fonctions d'ondes ϕ et ϕ' en produit d'orbitales individuelles indépendantes φ_i (Hartree) [24] :

$$|\phi\rangle = \prod_i |\varphi_i\rangle, \quad \langle \phi'| = \prod_i \langle \varphi'_i| \quad (\text{I-12})$$

ou sous forme de déterminant de Slater de ces mêmes orbitales (Hartree Fock) [24].

En considérant le développement (I-12), la fonctionnelle F devient :

$$\begin{aligned}
F &= \prod_i [\langle \varphi_i' | (\sum t_i + \sum_{j>i} v_{ij} - E) | \varphi_i \rangle] \\
&= \sum_i \langle \varphi_i' | t | \varphi_i \rangle \prod_{j \neq i} \langle \varphi_j' | \varphi_j \rangle \\
&\quad + \sum_{j>i} \langle \varphi_j' \varphi_i' | v | \varphi_i \varphi_j \rangle \prod_{\substack{k \neq i \\ k \neq j}} \langle \varphi_k' | \varphi_k \rangle - E \prod_i \langle \varphi_i' | \varphi_i \rangle
\end{aligned} \tag{I-13}$$

En minimisant la fonctionnelle F par rapport aux orbitales $\langle \varphi_i' |$ où $i=1, \dots, N$, on obtient les conditions de stationnarités ($\partial F / \partial \langle \varphi_i' | = 0$) :

$$\begin{aligned}
[E - t_i - \sum_{j \neq i} \frac{\langle \varphi_j' | t | \varphi_j \rangle}{\langle \varphi_j' | \varphi_j \rangle} - \sum_{k>j} \frac{\langle \varphi_j' \varphi_k' | v | \varphi_j \varphi_k \rangle}{\langle \varphi_j' | \varphi_j \rangle \langle \varphi_k' | \varphi_k \rangle} \\
- \sum_{j \neq i} \frac{\langle \varphi_j' | v | \varphi_j \rangle}{\langle \varphi_j' | \varphi_j \rangle}] / \varphi_i \rangle = 0
\end{aligned} \tag{I-14a}$$

et par rapport à $| \varphi_i \rangle$, les conditions de stationnarité ($\partial F / \partial | \varphi_i \rangle = 0$, $i=1, \dots, N$) donnent :

$$\begin{aligned}
\langle \varphi_i' | [E - t_i - \sum_{j \neq i} \frac{\langle \varphi_j' | t | \varphi_j \rangle}{\langle \varphi_j' | \varphi_j \rangle} - \sum_{k>j} \frac{\langle \varphi_j' \varphi_k' | v | \varphi_j \varphi_k \rangle}{\langle \varphi_j' | \varphi_j \rangle \langle \varphi_k' | \varphi_k \rangle} \\
- \sum_{j \neq i} \frac{\langle \varphi_j' | v | \varphi_j \rangle}{\langle \varphi_j' | \varphi_j \rangle}] = 0
\end{aligned} \tag{I-14b}$$

Ces deux relations (I-14a) et (I-14b) peuvent s'écrire sous les formes suivantes :

$$(\eta_i - t_i - u_i) / \varphi_i \rangle = 0 \tag{I-15a}$$

et

$$\langle \varphi_i' | (\eta_i - t_i - u_i) = 0 \tag{I-15b}$$

avec les η_i qui sont les self-énergies de Hartree :

$$\eta_i = E - \sum_{j \neq i} \frac{\langle \varphi_j | t | \varphi_j \rangle}{\langle \varphi_j | \varphi_j \rangle} - \sum_{\substack{k > j \\ j \neq i, k \neq i}} \frac{\langle \varphi_j | \varphi_k | v | \varphi_j \varphi_k \rangle}{\langle \varphi_j | \varphi_j \rangle \langle \varphi_k | \varphi_k \rangle} \quad (\text{I-16})$$

et u_i , les champs moyens self-consistants :

$$u(\vec{r}_i) = \int d\vec{r}' v(\vec{r} - \vec{r}') \sum_{j \neq i} \frac{\varphi_j(\vec{r}')^* \varphi_j(\vec{r}')}{\langle \varphi_j | \varphi_j \rangle} \quad (\text{I-17})$$

I-3 Méthode d'inversion :

Intéressons-nous maintenant à la seconde méthode qui est l'inversion. Pour inverser $(E-H)$ de façon un peu analogue à la diagonalisation de l'hamiltonien H , B.G Giraud et M.A Nagarajan [1-8] ont proposé la théorie du champ moyen indépendant du temps TIMF pour la description des collisions. Cette théorie est principalement basée sur :

1. Un principe variationnel pour le calcul de l'amplitude de collision. Ce principe devient très utile lorsque le nombre de particules N du système est grand.
2. Une représentation des états de voies par des paquets d'ondes indépendants du temps. Ceci facilite en pratique les calculs car nous nous retrouvons avec des fonctions d'onde de carré sommable.
3. Une énergie totale complexe $z = E + i\Gamma$ avec E sa partie réelle et Γ sa partie imaginaire finie. Ce choix est adopté dans le but d'avoir un propagateur G borné, et d'éviter ainsi les problèmes de singularités qui peuvent apparaître lorsqu'on travaille sur couche ($\Gamma=0$).

4. Une restriction des fonctions des voies et des fonctions d'essai à des produits de fonctions individuelles (ou à des déterminants de Slater dans le cas d'une antisymétrisation).

L'amplitude physique du propagateur D sera obtenue lorsque on fait tendre Γ vers zéro (limité sur couche), c'est à dire :

$$D = \lim_{\Gamma \rightarrow 0} \langle \chi' / G / \chi \rangle \quad (\text{I-18})$$

avec

$$G = (E + i\Gamma - H)^{-1} \quad (\text{I-19})$$

χ et χ' sont les fonctions de voie initiale et finale respectivement.

Nous pouvons montrer qu'une légère modification des équations de Hartree (- Fock) définie une approximation non perturbative des éléments de matrice de $G = (E - H)^{-1}$ pris entre l'état initial $|\chi\rangle$ et final $\langle\chi'|$.

Vérifions que l'amplitude $D = \langle\chi'|G/\chi\rangle$ est égale à la valeur stationnaire d'une fonctionnelle

$$F_1(\phi, \phi') = \langle\phi'/\chi\rangle + \langle\chi'/\phi\rangle - \langle\phi'/(z-H)/\phi\rangle \quad (\text{I-20})$$

En effet, les conditions de stationnarité de F_1 par rapport à $|\phi\rangle$ et $\langle\phi'|$ nous donnera les équations d'Euler- Lagrange qui s'écrivent comme :

$$\partial F_1 / \partial |\phi\rangle = 0 \Rightarrow \langle\chi'| - \langle\phi'/(z-H) = 0 \quad (\text{I-21a})$$

et

$$\partial F_1 / \partial \langle\phi'| = 0 \Rightarrow |\chi\rangle - (z-H)/\phi = 0 \quad (\text{I-21b})$$

En prenant $|\chi\rangle$ et $\langle\chi'|$ dans l'espace de Hilbert, et tant que l'énergie z est complexe, G est borné, alors ces équations nous donneront des solutions $|\phi\rangle$ et $\langle\phi'|$ qui appartiennent à l'espace de Hilbert [7, 24]. Les expressions de $|\phi\rangle$ et $\langle\phi'|$ qui nous donnent les stationnarités de F_1 sont alors :

$$|\phi\rangle = G|\chi\rangle ; \langle\phi'| = \langle\chi'|G \quad (\text{I-22})$$

En injectant l'expression de $|\phi\rangle$ et de $\langle\phi'|$ dans la fonctionnelle F_1 , on trouve :

$$F_1(sta) = \langle\chi'|G|\chi\rangle = D \quad (\text{I-23})$$

On peut aussi montrer que D peut-être également obtenu comme la valeur stationnaire d'une autre fonctionnelle $F_2(\phi, \phi')$ définie par :

$$F_2(\phi, \phi') = \frac{\langle\phi'| \chi \rangle \langle \chi' | \phi \rangle}{\langle\phi'|(z-H)|\phi\rangle} \quad (\text{I-24})$$

L'avantage de cette fonctionnelle F_2 est qu'elle présente un intérêt supplémentaire par rapport à F_1 dans la mesure où elle est indépendante des normes des fonctions ϕ et ϕ' . En effet, F_2 reste inchangée si on multiplie ϕ et ϕ' par des constantes λ et λ' par exemple :

$$F_2(\lambda\phi, \lambda'\phi') = F_2(\phi, \phi') \quad (\text{I-25})$$

Cette propriété nous permet de nous affranchir des normes des fonctions variationnelles ϕ et ϕ' .

En général nous imposons des restrictions sur les fonctions d'essai ϕ et ϕ' et la valeur stationnaire des fonctionnelles F_1 et F_2 nous donnera une approximation \overline{D} de l'amplitude de propagation D . Cette approximation \overline{D} sera meilleure et proche de D , si les fonctions d'essai ϕ et ϕ' seront bien choisies.

Considérons les états des voies initiale et finale $|\chi\rangle$ et $\langle\chi'|\$ respectivement comme des produits des orbitales individuelles :

$$|\chi\rangle = \prod_i |\chi_i\rangle, \quad \langle\chi'|\ = \prod_i \langle\chi'_i| \quad (\text{I-26})$$

et

$$|\phi\rangle = \prod_i |\phi_i\rangle, \quad \langle\phi'|\ = \prod_i \langle\phi'_i| \quad (\text{I-27})$$

D'après l'équation (I-22), Il est clair que $|\phi\rangle$ et $\langle\phi'|\$ contiennent des corrélations entre les particules.

En tenant compte des développements de $|\chi\rangle, \langle\chi'|\ , |\phi\rangle$ et $\langle\phi'|\$:

$$F_1(\phi, \phi') = \prod_i \langle\phi'_i|\chi_i\rangle + \prod_i \langle\chi'_i|\phi_i\rangle + \sum_i \langle\phi'_i|\chi_i\rangle \frac{\langle\phi'_i|\phi_i\rangle}{\langle\phi'_i|\phi_i\rangle} \\ + \sum_{i>j} \langle\phi'_i\phi'_j|v|\phi_i\phi_j\rangle \frac{\langle\phi'_i|\phi_i\rangle}{\langle\phi'_i|\phi_j\rangle \langle\phi'_j|\phi_j\rangle} - z \prod_i \langle\phi'_i|\phi_i\rangle \quad (\text{I-28})$$

avec:

$$\langle\phi'|\phi\rangle = \prod_i \langle\phi'_i|\phi_i\rangle \quad (\text{I-29a})$$

$$\langle\phi'|\chi\rangle = \prod_i \langle\phi'_i|\chi_i\rangle \quad (\text{I-29b})$$

$$\langle\chi'|\phi\rangle = \prod_i \langle\chi'_i|\phi_i\rangle \quad (\text{I-29c})$$

On calcule la stationnarité de F_1 par rapport à $\langle \varphi'_i / \rangle$, ($\partial F_1 / \partial \langle \varphi'_i / \rangle = 0$) et on trouve :

$$\frac{\langle \phi' / \phi \rangle}{\langle \varphi'_i / \varphi_i \rangle} \left[z - t - \sum_{j \neq i} \frac{\langle \varphi'_j | t | \varphi_j \rangle}{\langle \varphi'_j / \varphi_j \rangle} - \sum_{j < k} \frac{\langle \varphi'_j \varphi'_k | v | \varphi_j \varphi_k \rangle}{\langle \varphi'_j / \varphi_j \rangle \langle \varphi'_k / \varphi_k \rangle} - \sum_{j \neq i} \frac{\langle \varphi'_j | v | \varphi_j \rangle}{\langle \varphi'_j / \varphi_j \rangle} \right] / \varphi_i \rangle - \frac{\langle \phi' / \chi \rangle}{\langle \varphi'_i / \chi_i \rangle} / \chi_i \rangle = 0 \quad (\text{I-30a})$$

et la stationnarité de F_1 par rapport à $\langle \varphi_i \rangle$, ($\partial F_1 / \partial \langle \varphi_i \rangle = 0$) donne:

$$\frac{\langle \phi' / \phi \rangle}{\langle \varphi'_i / \varphi_i \rangle} \langle \varphi'_i / \rangle \left[z - t - \sum_{j \neq i} \frac{\langle \varphi'_j | t | \varphi_j \rangle}{\langle \varphi'_j / \varphi_j \rangle} - \sum_{j < k} \frac{\langle \varphi'_j \varphi'_k | V | \varphi_j \varphi_k \rangle}{\langle \varphi'_j / \varphi_j \rangle \langle \varphi'_k / \varphi_k \rangle} - \sum_{j \neq i} \frac{\langle \varphi'_j | v | \varphi_j \rangle}{\langle \varphi'_j / \varphi_j \rangle} \right] - \frac{\langle \chi' / \phi \rangle}{\langle \chi'_i / \varphi_i \rangle} \langle \chi'_i / \rangle = 0 \quad (\text{I-30b})$$

