

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique
Université des Sciences et de la Technologie Houari Boumediene
FACULTÉ DE PHYSIQUE



MÉMOIRE

Présenté pour l'obtention du diplôme de **MAGISTER**

EN : **PHYSIQUE**

Spécialité : Physique Théorique des Basses et Moyennes Énergies

Par : **HAMZA YACINE**

Contribution à l'étude des noyaux super lourds par la théorie de
Hartree-Fock-Bogoliubov

Soutenu publiquement le 05/03/2012, devant le jury composé de :

<i>Mr. BENCHOUK Chafik</i>	<i>Maître de Conférences/ A à l'USTHB</i>	<i>Président</i>
<i>Mr. OUDIH Mohamed Réda</i>	<i>Professeur à l'USTHB</i>	<i>Directeur de Thèse</i>
<i>Mr. FELLAH Mohamed</i>	<i>Professeur à l'USTHB</i>	<i>Examineur</i>
<i>Mr. DJEBLI Mourad</i>	<i>Professeur à l'USTHB</i>	<i>Examineur</i>
<i>Mlle. BENHAMOUDA Naziha</i>	<i>Maître de Conférences/ A à l'USTHB</i>	<i>Examinatrice</i>

Remerciement

Je remercie Dieu de m'avoir donné la force et la volonté de réaliser ce travail.

Je remercie mes parents, envers qui je suis très reconnaissant pour tout leur soutien.

Je remercie Mr M. R. OUDIH, mon directeur de thèse pour m'avoir proposé ce sujet, de m'avoir accompagné tout au long de ce travail, pour sa patience, ses conseils et ses critiques constructives.

Je remercie Mr M. FELLAH, Professeur à l'USTHB, de m'avoir bien accueilli au sein de son laboratoire de physique théorique de la faculté de physique à l'USTHB, de m'avoir fait connaître ce domaine de la physique, je le remercie sincèrement pour ses conseils et ses encouragements.

Je remercie Mlle N.H. ALLAL, Professeur à l'USTHB, pour son agréable accueil et pour l'aide qu'elle m'a accordé.

Je remercie également Mr C. BENCHOUK, Maître de conférences A à l'USTHB, d'avoir bien voulu présider le jury.

Merci à Mr M. FELLAH, Professeur à l'USTHB, Mlle N. BENHAMOUDA, Maître de conférences A à l'USTHB et Mr M. DJEBLI, Professeur à l'USTHB d'avoir accepté de faire partie du jury.

Sans oublier, tous les collègues du laboratoire ainsi que tous les amis, pour leur aide et leur gentillesse.

Enfin, merci à tous ceux que je connais de près ou de loin, et à tout ceux que je n'ai pas pu citer.

Table des matières

Introduction	2
1 Théorie de Hartree-Fock	6
1.1 Théorie du champ moyen microscopique	6
1.2 Equations de Hartree-Fock	8
1.2.1 Equations de Hartree-Fock dans le formalisme de la seconde quantification	12
1.2.2 Equations de Hartree-Fock dans la représentation coordonnées spatiales	14
1.2.3 Equations de Hartree-Fock en fonction de la matrice densité	15
1.3 Etats excités	21
2 Théorie de Hartree-Fock-Bogoliubov	22
2.1 Insuffisance de la théorie de Hartree-Fock : corrélations d'appariement	22
2.2 Théorie BCS	23
2.2.1 Equations BCS dans la représentation particule	23
2.2.2 Concept de quasi-particule dans le cadre de la théorie BCS	26
2.3 Théorie HFB	27
2.3.1 Généralisation du concept de quasi-particule	27
2.3.2 Formalisme de HFB	28
2.3.3 Valeurs et vecteurs propres	34
2.3.4 Etat fondamental	35
2.3.5 Energie HFB	35
2.3.6 Equations de HFB	37
2.3.7 Résolution des équations de HFB	40

2.4	Equations HFB dans la représentation espace des coordonnées	41
3	Théorie HFB avec interaction de Skyrme	43
3.1	Interaction nucléon-nucléon	43
3.1.1	Interaction nucléon-nucléon libres	43
3.1.2	Construction d'une interaction nucléon-nucléon	46
3.2	Interaction de Skyrme	47
3.3	Equations HFB avec interaction de Skyrme	49
3.3.1	Fonctionnelle de la densité d'énergie de Skyrme	49
3.3.2	Equations HFB avec interaction de Skyrme	50
3.3.3	Solution des équations HFB	52
3.3.4	Diagonalisation de l'hamiltonien de HFB	53
3.3.5	Calcul des densités locales	54
3.3.6	Interaction coulombienne	55
3.4	Restauration de la symétrie nombre de particules	56
3.4.1	Brisure de symétrie	56
3.4.2	Méthode de Lipkin-Nogami	57
4	Résultats numériques et discussion	59
4.1	Energie de liaison	60
4.2	Déformation nucléaire	60
4.3	Rayons quadratiques	64
4.4	Niveaux de Fermi	65
4.5	Energie de séparation de deux neutrons	65
4.6	Energie de désintégration	68
4.7	Demi-vie	71
	Conclusion	74
	Annexes	76
A	Théorème de Thouless	76
B	Propriétés des