On obtient finalement 2N équations d'Euler-Lagrange à un corps couplées :

$$\partial F_1 / \partial \langle \varphi'_i / \rangle = 0 \Rightarrow (\eta_i - h_i) / \varphi_i \rangle = \lambda'_i / \chi_i \rangle \quad (\text{I-31a})$$

$$i = 1, \dots, N$$

$$\partial F_1 / \partial \langle \varphi_i \rangle = 0 \Rightarrow \langle \varphi'_i / (\eta_i - h_i) \rangle = \langle \chi'_i / \lambda'_i \rangle \quad (\text{I-31b})$$

avec les λ_i, λ'_i qui s'écrivent :

$$\lambda_i = \frac{\langle \phi' / \chi \rangle \langle \varphi'_i / \varphi_i \rangle}{\langle \phi' / \phi \rangle \langle \varphi'_i / \chi_i \rangle} \quad (\text{I-32a})$$

$$\lambda'_i = \frac{\langle \chi' / \phi \rangle \langle \varphi'_i / \varphi_i \rangle}{\langle \phi' / \phi \rangle \langle \chi'_i / \varphi_i \rangle} \quad (\text{I-32b})$$

η_i est la self- énergie complexe définie par :

$$\eta_i = z - \sum_{j \neq i} \frac{\langle \varphi'_j / t / \varphi_j \rangle}{\langle \varphi'_j / \varphi_j \rangle} - \sum_{j < k} \frac{\langle \varphi'_j \varphi'_k / v / \varphi_j \varphi_k \rangle}{\langle \varphi'_j / \varphi_j \rangle \langle \varphi'_k / \varphi_k \rangle} \quad (\text{I-33})$$

L'hamiltonien self- consistant à une particule h_i s'écrit comme :

$$h_i = t_i + u_i \quad (\text{I-34})$$

avec le champ self- consistant u_i donné par la relation :

$$u_i(\vec{r}) = \int d\vec{r}' v(\vec{r} - \vec{r}') \sum_{j \neq i} \frac{\varphi_j^*(\vec{r}') \varphi_j(\vec{r}')}{\langle \varphi'_j / \varphi_j \rangle} \quad (\text{I-35})$$

La valeur stationnaire de la fonctionnelle étant indépendante de la norme des fonctions d'essai, les facteurs λ_i et λ'_i peuvent être pris égaux à 1. Il suffit de prendre la fonctionnelle $F_2(\phi, \phi')$ et éviter ainsi les normes des fonctions d'essai. La condition de stationnarité de F_1 par rapport à $\langle \varphi'_i / \varphi_i \rangle$ et $\langle \varphi_i / \varphi'_i \rangle$ devient respectivement :

$$(\eta_i - h_i) / \langle \varphi_i \rangle = \langle \chi_i \rangle \quad (\text{I-36a})$$

et

$$\langle \varphi'_i / (\eta_i - h_i) \rangle = \langle \chi'_i / \varphi'_i \rangle \quad (\text{I-36b})$$

que nous pouvons réécrire sous les formes:

$$\langle \varphi_i \rangle = g_i \langle \chi_i \rangle \quad (\text{I-37a})$$

$$\langle \varphi'_i / \varphi'_i \rangle = \langle \chi'_i / g_i \rangle \quad (\text{I-37b})$$

où g_i est un propagateur à une particule :

$$g_i = (\eta_i - h_i)^{-1} \quad (\text{I-38})$$

Nous nous retrouvons donc avec l'inverse g_i , un opérateur à un corps plutôt que celui de G l'opérateur à N corps.

Nous pouvons affirmer, comme nous l'avons fait pour la diagonalisation, équation (I-15), que les équations variationnelles non linéaires et non homogènes (I-36) sont une généralisation des équations de Hartree, dirigées par des termes de source. Donc comme les équations de Hartree sont résolues par des méthodes itératives, il semble tout à fait logique de résoudre ces équations de la TIMF par des méthodes itératives jusqu'à convergence.

Alors que le résultat exact de notre problème linéaire est unique, l'approximation TIMF qui est non linéaire, peut engendrer plusieurs solutions. Il faut donc, dans chaque cas de collision, sélectionner la bonne solution physique qui se rapprochera le plus du résultat exact.

Dans ce sens, nous faisons appel à une théorie asymptotique [31] quand la partie imaginaire Γ de l'énergie totale est grande : quand $\Gamma \rightarrow \infty$ on prend $|\phi\rangle \rightarrow |\chi\rangle$.

Il s'agit donc, pour résoudre ces équations variationnelles, de poser au début de notre étude numérique, pour une grande valeur de la partie imaginaire Γ de l'énergie, $|\varphi_i\rangle = |\chi_i\rangle$ et $\langle \varphi'_i| = \langle \chi'_i|$. Lorsque la self-consistance est atteinte, les fonctions d'ondes $|\varphi_i\rangle$ et $\langle \varphi'_i|$ obtenues seront utilisées comme de nouvelles fonctions de départ pour une valeur de Γ légèrement réduite, et ainsi de suite jusqu'à atteindre la limite sur couche ($\Gamma = 0$) où l'énergie totale devient réelle $z = E$.

En cas des solutions multiples, on utilise divers critères de bon sens : continuité par rapport à des cas où la solution est connue, nature retardée de la solution, ...etc

Quand la solution multiple est sélectionnée et que les self-consistences des orbitales individuelles $|\varphi_i\rangle$ et $\langle\varphi_i|$ sont atteintes, leur insertion dans la fonctionnelle F_1 (ou F_2) nous donnera une approximation \overline{D} de l'amplitude exacte D .

Nous venons de voir que la TIMF satisfait la condition de réduction de dimension et remplace l'inversion de l'opérateur à N corps par N inversions à un corps. Mais cela présente un paradoxe qui est la non linéarité de la TIMF qui approche un problème initialement linéaire. Ceci est dû à la structure de couplage entre les $2N$ inversions réduites.

Malgré ce paradoxe, plusieurs tests numériques portant sur la validité de la TIMF dans le cas de $N=2, 3, 4$ ont été satisfaisants [7,13,21,32].

CHAPITRE II

Formalisme général de la Théorie

du Champ Moyen

Indépendant du Temps

Antisymétrisée

Formalisme général de la théorie du champ moyen indépendant du temps antisymétrisée

II-1 Introduction

De nombreux travaux ont montré que le principe variationnel de Schwinger permet le calcul pratique de résolvantes et que la TIMF basée sur ce principe variationnel facilite les calculs correspondants. Cette théorie microscopique semble particulièrement bien adaptée à l'étude des collisions nucléaires aux énergies intermédiaires.

Afin d'étendre le champ d'application de la TIMF, nous présentons dans ce travail une étude sur l'antisymétrisation entre les fermions constitutifs des noyaux qui est un problème traditionnel assez ardu de la théorie des collisions. Pour valider cette méthode approximative, il est important de ne pas esquiver cette question et donc d'introduire le principe de Pauli dans le formalisme de la TIMF [22,23].

Pour cela, une forme plus adaptée de l'opérateur de transition est définie où un opérateur d'antisymétrisation A est introduit [22].

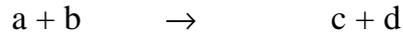
Nous définissons pour cela l'opérateur de transition [23]:

$$T = V' A + V' A G V \quad (\text{II-1})$$

Ici, V et V' représentent les potentiels d'interaction des voies initiale et finale, respectivement, G est l'opérateur de Green et A est la somme usuelle sur toutes les permutations (p) entre les nucléons [24] :

$$A = (N!)^{-1} \sum_p (-)^p P \quad (\text{II-2})$$

Soit une collision entre deux particules a et b :



L'hamiltonien qui décrit cette collision, si l'on néglige les interactions à trois corps (ou plus), s'écrit :

$$H = \sum_i t_i + \sum_{j>i} v_{ij} \quad (\text{II-3})$$

Les potentiels qui désignent les voies initiale (i) et finale (f) sont, respectivement définis comme [23] :

$$V = \sum_{i \in a, j \in b} v_{ij} \quad \text{et} \quad V' = \sum_{i \in c, j \in d} v_{ij} \quad (\text{II-4})$$

où les nucléons du projectile (a) et de la cible (b) sont distincts, de même pour les nucléons de l'éjectile (c) et de la cible résiduelle (d).

L'amplitude de transition s'écrit comme un élément de matrice T entre une onde initiale χ et une onde finale χ' .

Pour valider cette méthode approximative qui porte sur l'antisymétrisation, il est important d'adopter l'approche définie par Austern [22] qui consiste à :

1/ Calculer l'amplitude de transition T en tenant compte de l'anti-symétriseur, donc d'introduire le projecteur A dans son expression :

$$T = \langle \chi' / V' A + V' A G V / \chi \rangle \quad (\text{II-5})$$

Où

$$T^B = \langle \chi' / V' A / \chi \rangle \quad (\text{II-6})$$

représente le terme de Born antisymétrisé

et

$$D = \langle \chi' / V' A (z - H)^{-1} V / \chi \rangle \quad (\text{II-7})$$

est l'amplitude de propagation, z est l'énergie complexe retardée du système et H l'hamiltonien du système.

2/ Introduire les fonctions des voies χ et χ' comme des fonctions normalisées et non antisymétrisées. Ces fonctions sont choisies comme des produits de déterminants de Slater :

$$\chi = \chi_a(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_{N_a}) \chi_b(\vec{r}'_{N_a+1}, \vec{r}'_{N_a+2}, \dots, \vec{r}'_N) \quad (\text{II-8})$$

$$\chi' = \chi_c(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_{N_c}) \chi_d(\vec{r}'_{N_c+1}, \vec{r}'_{N_c+2}, \dots, \vec{r}'_N) \quad (\text{II-9})$$

c'est-à-dire que l'on considère une antisymétrisation interne pour les noyaux (a) et (b) séparément dans le cas de la fonction de voie χ et pour les noyaux (c) et (d) séparément dans le cas χ' .

II-2 Fonctionnelles variationnelles antisymétriques

Nous allons montrer que D est la valeur stationnaire de chacune de ces trois fonctionnelles suivantes dépendantes de deux fonctions d'essai ψ et ψ' [23] :

$$F_1(\psi, \psi') = \langle \psi' / AV / \chi \rangle + \langle \chi' / V' / \psi \rangle - \langle \psi' / (z - H) / \psi \rangle \quad (\text{II-10a})$$

$$F_2(\psi, \psi') = \langle \psi' / V / \chi \rangle + \langle \chi' / V' A / \psi \rangle - \langle \psi' / (z - H) / \psi \rangle \quad (\text{II-10b})$$

et

$$F_3(\psi, \psi') = \langle \psi' / AV / \chi \rangle + \langle \chi' / V' A / \psi \rangle - \langle \psi' / (z - H) / \psi \rangle \quad (\text{II-10c})$$

Ces trois expressions des fonctionnelles F_1 , F_2 et F_3 diffèrent entre elles par de légères différentes insertions du projecteur A .

Nous pouvons voir que le calcul des conditions de stationnarités de ces fonctionnelles permet d'arriver aux expressions des fonctions d'essai et d'obtenir à la fin l'expression de l'amplitude de propagation D .

➤ Pour la fonctionnelle F_1 :

Les conditions de stationnarités $\partial F_1 / \partial \langle \psi' | = 0$ et $\partial F_1 / \partial | \psi \rangle = 0$ donnent respectivement :

$$A V | \chi \rangle - (z - H) | \psi \rangle = 0 \quad (\text{II-11a})$$

$$\langle \chi' | V' - \langle \psi' | (z - H) = 0 \quad (\text{II-11b})$$

➤ Pour la fonctionnelle F_2

Les conditions de stationnarités $\partial F_2 / \partial \langle \psi' | = 0$ et $\partial F_2 / \partial | \psi \rangle = 0$ donnent respectivement :

$$V | \chi \rangle - (z - H) | \psi \rangle = 0 \quad (\text{II-12a})$$

$$\langle \chi' | V' A - \langle \psi' | (z - H) = 0 \quad (\text{II-12b})$$

➤ Pour la fonctionnelle F_3

Les conditions de stationnarités $\partial F_3 / \partial \langle \psi' | = 0$ et $\partial F_3 / \partial | \psi \rangle = 0$ donnent respectivement :

$$A V | \chi \rangle - (z - H) | \psi \rangle = 0 \quad (\text{II-13a})$$

$$\langle \chi' | V' A - \langle \psi' | (z - H) = 0 \quad (\text{II-13b})$$

Pour l'énergie z complexe, la résolvante totale $G = (z - H)^{-1}$ est un opérateur borné, défini de manière unique. Son action sur les vecteurs de carrés sommables ($V | \chi \rangle$, $A V | \chi \rangle$, $\langle \chi' | V'$ et $\langle \chi' | V' A$), où le potentiel est pris local, donne toujours des

vecteurs de carrés sommables qui appartiennent à l'espace de Hilbert [7,24]. Donc la stationnarité est atteinte pour une paire unique des fonctions d'essai, et à partir des équations (II-11, 12, 13), on déduit :

➤ Pour la fonctionnelle F_1 , les fonctions d'essai prennent les formes suivantes :

$$|\psi\rangle = GAV|\chi\rangle \quad (\text{II-14a})$$

$$\langle\psi'| = \langle\chi'|V'G \quad (\text{II-14b})$$

➤ Pour la fonctionnelle F_2 , elles s'écrivent :

$$|\psi\rangle = GV|\chi\rangle \quad (\text{II-15a})$$

$$\langle\psi'| = \langle\chi'|V'AG \quad (\text{II-15b})$$

➤ Et pour la fonctionnelle F_3 , les fonctions d'essai auront comme expressions :

$$|\psi\rangle = GAV|\chi\rangle \quad (\text{II-16a})$$

$$\langle\psi'| = \langle\chi'|V'AG \quad (\text{II-16b})$$

En réinjectant ces expressions de ψ et ψ' dans la fonctionnelle correspondante, nous trouvons alors la valeur stationnaire pour chaque fonctionnelle:

$$\begin{aligned} F_1(stas) = & (\langle\chi'|V'G)AV|\chi\rangle + \langle\chi'|V'(GAV|\chi\rangle) \\ & - (\langle\chi'|V'G)(z-H)(GAV|\chi\rangle) \end{aligned} \quad (\text{II-17})$$

$$\begin{aligned} F_2(stas) = & (\langle\chi'|V'AG)V|\chi\rangle + \langle\chi'|V'A(GV|\chi\rangle) \\ & - (\langle\chi'|V'AG)(z-H)(GV|\chi\rangle) \end{aligned} \quad (\text{II-18})$$

et

$$F_3(stas) = (\langle \chi' | V' A G \rangle A V | \chi \rangle + \langle \chi' | V' A (G A V | \chi \rangle) - (\langle \chi' | V' A G \rangle (z - H) (G A V | \chi \rangle) \quad (II-19)$$

en tenant compte du fait que A commute avec H et G [23,24] :

$$[A, H] = 0 \quad \text{et} \quad [A, G] = 0 \quad (II-20)$$

ainsi que $A^2 = A$, il en résulte que la valeur stationnaire de chaque fonctionnelle donne l'amplitude de propagation D , alors:

$$F_1(\psi, \psi') = F_2(\psi, \psi') = F_3(\psi, \psi') = D \quad (II-21)$$

Comme nous l'avons déjà vu dans le chapitre 1, en pratique l'utilisation des fonctions ψ et ψ' dans le calcul de l'amplitude de propagation $D(z)$ n'est pas chose aisée. En effet pour des calculs réalistes, c'est-à-dire à la limite sur couche $D(E + i0)$, la présence de l'opérateur de Green G [7,32] complique ces calculs. Pour cette raison, et afin de contourner cette difficulté, il est proposé une approche approximative où les fonctions des voies et les fonctions d'essai ψ et ψ' sont remplacées respectivement par des produits d'orbitales individuelles ou bien des déterminants de Slater de ces mêmes orbitales même dans le cas d'une antisymétrisation [23].

En analysant de plus près les expressions des trois fonctionnelles, nous remarquons que:

- La fonction ψ' de la fonctionnelle F_1 , Eq.(II-10a), possède la même antisymétrisation partielle que celle contenue dans χ' . La fonction ψ' peut alors s'écrire comme un produit de deux déterminants de Slater séparés $\psi'_c \psi'_d$. Par contre, la fonction ψ est complètement antisymétrisée du fait de la présence de A devant χ . Par conséquent ψ doit être un déterminant de Slater.

Cette approximation s'écrit alors :

$$F_1(\psi, \psi') = \langle \psi'_c \psi'_d / AV / \chi \rangle + \langle \chi' / V' / \psi \rangle - \langle \psi'_c \psi'_d / (z-H) / \psi \rangle \quad (\text{II-22})$$

- De la même façon, la fonction ψ de la fonctionnelle F_2 , Eq (II-10b), possède la même antisymétrisation partielle que celle contenue dans χ . Donc la fonction ψ peut s'écrire comme un produit de deux déterminants de Slater séparés $\psi_a \psi_b$. Par contre, la fonction ψ' est complètement antisymétrisée du fait de la présence de A devant χ' . Par conséquent ψ' doit être un déterminant de Slater. Cette approximation s'écrit alors :

$$F_2(\psi, \psi') = \langle \psi' / V / \chi \rangle + \langle \chi' / V' A / \psi_a \psi_b \rangle - \langle \psi' / (z-H) / \psi_a \psi_b \rangle \quad (\text{II-23})$$

- Enfin, dans le cas de la fonctionnelle F_3 , Eq(II-10c), nous remarquons que les fonctions d'essai ψ et ψ' doivent être entièrement antisymétrisées. Pour cette raison, ψ et ψ' sont toutes les deux des déterminants de Slater. L'approximation de la fonctionnelle F_3 s'écrit alors:

$$F_3(\psi, \psi') = \langle \psi' / V / \chi \rangle + \langle \chi' / V' / \psi \rangle - \langle \psi' / (z-H) / \psi \rangle \quad (\text{II-24})$$

où les insertions de A présent dans l'équation (II-10c) sont inutiles puisque ψ et ψ' sont tout les deux des déterminants de Slater.

Nous montrons que le premier terme du membre de droite de l'équation (II-22) ($\langle \psi'_c \psi'_d / AV / \chi \rangle$) et le second terme de l'équation (II-23) ($\langle \chi' / V' A / \psi_a \psi_b \rangle$) contiennent explicitement l'opérateur A qui projette les produits de déterminants de Slater $\psi_a \psi_b$, $\psi'_c \psi'_d$, en des déterminant complets ψ , ψ' , respectivement.

La même propriété est valable au troisième terme de l'équation (II-22), car l'opérateur A implicitement contenue dans ψ commute avec H et conduit à une antisymétrisation

totale dans le bra. Un argument similaire est donné pour le troisième terme de l'équation (II-23). Or pourrait conclure que F_1 , F_2 et F_3 , qui sont équivalentes quand ψ et ψ' sont des fonctions d'essai complètement flexibles, restent toujours équivalentes quand on tente une séparation en degrés de liberté des particules individuelles.

II-3 La théorie du champ moyen indépendant du temps antisymétrisée

Nous nous proposons d'appliquer la TIMF au cas de la fonctionnelle F_3 définie dans l'équation (II-10c).

Afin de simplifier les calculs, les fonctions des voies initiale et finale sont écrites sous les formes suivantes [22,23] :

$$|\tilde{\chi}\rangle = \prod_{\alpha=1}^{N_a} |\chi_\alpha\rangle \prod_{\beta=N_a+1}^N |\chi_\beta\rangle \quad (\text{II-25a})$$

$$\langle \tilde{\chi}'| = \prod_{\gamma=1}^{N_c} \langle \chi'_\gamma| \prod_{\delta=N_c+1}^N \langle \chi'_\delta| \quad (\text{II-25b})$$

comme des purs produits d'orbitales individuelles, avec les orbitales :

$\chi_\alpha, \alpha = 1, \dots, N_a$, qui sont des fonctions d'onde accélérées pour les nucléons du projectile a .

$\chi_\beta, \beta = N_a + 1, \dots, N$ sont les fonctions d'onde accélérées pour les nucléons de la cible b .

$\chi'_\gamma, \gamma = 1, \dots, N_c$ sont les fonctions d'onde accélérées pour les nucléons de l'éjectile c .

$\chi'_\delta, \delta = N_c + 1, \dots, N$ sont les fonctions d'onde accélérées pour les nucléons de la cible résiduelle d .

On approche les fonctions d'ondes ψ et ψ' respectivement par les déterminants de Slater $\phi = \left(\frac{1}{N!}\right)^{1/2} \tilde{\phi}$ et $\phi' = \left(\frac{1}{N!}\right)^{1/2} \tilde{\phi}'$, avec :

$$|\tilde{\phi}\rangle = \det\{|\varphi_i\rangle\} \quad (\text{II-26a})$$

$$\langle\tilde{\phi}'| = \det\{\langle\varphi'_i|\} \quad (\text{II-26b})$$

La nouvelle expression de la fonctionnelle F_3 peut s'écrire sous la forme suivante:

$$F_3 = C + C' - D \quad (\text{II-27})$$

où les contributions C , C' et D sont données par :

$$C = ((N_a!N_b!)/N!)^{1/2} \langle\tilde{\phi}'|V|\tilde{\chi}\rangle \quad (\text{II-28a})$$

$$C' = ((N_c!N_d!)/N!)^{1/2} \langle\tilde{\chi}'|V'|\tilde{\phi}\rangle \quad (\text{II-28b})$$

et

$$D = \langle\phi'|(z-H)|\phi\rangle \quad (\text{II-28c})$$

Rappelons que l'hamiltonien du système H s'écrit comme la somme d'un opérateur à un corps ($T = \sum_i t_i$) et d'un opérateur à deux corps ($V = \sum_{i>j} v_{ij}$). Les expressions des contributions C , C' et D de la fonctionnelle F_3 contiennent alors des actions des opérateurs à un corps et à deux corps sur les fonctions d'ondes $\phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$ et $\phi^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$ qui s'écrivent sous la forme d'un déterminant de Slater [24].

$$\phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = (N!)^{-1/2} \det\langle\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N|\varphi_i\rangle \quad (\text{II-29a})$$

et

$$\phi^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = (N!)^{-1/2} \det \langle \varphi'_i / \vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N \rangle \quad (\text{II-29b})$$

Nous définissons les matrices de recouvrement des orbitales individuelles α_{ij} , α'_{ij} et β_{ij} comme [23] :

$$\alpha_{ij} = \langle \varphi'_i / \chi_j \rangle \quad (\text{II-30a})$$

$$\alpha'_{ij} = \langle \chi'_i / \varphi_j \rangle \quad (\text{II-30b})$$

et

$$\beta_{ij} = \langle \varphi'_i / \varphi_j \rangle \quad (\text{II-30c})$$

et leurs matrices inverses R_{ij} , R'_{ij} et B_{ij} respectivement par :

$$R_{ij} = (\alpha_{ij})^{-1} = \langle \varphi'_i / \chi_j \rangle^{-1} \quad (\text{II-31a})$$

$$R'_{ij} = (\alpha'_{ij})^{-1} = \langle \chi'_i / \varphi_j \rangle^{-1} \quad (\text{II-31b})$$

$$B_{ij} = (\beta_{ij})^{-1} = \langle \varphi'_i / \varphi_j \rangle^{-1} \quad (\text{II-31c})$$

Ainsi que les cofacteurs M_{ij} , M_{ijlk} , M_{ijknml} , ..., M'_{ij} , ..., N_{ijknml} respectivement définis par [23] :

$$\begin{aligned} \langle \tilde{\varphi}' / \tilde{\chi} \rangle &= \det(\langle \varphi'_i / \chi_j \rangle) \\ &= \sum_j \langle \varphi'_i / \chi_j \rangle M_{ij} \end{aligned} \quad (\text{II-32a})$$

avec :

$$M_{ij} = \langle \tilde{\varphi}' / \tilde{\chi} \rangle R_{ij} \quad (\text{II-32b})$$

$$M'_{ik} = \sum_l \langle \chi'_j / \varphi_l \rangle M'_{ijlk} \quad (\text{II-32c})$$

avec :

$$M'_{ijkl} = \langle \tilde{\chi}' / \tilde{\phi} \rangle (R'_{ki} R'_{lj} - R'_{kj} R'_{li}) \quad (\text{II-32d})$$

$$N_{ijml} = \sum_n \langle \varphi'_k / \varphi_n \rangle N_{ijknml}, \quad (\text{II-32e})$$

avec:

$$N_{ijknml} = \langle \phi' / \phi \rangle (B_{li} B_{mj} B_{nk} - B_{li} B_{mk} B_{nj} - B_{lj} B_{mi} B_{nk} + B_{lj} B_{mk} B_{ni} + B_{lk} B_{mi} B_{nj} - B_{lk} B_{mj} B_{ni}) \quad (\text{II-32f})$$

par conséquent, on obtient les dérivées :

$$\partial \langle \phi' / \phi \rangle / \partial \langle \varphi'_i / \varphi_j \rangle = N_{ij} \quad (\text{II-32g})$$

$$\partial M'_{kl} / \partial \langle \chi'_i / \varphi_j \rangle = M'_{kijl} \quad (\text{II-32h})$$

$$\partial M_{klmn} / \partial \langle \varphi'_i / \chi_j \rangle = M_{klijnm} \quad (\text{II-32k})$$

Les expressions de C , C' et D de la fonctionnelle F_3 se construisent alors aisément à l'aide de telles matrices densités et cofacteurs.

1/ Développement du terme $\langle \tilde{\phi}' / V / \tilde{\chi} \rangle$ apparaissant dans l'équation (II-28a)

On développe d'abord l'action de l'opérateur à deux corps $(V = \sum_{\alpha\beta} v_{\alpha\beta})$ sur le déterminant $\tilde{\phi}^* (\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$. Pour cela on introduit des relations de fermeture :

$$\int \prod_{k=1}^N d\vec{r}_k / \vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N \rangle \langle \vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N / = 1 \quad (\text{II-33})$$

ainsi, nous pouvons réécrire $\tilde{\phi}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$:

$$\tilde{\phi}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \sum_i \varphi_i(\vec{r}_\alpha) y_{(i,\alpha)} = \sum_\alpha \varphi_i(\vec{r}_\alpha) y_{(i,\alpha)} \quad (\text{II-34a})$$

ou

$$\tilde{\phi}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \sum_{i \neq j} \varphi_i(\vec{r}_\alpha) \varphi_j(\vec{r}_\beta) J_{(i,\alpha)}^{(j,\beta)} = \sum_{\alpha \neq \beta} \varphi_i(\vec{r}_\alpha) \varphi_j(\vec{r}_\beta) J_{(i,\alpha)}^{(j,\beta)} \quad (\text{II-34b})$$

avec : $y_{(i,\alpha)}$ étant le niveau de l'élément $\varphi_i(\vec{r}_\alpha)$ dans le développement du déterminant, et $J_{(i,\alpha)}^{(j,\beta)}$ le niveau de l'élément $\varphi_j(\vec{r}_\alpha)$ dans le développement de l'élément $\varphi_j(\vec{r}_\beta)$ dans le déterminant.

Le terme $\langle \tilde{\phi}' / V / \tilde{\chi} \rangle$ s'écrit alors :

$$\langle \tilde{\phi}' / V / \tilde{\chi} \rangle = (1/2) \sum_{i j \alpha \beta} \langle \varphi'_i \varphi'_j / v / \chi_\alpha \chi_\beta \rangle M_{ij\beta\alpha} \quad (\text{II-35a})$$

2/ Développement du terme $\langle \tilde{\chi}' / V / \tilde{\phi} \rangle$ apparaissant dans l'équation (II-28b)

De la même manière, on écrit:

$$\langle \tilde{\chi}' / V / \tilde{\phi} \rangle = (1/2) \sum_{\gamma \delta i j} \langle \chi'_\gamma \chi'_\delta / v / \varphi_i \varphi_j \rangle M_{\gamma\delta ji} \quad (\text{II-35b})$$

où les indices $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ appartiennent aux nucléons a, b, c et d respectivement, et les indices i et j varient de 1 à N.

3/ Développement du terme $\langle \phi' / (z-H) / \phi \rangle$ apparaissant dans l'équation (II-28c)

D'après l'expression de l'hamiltonien de notre système, Eq. (II-3), on peut écrire :

$$\langle \phi' / (z-H) / \phi \rangle = z \langle \phi' / \phi \rangle - \langle \phi' / \sum_i t_i / \phi \rangle - (1/2) \langle \phi' / \sum_{i \neq j} v_{ij} / \phi \rangle \quad (\text{II-36})$$

Pour connaître l'expression finale de D , il faut d'abord calculer les expressions des trois termes suivants :

i) le produit scalaire $\langle \phi' / \phi \rangle$ apparaissant dans l'équation (II-36) :

Introduisons une relation de fermeture de l'espace, ce produit scalaire s'écrit :

$$\langle \phi' / \phi \rangle = \frac{1}{N!} \int \prod_{k=1}^N d\vec{r}_k \tilde{\phi}^{*'}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) \tilde{\phi}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) \quad (\text{II-37})$$

D'après les équations ((II-32g, II-34a), on arrive à écrire :

$$\langle \phi' / \phi \rangle = \sum_{i,j} \langle \varphi'_i / \varphi_j \rangle N_{i,j} \quad (\text{II-38})$$

ii) la valeur moyenne d'une observable à un corps $\langle \phi' / \sum_i t_i / \phi \rangle$ apparaissant dans l'équation (II-36) :

D'après les équations (II-32g, II-34a), la valeur moyenne de $\langle \phi' / \sum_i t_i / \phi \rangle$ peut s'écrire comme :

$$\langle \phi' / \sum_i t_i / \phi \rangle = \sum_{i,j} \langle \varphi'_i / t / \varphi_j \rangle N_{i,j} \quad (\text{II-39})$$

iii) la valeur moyenne d'une observable à deux corps $\langle \phi' / \sum_{i \neq j} v_{ij} / \phi \rangle$

apparaissant dans l'équation (II-36) :

Notons que v_{ij} est un opérateur agissant sur chaque couple possible de nucléons numérotés (i, j). En introduisant une relation de fermeture de l'espace dans cette expression, ainsi à l'aide des triples cofacteurs N_{ijknl} définis dans Eq (II -32f), on déduit l'expression de $\langle \phi' / \sum_{i \neq j} v_{ij} / \phi \rangle$ comme :

$$\langle \phi' / \sum_{i \neq j} v_{ij} / \phi \rangle = \sum_{ijkl} \langle \phi'_i \phi'_j / v / \phi_k \phi_l \rangle N_{ijkl} \quad (\text{II-40})$$

avec les indices i, j, k, l variant de 1 à N.

Finalement, d'après les équations (II-38, 39, 40), l'expression de la contribution D s'écrit :

$$\begin{aligned} \langle \phi' / (z-H) / \phi \rangle = z \det \{ \langle \phi'_i / \phi_j \rangle \} - \sum_{ij} \langle \phi'_i / t / \phi_j \rangle N_{ij} \\ - (1/4) \sum_{ijkl} \langle \phi'_i \phi'_j / v / \phi_k \phi_l \rangle N_{ijkl} \end{aligned} \quad (\text{II-41})$$

Revenons maintenant aux conditions de stationnarité de la fonctionnelle F_3 , pour cela on doit minimiser d'abord les dérivées des trois contributions C , C' et D par rapport à $\langle \phi'_i \rangle$ et $\langle \phi'_i / \rangle$, $i = 1, 2, \dots, N$:

En utilisant les équations (II-32g, h, k), on écrit :

o Dérivée de C par rapport à $\langle \phi'_i / \rangle$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial \langle \phi'_i / \rangle} = (N_a! N_b! / (N!))^{1/2} \\ \times \left[\sum_{j\alpha\beta} \langle \phi'_j / v / \chi_\alpha \chi_\beta \rangle M_{ij\beta\alpha} \right. \\ \left. + (1/2) \sum_{jmn\alpha\beta} \langle \phi'_m \phi'_n / v / \chi_\alpha \chi_\beta \rangle M_{mnij\beta\alpha} / \chi_j \right] \end{aligned} \quad (\text{II-42a})$$

- Dérivée de C par rapport à $|\varphi_j\rangle$:

il est clair aussi d'après l'équation (II-35a) que :

$$\partial C / \partial |\varphi_j\rangle = 0 \quad (\text{II-42b})$$

- Dérivée de C' par rapport à $|\varphi_j\rangle$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial C'}{\partial |\varphi_j\rangle} &= (N_c! N_d! / N!)^{1/2} \\ &\times \left[\sum_{i\gamma\delta} \langle \chi'_\gamma \chi'_\delta / v | \cdot \varphi_i \rangle M'_{\gamma\delta ij} \right. \\ &\left. + (1/2) \sum_{i\gamma\delta mn} \langle \chi'_\gamma \chi'_\delta / v | \varphi_m \varphi_n \rangle M'_{\gamma\delta ij nm} \langle \chi'_i | \right] \end{aligned} \quad (\text{II-43a})$$

- Dérivée de C' par rapport à $\langle \varphi'_i |$:

il est clair d'après l'équation (II-35b) que :

$$\partial C' / \partial \langle \varphi'_i | = 0 \quad (\text{II-43b})$$

- Dérivée de D par rapport à $|\varphi_j\rangle$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial D}{\partial |\varphi_j\rangle} &= \sum_i \langle \varphi'_i | (z-t) N_{ij} - \sum_{ikl} \langle \varphi'_k | t | \varphi_l \rangle N_{kijl} \langle \varphi'_i | \\ &\quad - (1/2) \sum_{ikl} \langle \varphi'_i \varphi'_k / v | \cdot \varphi_l \rangle N_{iklj} \quad \dots \quad (\text{II-44a}) \\ &\quad - (1/4) \sum_{imkl} \langle \varphi'_m \varphi'_n / v | \varphi_k \varphi_l \rangle N_{mniklj} \langle \varphi'_i | \end{aligned}$$

- Dérivée de D par rapport à $\langle \varphi'_i / \rangle$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial D}{\partial \langle \varphi'_i / \rangle} = & \sum_j (z-t) / \varphi_j \rangle N_{ij} - \sum_{jkl} \langle \varphi'_k / t / \varphi_l \rangle N_{kijl} / \varphi_j \rangle \\ & - (1/2) \sum_{jkl} \langle . \varphi'_k / v / \varphi_j \varphi_l \rangle N_{iklj} \\ & - (1/4) \sum_{jmnkl} \langle \varphi'_m \varphi'_n / v / \varphi_k \varphi_l \rangle N_{mni jlk} / \varphi_j \rangle \end{aligned} \quad (\text{II-44b})$$

On introduit maintenant les potentiels des voies du champ moyen S et S' , définis par leurs actions sur $/ \chi_j \rangle$ et $\langle \chi'_j /$ [23] :

$$\langle . / S_b / \chi_\alpha \rangle = \langle \tilde{\phi}' / \tilde{\chi} \rangle^{-1} \sum_{j\beta} \langle . \varphi'_j / v / \chi_\alpha \chi_\beta \rangle M_{j\beta} \quad (\text{II-45a})$$

$$\langle . / S_a / \chi_\beta \rangle = \langle \tilde{\phi}' / \tilde{\chi} \rangle^{-1} \sum_{j\alpha} \langle . \varphi'_j / v / \chi_\beta \chi_\alpha \rangle M_{j\alpha} \quad (\text{II-45b})$$

$$\langle \chi'_\gamma / S'_d / . \rangle = \langle \tilde{\chi}' / \tilde{\phi} \rangle^{-1} \sum_{\delta i} \langle \chi'_\gamma \chi'_\delta / v / . \varphi_i \rangle M'_{\delta i} \quad (\text{II-45c})$$

$$\langle \chi'_\delta / S'_c / . \rangle = \langle \tilde{\chi}' / \tilde{\phi} \rangle^{-1} \sum_{\gamma i} \langle \chi'_\delta \chi'_\gamma / v / . \varphi_i \rangle M'_{\gamma i} \quad (\text{II-45d})$$

Ainsi que le potentiel du champ moyen U définis par son actions sur $/ \varphi_j \rangle$ et $\langle \varphi'_j /$:

$$\langle . / U / \varphi_j \rangle = \langle \phi' / \phi \rangle^{-1} \sum_{kl} \langle . \varphi'_k / v / \varphi_j \varphi_l \rangle N_{kl} \quad (\text{II-45e})$$

$$\langle \varphi'_i / U / . \rangle = \langle \phi' / \phi \rangle^{-1} \sum_{kl} \langle \varphi'_i \varphi'_k / v / . \varphi_l \rangle N_{kl} \quad (\text{II-45f})$$

L'antisymétrisation des éléments de matrice est de rendre ces potentiels strictement analogues à des potentiels de Hartree-Fock [24]. Notons aussi que ces potentiels S , S' et U sont insensibles au réarrangement interne des orbitales φ_i et φ'_i .

A partir de ces définitions, on réécrit les dérivées des contributions C , C' et D avec une forme qui fait apparaître de manière explicite les potentiels du champ moyen S , S' et U nous avons :

$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial \langle \varphi'_i |} &= (N_a! N_b! / N!)^{1/2} \langle \tilde{\phi}' | \tilde{\chi} \rangle \\ &\times \left[\sum_j \left(S - \sum_{kl} \langle \varphi'_k | \frac{S}{2} | \chi_l \rangle R_{lk} \right) | \chi_j \rangle R_{ji} \right. \\ &\quad \left. - \sum_{jkl} \langle \varphi'_k | S | \chi_l \rangle R_{li} R_{jk} | \chi_j \rangle \right] \end{aligned} \quad (\text{II-46a})$$

et

$$\begin{aligned} \frac{\partial C'}{\partial | \varphi_j \rangle} &= (N_c! N_d! / N!)^{1/2} \langle \tilde{\chi}' | \tilde{\phi} \rangle \\ &\times \left[\sum_i R'_{ji} \langle \chi'_i | \left(S' + \sum_{kl} \langle \chi'_k | \frac{S'}{2} | \varphi_l \rangle R'_{lk} \right) \right. \\ &\quad \left. - \sum_{ikl} \langle \chi'_k | S' | \varphi_l \rangle R'_{li} R'_{jk} \langle \chi'_i | \right] \end{aligned} \quad (\text{II-46b})$$

ainsi

$$\begin{aligned} \frac{\partial D}{\partial \langle \varphi'_i |} &= \langle \phi' | \phi \rangle \left[\sum_j \left(z - t - U - \sum_{kl} \langle \varphi'_k | \left(t + \frac{U}{2} \right) | \varphi_l \rangle B_{lk} \right) | \varphi_j \rangle B_{ji} \right. \\ &\quad \left. + \sum_{jkl} \langle \varphi'_k | \left(t + U \right) | \varphi_l \rangle B_{li} B_{jk} | \varphi_j \rangle \right] \end{aligned} \quad (\text{II-47a})$$

et

$$\frac{\partial D}{\partial \langle \varphi_j \rangle} = \langle \phi' / \phi \rangle \left[\sum_i B_{ji} \langle \varphi'_i / \left(z - t - U - \sum_{kl} \langle \varphi'_k / (t + \frac{U}{2}) / \varphi_l \rangle B_{lk} \right) \right. \\ \left. + \sum_{ikl} \langle \varphi'_k / (t + U) / \varphi_l \rangle B_{li} B_{jk} \right] \langle \varphi'_i / \rangle \quad (\text{II-47b})$$

Dans ce formalisme de la TIMF, on montre que les calculs des conditions de stationnarités d'une fonctionnelle permettent d'arriver aux expressions des fonctions d'essai. Pour cela, en admettant la considération où les orbitales self-consistantes $\{ \varphi'_i, \varphi_j \}$ satisfaisant la condition suivante [23]: $B_{ij} = B_{ii} \delta_{ij}$ (choix pour simplifier les calculs numériques).

Si on pose alors : $h = t + U$ les expressions de la dérivée de la contribution D par rapport à $\langle \varphi_j \rangle$ et par rapport à $\langle \varphi'_i \rangle$ deviennent :

$$\frac{\partial D}{\partial \langle \varphi_j \rangle} = \frac{\langle \phi' / \phi \rangle}{\langle \varphi'_j / \varphi_j \rangle} \langle \varphi'_j / \left(z - h - \sum_k \frac{\langle \varphi'_k / (t + \frac{U}{2}) / \varphi_k \rangle}{\langle \varphi'_k / \varphi_k \rangle} + \frac{\langle \varphi'_j / h / \varphi_j \rangle}{\langle \varphi'_j / \varphi_j \rangle} \right) \rangle \quad (\text{II-48a})$$

et

$$\frac{\partial D}{\partial \langle \varphi'_i \rangle} = \frac{\langle \phi' / \phi \rangle}{\langle \varphi'_i / \varphi_i \rangle} \left(z - h - \sum_k \frac{\langle \varphi'_k / (t + \frac{U}{2}) / \varphi_k \rangle}{\langle \varphi'_k / \varphi_k \rangle} + \frac{\langle \varphi'_i / h / \varphi_i \rangle}{\langle \varphi'_i / \varphi_i \rangle} \right) \langle \varphi'_i \rangle \quad (\text{II-48b})$$

Finalement, en analysant les équations (II -42b, II -43b, II- 46, II- 48), on écrit alors les conditions de stationnarités de F_3 , par rapport à $\langle \varphi'_i \rangle$ et $\langle \varphi_j \rangle$ comme :

$$\partial(C-D) / \partial \langle \varphi'_i \rangle = 0 \text{ et } \partial(C' - D) / \partial \langle \varphi_j \rangle = 0 \quad (\text{II-49})$$

et les $2N$ équations variationnelles de la TIMF pour ce problème d'antisymétrisation, elles se présentent finalement sous la forme suivante :

$$\begin{aligned}
\langle \eta_i - h \rangle / \varphi_i &= (N_a! N_b! / N!)^{1/2} \frac{\langle \tilde{\phi}' / \tilde{\chi} \times \varphi'_i / \varphi_i \rangle}{\langle \phi' / \phi \rangle} \\
&\times \left[\sum_j (S - \sum_{kl} \langle \varphi'_k / \frac{S}{2} / \chi_l \rangle R_{lk}) / \chi_j \rangle R_{ji} \right. \\
&\quad \left. - \sum_{jkl} \langle \varphi'_k / S / \chi_l \rangle R_{li} R_{jk} / \chi_j \right] \quad (\text{II-50a})
\end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned}
\langle \varphi'_j / (\eta_j - h) \rangle &= (N_c! N_d! / N!)^{1/2} \frac{\langle \tilde{\chi}' / \tilde{\phi} \rangle \langle \varphi'_j / \varphi_j \rangle}{\langle \phi' / \phi \rangle} \\
&\times \left[\sum_i R'_{ji} \langle \chi'_i / (S' + \sum_{kl} \langle \chi'_k / \frac{S'}{2} / \varphi_l \rangle R'_{lk}) \right. \\
&\quad \left. - \sum_{ikl} \langle \chi'_k / S' / \varphi_l \rangle R'_{li} R'_{jk} \langle \chi'_i / \right] \quad (\text{II-50b})
\end{aligned}$$

où la self-énergie η_i s'écrit :

$$\eta_i = z - \sum_k \frac{\langle \varphi'_k / (t + \frac{U}{2}) / \varphi_k \rangle}{\langle \varphi'_k / \varphi_k \rangle} + \frac{\langle \varphi'_i / h / \varphi_i \rangle}{\langle \varphi'_i / \varphi_i \rangle} \quad (\text{II-51})$$

CHAPITRE III

Les symétries self-consistantes

Les symétries self-consistantes

III-1 Introduction

Les symétries jouent un rôle fondamental en physique et leur connaissance permet souvent de simplifier considérablement la solution de certains problèmes.

Dans la pratique, on utilise souvent des fonctions ayant une certaine symétrie. On peut donc choisir des fonctions d'essai ayant la même symétrie que les fonctions de voies, sans détruire la self-consistance des équations du champ moyen. Si certaines relations de commutations sont (vérifiées), on peut alors réduire énormément le nombre d'équations du champ moyen couplé.

Il est possible de montrer de façon générale d'après le théorème de Noether [33] que tout opérateur de transformation quelconque représente une opération de symétrie : qui peut être soit unitaire, c'est-à-dire tout produit scalaire est alors invariant, soit anti-unitaire, c'est-à-dire tout produit scalaire est transformé en son complexe conjugué.

Dans ce chapitre 3, nous voulons montrer que les équations traduisant la condition de stationnarité $\partial(C-D)/\partial\langle\varphi_i|\neq 0$ et $\partial(C'-D)/\partial|\varphi_j\rangle=0$ sont invariantes par les transformations des opérateurs : unitaire P et anti-unitaire Y , c'est-à-dire, garde la même forme analytique d'après l'action de ces opérateurs.

III-2 Opérateur unitaire

Nous considérons un opérateur unitaire P caractérisé par le paramètre θ , et qui transforme l'état de la particule individuelle χ_i en $\chi_{\sigma(i)}$ par la relation :

$$P / \chi_i \rangle = e^{i\theta_i} / \chi_{\sigma(i)} \rangle \quad (\text{III-1a})$$

$$\langle \chi'_i / P^+ = \langle \chi'_{\sigma(i)} / e^{-i\theta_i} \quad (\text{III-1b})$$

où $\sigma_{(i)}$ indique les permutations entre les orbitales, et θ_i représente la i -ème phase arbitraire.

De même, on définit l'action de P sur les fonctions d'essai individuelles par :

$$P / \varphi_i \rangle = e^{i\theta_i} / \varphi_{\sigma(i)} \rangle \quad (\text{III-2a})$$

$$\langle \varphi'_i / P^+ = \langle \varphi'_{\sigma(i)} / e^{-i\theta_i} \quad (\text{III-2b})$$

Une fois que nous avons défini l'opérateur P . Les matrices de recouvrements α_{ij} , α'_{ij} et β_{ij} peuvent alors s'écrire :

$$\beta_{ij} = e^{i(\theta_j - \theta_i)} \beta_{\sigma(i)\sigma(j)} \quad (\text{III-3a})$$

$$\alpha_{ij} = e^{i(\theta_j - \theta_i)} \alpha_{\sigma(i)\sigma(j)} \quad (\text{III-3b})$$

et

$$\alpha'_{ij} = e^{i(\theta_j - \theta_i)} \alpha'_{\sigma(i)\sigma(j)} \quad (\text{III-3c})$$

ainsi d'après les équations (II-38, III-2), on écrit :

$$\begin{aligned} \delta_{ki} \langle \phi' / \phi \rangle &= \sum_j \langle \varphi'_i / \varphi_j \rangle N_{kj} \\ &= \sum_j e^{i(\theta_j - \theta_i)} \langle \varphi'_{\sigma(i)} / \varphi_{\sigma(j)} \rangle N_{kj} \end{aligned} \quad (\text{III-4a})$$

En effet, le produit scalaire $\langle \phi' / \phi \rangle$ est invariant par cette transformation unitaire P , et en comparant avec :

$$\delta_{\sigma(k)\sigma(i)} \langle \phi' / \phi \rangle = \sum_{\sigma(j)} \langle \varphi'_{\sigma(i)} / \varphi_{\sigma(j)} \rangle N_{\sigma(k)\sigma(j)} \quad (\text{III-4b})$$

on trouve :

$$N_{ij} = e^{-i(\theta_j - \theta_i)} N_{\sigma(i)\sigma(j)} \quad (\text{III-5})$$

ainsi pour l'inverse de la matrice de recouvrement :

$$B_{ij} = e^{-i(\theta_j - \theta_i)} \beta_{\sigma(i)\sigma(j)} \quad (\text{III-6})$$

de même, on déduit les transformations des cofacteurs M_{ij} et M'_{ij} par :

$$M_{ij} = e^{-i(\theta_j - \theta_i)} M_{\sigma(i)\sigma(j)} \quad (\text{III-7a})$$

$$M'_{ij} = e^{-i(\theta_j - \theta_i)} M'_{\sigma(i)\sigma(j)} \quad (\text{III-7b})$$

Si (t et v) sont des opérateurs hermitiens, alors :

$$[t, P] = 0, \quad [v, p \otimes p] = 0 \quad (\text{III-8})$$

donc, à l'aide de cette dernière relation de commutation et de l'équation (III-2), nous arrivons à écrire :

$$\langle \varphi'_i / t / \varphi_j \rangle = e^{i(\theta_j - \theta_i)} \langle \varphi'_{\sigma(i)} / t / \varphi_{\sigma(j)} \rangle \quad (\text{III-9})$$

et

$$\langle \varphi'_i \varphi'_k / v / \varphi_j \varphi_l \rangle = e^{i(\theta_j + \theta_l - \theta_k - \theta_i)} \langle \varphi'_{\sigma(i)} \varphi'_{\sigma(k)} / v / \varphi_{\sigma(j)} \varphi_{\sigma(l)} \rangle \quad (\text{III-10})$$

Nous remarquons qu'il existe une relation entre les opérateurs self-consistants U , h et les opérateurs hermitiens t , v . Notons aussi que les vecteurs des états des particules individuelles appartiennent à l'espace de Hilbert. En effet, on généralise par l'extension de l'espace de Hilbert, les relations de commutations définie dans l'équation (III-8), se traduisent par :

$$[U, p \otimes p] = 0, \quad [h, p] = 0 \quad (\text{III-11})$$

Les expressions des opérateurs self-consistants U et h s'écrivent alors :

$$\langle \varphi'_i / U / \varphi_j \rangle = e^{i(\theta_j - \theta_i)} \langle \varphi'_{\sigma(i)} / U / \varphi_{\sigma(j)} \rangle \quad (\text{III-12a})$$

$$\langle \varphi'_i / h / \varphi_j \rangle = e^{i(\theta_j - \theta_i)} \langle \varphi'_{\sigma(i)} / h / \varphi_{\sigma(j)} \rangle \quad (\text{III-12b})$$

Finalement nous devons montrer que les équations traduisant la condition de stationnarité $\partial(C-D)/\partial\langle\varphi'_i/\rangle=0$ et $\partial(C'-D)/\partial\langle\varphi_j/\rangle=0$ sont invariantes par la transformation unitaire P , c'est-à-dire, garde la même forme analytique après la transformation.

On remarque d'après les équations (III-6, 9, 10, 12) que l'expression de $\delta D/\delta\langle\varphi'_i/\rangle$ Eq. (II-47a) peut s'écrire :

$$\begin{aligned} \delta D/\delta\langle\varphi'_i/\rangle &= e^{i(\theta_i - \theta_j)} \langle \varphi' / \phi \rangle \\ &\times \left[\sum_j (z - h - \bar{\eta}) B_{\sigma(j)\sigma(i)} \right. \\ &\left. + \sum_{i k l} \langle \varphi'_{\sigma(k)} / h / \varphi_{\sigma(l)} \rangle B_{\sigma(l)\sigma(i)} B_{\sigma(j)\sigma(k)} \right] / \varphi_j \rangle \end{aligned} \quad (\text{III-13})$$

$\bar{\eta}$ est la partie de la self-énergie indépendante de l'indice (i) :

$$\bar{\eta} = \sum_{kl} \langle \varphi'_k / t + \frac{U}{2} / \varphi_l \rangle B_{lk} = \sum_{kl} \langle \varphi'_{\sigma(k)} / t + \frac{U}{2} / \varphi_{\sigma(l)} \rangle B_{\sigma(l)\sigma(k)} \quad (\text{III-14})$$

En effet, lorsque on fait tourner l'action de l'opérateur P sur l'expression de $\delta D / \delta \langle \varphi'_i |$, on déduit :

$$P \delta D / \delta \langle \varphi'_i | = e^{i\theta_i} \delta D / \delta \langle \varphi'_{\sigma(i)} | \quad (\text{III-15})$$

Finalement nous remarquons que l'action de l'opérateur P assure l'invariance de l'expression $\delta D / \delta \langle \varphi'_i |$ de l'équation (II-47a).

Nous traitons maintenant l'inhomogénéité du terme $\delta C / \delta \langle \varphi'_i |$, Eq.(II-46a), pour cela nous définissons ρ (*resp.* ρ') comme des matrices, avec des éléments nuls si les orbitales χ_i et χ_j (respectivement χ'_i et χ'_j) appartiennent aux mêmes fragments et égaux à 1 s'ils appartiennent à des fragments différents. Si P satisfait :

$$\rho_{ij} = \rho_{\sigma(i)\sigma(j)} \text{ et } \rho'_{ij} = \rho'_{\sigma(i)\sigma(j)} \quad (\text{III-16})$$

nous avons alors, les propriétés de commutation suivantes :

$$\langle . | [S, P] | \chi_i \rangle = 0, \quad \langle \chi'_i | [S', P] | . \rangle = 0 \quad (\text{III-17})$$

Ceci nous permet d'écrire les potentiels du champ moyen S et S' comme:

$$\langle . | S | \chi_i \rangle = \langle \tilde{\phi}' | \tilde{\chi} \rangle^{-1} \sum_{kl} \rho_{il} \langle . | \varphi'_k / v | \chi_i \chi_l \rangle M_{kl} \quad (\text{III-18a})$$

$$\langle \chi'_i | S' | . \rangle = \langle \tilde{\chi}' | \tilde{\phi} \rangle^{-1} \sum_{kl} \rho'_{ki} \langle \chi'_i \chi'_k / v | \varphi_l \cdot \rangle M'_{kl} \quad (\text{III-18b})$$

De même, d'après les équations (III-1, 2, 18), l'expression $\delta C / \delta \langle \varphi'_i \rangle$ définie dans l'équation (II-46a) donne :

$$\begin{aligned} \delta C / \delta \langle \varphi'_i \rangle = & e^{i(\theta_i - \theta_j)} (N_a! N_b! / N!)^{1/2} \langle \tilde{\varphi}' / \tilde{\chi} \rangle \\ & \times \left[\sum_j (S - \sum_{kl} \langle \varphi'_{\sigma(k)} / \frac{S}{2} / \chi_{\sigma(l)} \rangle R_{\sigma(l)\sigma(k)}) R_{\sigma(j)\sigma(i)} \right. \\ & \left. - \sum_{jkl} \langle \varphi'_{\sigma(k)} / S / \chi_{\sigma(l)} \rangle R_{\sigma(l)\sigma(i)} R_{\sigma(j)\sigma(k)} \right] / \chi_j \rangle \end{aligned} \quad (\text{III-19})$$

ainsi lorsqu'on fait tourner l'action de l'opérateur P sur l'expression $\delta C / \delta \langle \varphi'_i \rangle$ on déduit que :

$$P \delta C / \delta \langle \varphi'_i \rangle = e^{i\theta_i} \delta C / \delta \langle \varphi'_{\sigma(i)} \rangle \quad (\text{III-20})$$

Finalement, nous avons montré à partir des équations (III-15, 20) que l'invariance des conditions de stationnarité $\partial(C-D) / \partial \langle \varphi'_i \rangle = 0$ et $\partial(C'-D) / \partial \langle \varphi_j \rangle = 0$ sont vraies dans cette transformation unitaire P . Ce qui nous permettra d'écrire :

$$P \delta F_3 / \delta \langle \varphi'_i \rangle = e^{i\theta_i} \delta F_3 / \delta \langle \varphi'_{\sigma(i)} \rangle \quad (\text{III-21})$$

III-3 Opérateur anti-unitaire

Dans ce second cas, on considère la symétrie discrète de renversement du temps, qui présente un intérêt exploitable en mécanique quantique. Cette dernière est définie par l'opérateur anti-unitaire Y tel que :

$$Y(\lambda / \varphi \rangle) = \lambda^* Y / \varphi \rangle \quad (\text{III-22})$$

$$(\langle \varphi' / (Y / \varphi \rangle) = (\langle \varphi' / Y) / \varphi \rangle)^* \quad (\text{III-23})$$

Dans ce type de transformation, on a $YY^+ = Y^+Y = 1$, alors :

$$(\langle \varphi' / \varphi \rangle) = [(\langle \varphi' / Y^+ \rangle)(Y / \varphi \rangle)]^* \quad (\text{III-24})$$

L'action de l'opérateur Y transforme l'état de la particule individuelle χ_i en l'état $\chi_{\sigma(i)}$ comme suit :

$$Y / \chi_i \rangle = e^{i\theta_i} / \chi'_{\sigma(i)} \rangle \quad (\text{III-25a})$$

$$\langle \chi'_i / Y^+ = \langle \chi_{\sigma(i)} / e^{-i\theta_i} \quad (\text{III-25b})$$

Aussi, on écrit :

$$Y / \varphi_i \rangle = e^{i\theta_i} / \varphi'_{\sigma(i)} \rangle \quad (\text{III-26c})$$

$$\langle \varphi'_i / Y^+ = \langle \varphi_{\sigma(i)} / e^{-i\theta_i} \quad (\text{III-26d})$$

Une fois que nous avons défini l'opérateur Y , les matrices de recouvrements α_{ij} , α'_{ij} et β_{ij} peuvent alors s'écrire :

$$\beta_{ij} = e^{i(\theta_i - \theta_j)} \beta_{\sigma(j)\sigma(i)} \quad (\text{III-27a})$$

$$\alpha_{ij} = e^{i(\theta_i - \theta_j)} \alpha_{\sigma(j)\sigma(i)} \quad (\text{III-27b})$$

$$\alpha'_{ij} = e^{i(\theta_i - \theta_j)} \alpha'_{\sigma(j)\sigma(i)} \quad (\text{III-27c})$$

ainsi, le produit scalaire se transforme en son complexe conjugué, alors :

$$\begin{aligned} \delta_{ki} \det \alpha &= \sum_j \langle \varphi'_i / \chi_j \rangle M_{kj} = \delta_{\sigma(k)\sigma(i)} \det (\alpha') \\ &= \sum_j e^{i(\theta_i - \theta_j)} \alpha'_{\sigma(j)\sigma(i)} M'_{\sigma(j)\sigma(k)} \end{aligned} \quad (\text{III-28})$$

par conséquent, nous pouvons conclure:

$$M_{ij} = e^{-i(\theta_i - \theta_j)} M'_{\sigma(j)\sigma(i)} \quad (\text{III-29a})$$

$$M'_{ij} = e^{-i(\theta_i - \theta_j)} M_{\sigma(j)\sigma(i)} \quad (\text{III-29b})$$

De même :

$$N_{ij} = e^{-i(\theta_i - \theta_j)} N_{\sigma(j)\sigma(i)} \quad (\text{III-29c})$$

$$B_{ij} = e^{i(\theta_i - \theta_j)} B_{\sigma(j)\sigma(i)} \quad (\text{III -29d})$$

Partons de la définition de l'opérateur anti-unitaire Y , on obtient les relations des transformation des observables t, v :

$$Y t = t^+ Y \quad , \quad (Y \otimes Y) v = v^+ (Y \otimes Y) \quad (\text{III-30})$$

En effet nous déduisons :

$$\langle \varphi'_i / t / \varphi_j \rangle = e^{i(\theta_i - \theta_j)} \langle \varphi'_{\sigma(j)} / t / \varphi_{\sigma(i)} \rangle \quad (\text{III-31})$$

ainsi pour v :

$$\begin{aligned} \langle \varphi'_i \varphi'_k / v / \varphi_j \varphi_l \rangle &= e^{i(\theta_i + \theta_k - \theta_j - \theta_l)} \\ &\times \langle \varphi'_{\sigma(j)} \varphi'_{\sigma(l)} / v / \varphi_{\sigma(i)} \varphi_{\sigma(k)} \rangle \end{aligned} \quad (\text{III-32})$$

par conséquent, U et h s'écrivent :

$$\langle \varphi'_i / U / \varphi_j \rangle = e^{i(\theta_i - \theta_j)} \langle \varphi'_{\sigma(j)} / U / \varphi_{\sigma(i)} \rangle \quad (\text{III-33})$$

$$\langle \varphi'_i / h / \varphi_j \rangle = e^{i(\theta_i - \theta_j)} \langle \varphi'_{\sigma(j)} / h / \varphi_{\sigma(i)} \rangle \quad (\text{III-34})$$

De même, d'après ces équations, l'expression $\delta D/\delta \langle \varphi'_i / \rangle$ définit dans l'équation (II-47a) donne :

$$\begin{aligned} \delta D/\delta \langle \varphi'_i / \rangle &= e^{i\theta_i - \theta_j} \langle \phi' / \phi \rangle \\ &\times \left[\sum_j (z^* - h^+ - \bar{\eta}^*) B_{\sigma(i)\sigma(j)}^* \right. \\ &\left. + \sum_{jkl} \langle \varphi'_{\sigma(k)} / h^+ / \varphi_{\sigma(l)} \rangle B_{\sigma(i)\sigma(l)}^* B_{\sigma(k)\sigma(j)}^* \right] / \varphi_j \rangle \end{aligned} \quad (\text{III-35})$$

En effet, on dit que l'action de l'opérateur Y assure l'invariance de $\delta D/\delta \langle \varphi'_i / \rangle$:

$$Y \delta D/\delta \langle \varphi'_i / \rangle = e^{i\theta_i} \delta D/\delta \langle \varphi'_{\sigma(i)} / \rangle \quad (\text{III-36})$$

Revenons maintenant à l'inhomogénéité du terme $\delta C/\delta \langle \varphi'_i / \rangle$, nous définissons aussi ρ (*resp.* ρ') comme des matrices, avec des éléments nuls, si les orbitales χ_i et χ_j (respectivement χ'_i et χ'_j) appartiennent au même fragment, des éléments égaux à 1 s'ils appartiennent à des fragments différents. Si Y satisfait à:

$$\rho_{ij} = \rho'_{\sigma(j)\sigma(i)}, \quad \rho'_{ij} = \rho_{\sigma(j)\sigma(i)} \quad (\text{III-37})$$

Ceci nous permet de relier les potentiels du champ moyen S et S' par :

$$\langle \varphi'_i / S / \chi_j \rangle = e^{i(\theta_i - \theta_j)} \langle \chi'_{\sigma(j)} / S' / \varphi_{\sigma(i)} \rangle \quad (\text{III-38a})$$

$$\langle \chi'_i / S' / \varphi_j \rangle = e^{i(\theta_i - \theta_j)} \langle \varphi'_{\sigma(j)} / S / \chi_{\sigma(i)} \rangle \quad (\text{III-38b})$$

avec les relations de commutations de S et S' et U, h avec l'opérateur Y s'écrivent :

$$Y U = U^+ Y, \quad Y h = h^+ Y \quad (\text{III-39a})$$

$$\langle . / (Y S / \chi_i) \rangle = \langle . / (S'^+ Y / \chi_i) \rangle \quad (\text{III-39b})$$

$$\langle \chi'_i / Y S' \rangle / . \rangle = \langle \chi'_i / S'^+ Y \rangle / . \rangle \quad (\text{III-39c})$$

De la même manière, on déduit que l'action de l'opérateur Y assure l'invariance de l'expression $\delta C / \delta \langle \varphi'_i \rangle$, Eq.(II-46a), et on écrit :

$$Y \delta C / \delta \langle \varphi'_i \rangle = e^{i\theta_i} \delta DC / \delta \langle \varphi'_{\sigma(i)} \rangle \quad (\text{III-40})$$

Finalement, nous avons montré que l'invariance de la condition de stationnarité $\partial(C-D) / \partial \langle \varphi'_i \rangle = 0$ et $\partial(C'-D) / \partial \langle \varphi_j \rangle = 0$ est vraie dans cette transformation anti-unitaire. Ceci nous permettra donc d'écrire la relation de transformation de la condition de stationnarité de F_3 comme:

$$Y \delta F / \delta \langle \varphi'_i \rangle = e^{i\theta_i} \delta F / \delta \langle \varphi'_{\sigma(i)} \rangle \quad (\text{III-41})$$

Chapitre IV

Diffusion nucléaire (α - α)

Diffusion nucléaire (α - α)

IV-1 - Introduction

Le choix d'une diffusion élastique à l'avant (α - α) a été dicté par le fait que c'est une collision souvent traitée par plusieurs auteurs [34-37] car elle reste un très bon test pour les théories microscopiques de collisions. De plus, c'est précisément un cas où des symétries supplémentaires entre bras et kets (renversement du temps) entre le projectile et la cible (parité) et entre les nucléons eux-mêmes (renversement de spin et isospin) permettent de réduire le nombre d'équations indépendantes à résoudre.

Comme application réaliste de la TIMF antisymétrisée, nous avons traité le cas de la diffusion à l'avant α - α [23].

IV-2 Application numérique : diffusion élastique (α - α):

Notre intérêt s'est porté sur le calcul numérique des termes de Born non antisymétrisé :

$$T^B = \langle \chi' | V | \chi \rangle \quad (\text{IV-1})$$

et antisymétrisé :

$$T_{anti-sym}^B = \langle \chi' | A V | \chi \rangle \quad (\text{IV-2})$$

Nous avons considéré pour cela, un potentiel à courte portée : la somme d'une répulsion à courte portée et d'une attraction à portée un peu moins courte :

$$v(\vec{r}, \vec{r}') = V_a \exp\left(-\frac{|\vec{r} - \vec{r}'|^2}{r_a^2}\right) + V_r \exp\left(-\frac{|\vec{r} - \vec{r}'|^2}{r_r^2}\right) \quad (\text{IV-3})$$

avec comme valeurs des potentiels V_a , V_r , des portées r_a , r_r , les paramètres de

Volkov [38]:

$$V_a = -83.34 \text{ MeV} \quad , \quad V_r = 144.86 \text{ MeV} \quad (\text{IV-4})$$

$$r_a = 1.6 \text{ fm} \quad , \quad r_r = 0.82 \text{ fm} \quad (\text{IV-5})$$

remarquons que les deux termes qui composent le potentiel, Eq.(IV-3) sont des gaussiennes.

Les fonctions de voies sont aussi approchées par des gaussiennes pour chaque nucléon individuel avec des facteurs de phase pour décrire leurs accélérations [23] :

$$\chi(\vec{r}, \vec{k}) = \pi^{-3/4} \beta^{-3/2} \exp \left[i \vec{k} \cdot \vec{r} - \frac{r^2}{2\beta^2} \right] \quad (\text{IV-6})$$

avec \vec{k} l'impulsion de la particule individuelle.

Nous noterons \vec{r}_1 , \vec{r}_5 les coordonnées des protons avec spin en haut dans le projectile et la cible, respectivement. Les coordonnées des protons de spin en bas, des neutrons de spin en haut et de neutrons de spin en bas sont respectivement notés \vec{r}_2 , \vec{r}_6 , \vec{r}_3 , \vec{r}_7 , \vec{r}_4 et \vec{r}_8 .

La fonction de voie pour ces huit particules peut donc se mettre sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} \chi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_8, \vec{k}) = & \chi_1(\vec{r}_1, \vec{k}) \times \dots \times \chi_4(\vec{r}_4, \vec{k}) \\ & \times \chi_5(\vec{r}_5, -\vec{k}) \times \dots \times \chi_8(\vec{r}_8, -\vec{k}) \end{aligned} \quad (\text{IV-7})$$

Comme indiqué dans l'introduction de ce chapitre, les différentes symétries qui interviennent dans cette diffusion (α - α) permettent d'écrire les relations suivantes :

1- les symétries spin et isospin entre nucléons eux-mêmes :

$$\chi_1 = \chi_2 = \chi_3 = \chi_4 \quad (\text{IV-8a})$$

et

$$\chi_5 = \chi_6 = \chi_7 = \chi_8 \quad (\text{IV-8b})$$

2- les symétries bra-ket dans un choix d'une diffusion élastique à l'avant :

$$\chi_i(r) = \chi'_i(r) \quad (\text{IV-9})$$

3- diffusion à l'avant avec renversement du temps :

$$\chi^*_{i_1}(r) = \chi'_{i_5}(r), \quad \chi^*_{i_5}(r) = \chi'_{i_1}(r) \quad (\text{IV-10})$$

4/ la parité :

$$\chi_1(r) = \chi_5(-r), \quad \chi'_5(r) = \chi'_1(-r) \quad (\text{IV-11})$$

IV-3 Résultats numériques et discussion :

Nos calculs numériques ont été fait à l'aide du logiciel Mathematica. Nous avons utilisé l'instruction NIntegrate qui emploie habituellement un algorithme adaptatif, qui subdivise périodiquement et adéquatement la région d'intégration.

Nous avons choisi de tracer les termes de Born non antisymétrisé, Eq.(IV-1), et antisymétrisé, Eq.(IV-2), pour différentes impulsions k et pour diverses valeurs de la largeur β de la fonction de voie gaussienne, Eq.(IV-6).

Sur les figures, Fig.1, Fig.2 et Fig.3, sont tracés les termes de Born antisymétrisé (en tirets) et non antisymétrisé (en traits pleins) en fonction de l'impulsion k et pour différentes valeurs de la largeur β de la gaussienne qui représente la fonction de voie.

L'analyse des trois figures montre que le comportement de ces deux termes diffère totalement pour des faibles valeurs de k .

Ceci vient du fait, bien connu, que les termes d'échange s'annulent pour des grandes valeurs de k , en raison du contraste entre leurs composantes de Fourier (accélération en directions opposées). Il n'y a qu'à basse énergie (pour des faibles valeurs de k) que les composantes de Fourier des orbites de projectile ressemblent suffisamment à celles de la cible pour créer un encombrement de Pauli dans l'espace de phase.

Ceci illustre bien l'importance des termes d'échange à basses énergies (faibles valeurs de k), alors qu'à hautes énergies (grandes valeurs de k), le principe de Pauli peut être négligé. Donc l'effet de l'antisymétrisation est important à basses énergies.

Nous pouvons aussi analyser l'influence du paramètre β sur ces deux termes de Born.

Il est utile de parler brièvement de l'importance de la largeur β du paquet d'onde. En effet, la finalité de l'étude d'un cas physique réaliste de collision est d'arriver à comparer les résultats théoriques et expérimentaux à travers le calcul des sections efficaces par exemple. Pour cela, il faudrait utiliser dans les calculs des ondes planes qui sont des fonctions qui n'appartiennent pas à l'espace de Hilbert du fait de leur extension infinie. Leur utilisation conduit à des calculs divergents. L'utilisation des paquets d'onde dans les théories approximatives s'est révélée être d'un grand intérêt pratique. La largeur de ces paquets d'onde peut être prise aussi petite que l'on veut de façon à se rapprocher le plus possible du cas des ondes planes. Il faut aussi se rappeler que dans l'espace des impulsions, une onde plane est représentée par la fonction delta de Dirac. Le passage de l'une à l'autre des représentations se faisant par la transformation de Fourier.

Il ressort clairement des trois figures que le rapprochement entre les deux termes de Born se fait pour des valeurs de k plus grande lorsque β augmente donc l'influence du principe de Pauli est plus importante, toujours à basses énergies, avec la diminution de β .

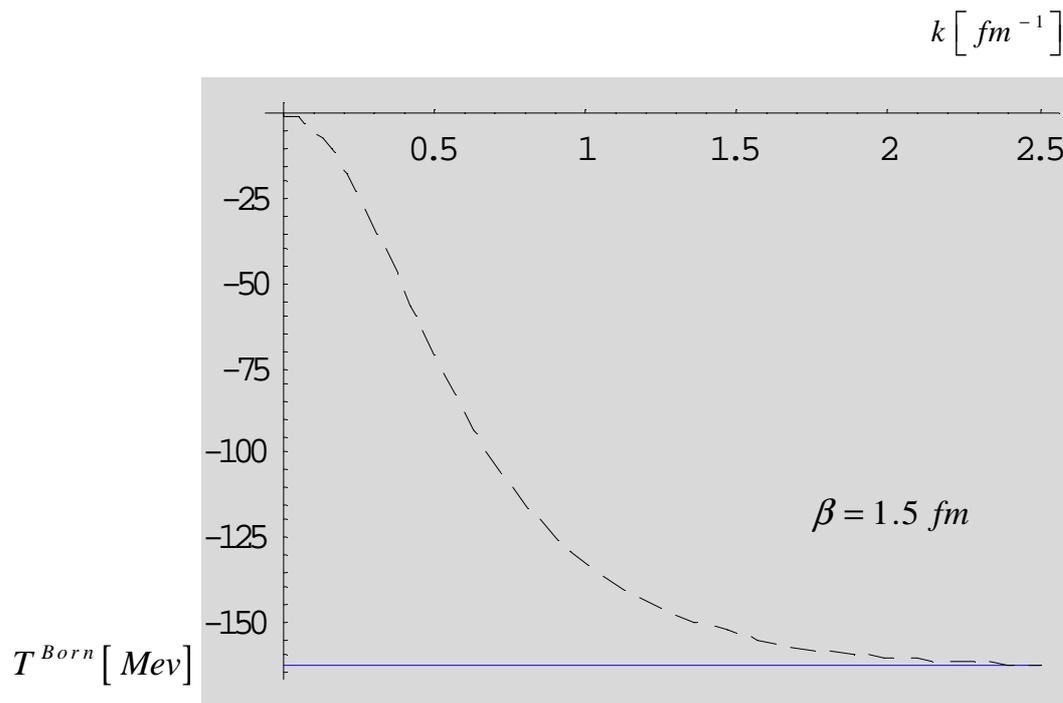


Figure 1 : Les termes de Born antisymétrisé (tirets) et non antisymétrisé (traits pleins) en fonction de l'impulsion k , avec $\beta = 1.5 fm$ pour la diffusion élastique (α - α)

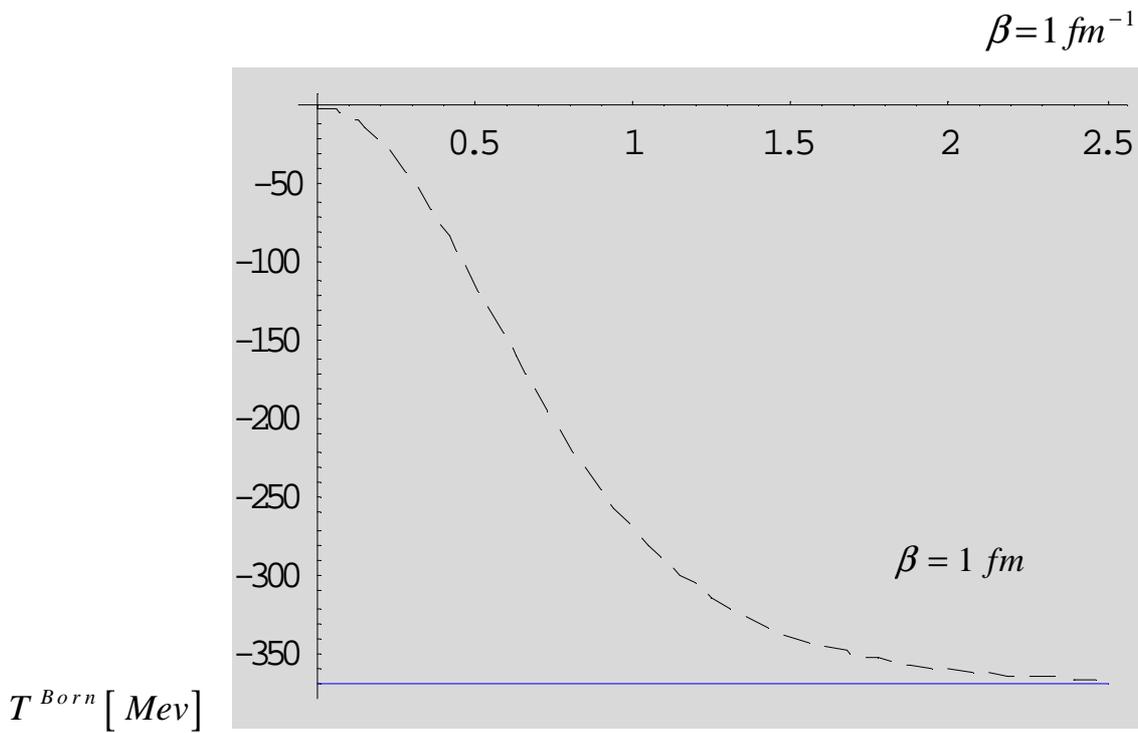


Figure 2 : les termes de Born antisymétrisé (tirets) et non antisymétrisé (traits pleins) en fonction de l'impulsion k , avec le paramètre $\beta = 1 \text{ fm}$ pour la diffusion élastique (α - α)

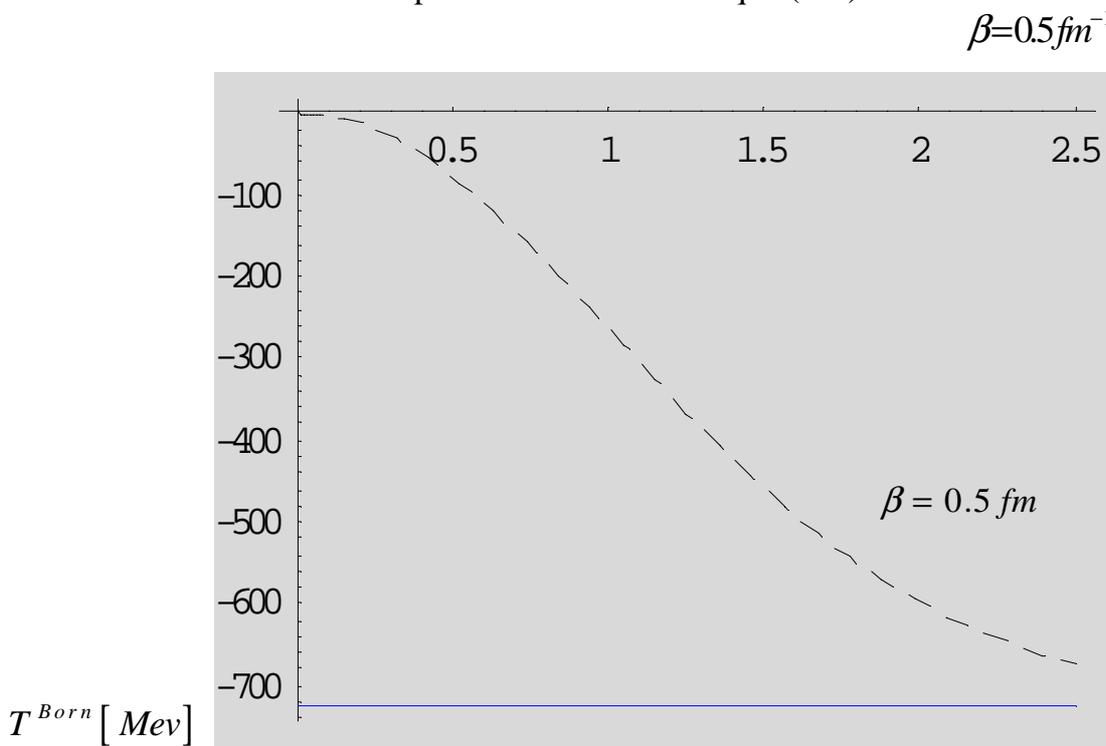


Figure 3 : les termes de Born antisymétrisé (tirets) et non antisymétrisé (traits pleins) en fonction de l'impulsion k , avec le paramètre $\beta = 0.5 \text{ fm}$ pour la diffusion élastique (α - α)

Conclusion

CONCLUSION

Ce travail que nous avons développé a porté sur l'utilisation de la théorie du champs moyen indépendant du temps -TIMF- pour l'étude des problèmes de collision

Cette théorie est principalement basée sur un principe variationnel pour le calcul de l'amplitude de collision, une énergie du système complexe, une représentation des états de voies par des paquets d'ondes indépendants du temps, une restriction de ces fonctions de voies, et des fonctions d'essai à des produits des fonctions individuelles.

Cette approche TIMF satisfait, tout comme la théorie d'Hartree, à la condition de réduction de dimension et remplace l'inversion de l'opérateur à N corps par N inversions à un corps.

Toujours dans le but d'étendre le champ d'application de la TIMF, nous avons inclus l'antisymétrisation entre les fermions constitutifs des noyaux. On arrive à un nouveau formalisme celui de la TIMF antisymétrisée, où la restriction des fonctions de voies, et des fonctions d'essai en produits d'orbitales individuelles est remplacée par des déterminants de Slater.

L'antisymétrisation entre les fermions constitutifs des noyaux qui est un problème traditionnel assez ardu de la théorie des collisions. Pour valider cette méthode approximative, il était important de ne pas esquiver cette question et donc d'introduire le principe de Pauli dans le formalisme de la TIMF.

Pour cela, une forme plus adaptée de l'opérateur de transition est définie par l'introduction d'un opérateur d'antisymétrisation. En réécrivant toutes les relations de base qui sous tendent la TIMF, on arrive à un nouveau formalisme celui de la TIMF antisymétrisée.

Nous avons aussi illustré l'importance de certaines symétries élémentaires comme le renversement du temps, la parité, qui jouent un rôle fondamental en physique. Leur connaissance permet souvent de simplifier considérablement la solution de certains problèmes.

Comme application réaliste de la TIMF antisymétrisée, nous avons traité le cas de la diffusion à l'avant α - α . Le choix d'une diffusion élastique à l'avant (α - α) a été dicté par le fait que c'est une collision souvent traitée par plusieurs auteurs car elle reste un très bon test pour les théories microscopiques de collisions. De plus, c'est précisément un cas où des symétries supplémentaires entre bras et kets (renversement du temps) entre le projectile et la cible (parité) et entre les nucléons eux-mêmes (renversement de spin et isospin) permettent de réduire le nombre d'équations indépendantes à résoudre.

Nous avons choisi de tracer le terme de Born antisymétrisé et non antisymétrisé pour différentes valeurs de l'impulsion et pour diverses valeurs β de la largeur de la fonction de voie gaussienne. Les résultats obtenus montrent que le comportement de ces deux termes diffère totalement lorsque k diminue. Ceci vient du fait, bien connu, que les termes d'échange s'annulent pour des valeurs de k plus grand, en raison du contraste entre leurs composantes de Fourier (accélération en directions opposées). Il n'y a qu'à basse énergie que les composantes de Fourier des orbites de projectile ressemblent suffisamment à celles de la cible pour créer un encombrement de Pauli dans l'espace des phases.

Ceci illustre bien l'importance des termes d'échange à basses énergies, alors qu'à hautes énergies, le principe de Pauli peut être négligé. Donc l'effet de l'antisymétrisation est important à basses énergies.

Nous avons aussi analysé l'influence du paramètre β sur ces deux termes de Born. Nous avons rappelé brièvement l'importance de la largeur β du paquet d'onde. En effet, la finalité de l'étude d'un cas physique réaliste de collision est d'arriver à

comparer les résultats théoriques et expérimentaux à travers le calcul des sections efficaces par exemple. Pour cela, il faudrait utiliser dans les calculs des ondes planes qui sont des fonctions qui n'appartiennent pas à l'espace de Hilbert du fait de leur extension infinie. Leur utilisation conduit à des calculs divergents. L'utilisation des paquets d'onde dans les théories approximatives s'est révélée être d'un grand intérêt pratique. La largeur de ces paquets d'onde peut être prise aussi petite que l'on veut de façon à se rapprocher le plus possible du cas des ondes planes. Il faut aussi se rappeler que dans l'espace des impulsions, une onde plane est représentée par la fonction delta de Dirac. Le passage de l'une à l'autre des représentations se faisant par la transformation de Fourier.

Il ressort clairement à travers les résultats obtenus que le rapprochement entre les deux termes de Born se fait pour des valeurs de k plus grandes lorsque β augmente donc l'influence du principe de Pauli est plus importante, toujours à basses énergies, avec la diminution de β .

A partir des conclusions auxquelles nous sommes parvenus, il est justifié de penser que, l'introduction du principe de Pauli dans les théories microscopiques de collision ne peut qu'améliorer les résultats théoriques et les rapprocher un peu plus des résultats expérimentaux surtout à basses énergies. De plus, nous pouvons envisager une extension du champ d'application de la théorie TIMF en l'utilisant pour le traitement d'autres cas physiques réalistes et pour le calcul, en plus du terme de Born, d'autres paramètres importants et indispensables dans une diffusion.

Références

REFERENCES

- [1] B.G.Giraud, M.A.Nagarajan, J.Phys.G 4, 1739(1978)
- [2] B.G.Giraud, M.A.Nagarajan, J.Physique (paris).41, 477(1980)
- [3] M.A.Nagarajan, B.G.Giraud, Phys.Rev.C 27,232 (1983)
- [4] B.G.Giraud, M.A.Nagarajan, J.Phys.C28, 1918 (1983)
- [5] B.G.Giraud, M.A.Nagarajan and I.J.thompson, Ann.of Phys.152, 475(1984)
- [6] B.G.Giraud, Nucl.Phys A428, 285(1984)
- [7] F.Mekideche, Thèse d'état, USTHB (1994)
- [8] P.Amiot, B.G.Giraud and M.A.Nagarajan, Phys.Rev.C29, 2374(1984)
- [9] B.G.Giraud, S.Kessal and L.C.Lui , Phys.Rev. C 35, 1844 (1987)
- [10] S.Kessal, B.G.Giraud, Phys.Rev. C35, 1252 (1987)
- [11] B.G.Giraud, S.Kessal and A.Weiguny: J.Math, Phys. 29, 2084 (1988)
- [12] S.Kessal, B.G.Giraud, Phys.Rev. A 39, 5014 (1989)
- [13] R.Yekken, Thèse de Magister, USTHB (2001)
- [14] F.Kadem, Thèse de Magister, USTHB (2004)
- [15] L.D.Faddeev, Soviet. JETP, 1014 (1961)
- [16] L.D.Faddeev, Mathematical aspect of three body problem, (Davey New York, (1965))
- [17] C.Lovelace, Phys.Rev. 135, B 1225 (1964)
- [18] J.L.Ballot and M.Fabre de la Ripelle, M. Ann, Phys.127, 62 (1980)
- [19] H.gameyama, M.Kamimura, and Y.Fttkushima, Phys. Rev. C40, 974(1989)
- [20] B.G.Giraud, Recent progress in many-Body theories (Y. Avishai,Ed.), Vol.2, New York (1980)
- [21] B.G.Giraud, M.A.Nagarajan, and C.J. Noble, Phys.Rev.C34, 1034 (1986)
- [22] N.Austern, Direct nuclear reaction theory, New York, Wiley (1970)
- [23] A.Wierling, B.G.Giraud, F.Mekideche and al, Z. Phys. A 348, 153-168 (1994)
- [24] A.K.Messiah, Mecanique quantique T2 (North-Holland, Amsterdam, (1962))
- [25] W.Tobocman, Phys.rev C9, 2466(1974), 12, 741 (1975)
- [26] D.J.Kouri, F.S.levin, Nucl.Phys A253, 398 (1975)
- [27] B.H.Wildenthal, J.B.McGrory and T.T.S.Kuo, Phys.Rev. C4, 1266(1971)

- [28] B.H.Wildenthal, J.B.McGrory, E.C.Halbert, Phys.Rev. C4, 1266(1971)
- [29] J.B.McGrory, B.H.Wildenthal, Phys.Rev. C7, 974 (1973)
- [30] P.Ring, P.Schuck: the Nuclear Many-Body Problem, Springer-Verlag, Berlin (1980)
- [31] B.G.Giraud, M.A.Nagarajan and A.Weiguny, Phys.Rev.C35, 55(1987)
- [32] B.G.Giraud and F. Mekideche, J. G17, 1871(1991)
- [33] N.N. Bogoluibov, D.V. Shirkov(chapitre1), Introduction to the theory of quantized fields (1995)
- [34] E.W.Schmid, K.Wildermuth, Nucl, Phys. 26, 463 (1961)
- [35] F.Tanabe, A.Tohsaki, and R. Tamagaki, Prog. Theor. Phys. 53, 671 (1975)
- [36] A.Lumbroso, Phys. Rev. C10, 1271 (1974)
- [37] H.Friedrich, Phys. Lett. C74, 211 (1981)
- [38] A.B.Volkov, Nucl. Phys. 74, 33 (1965)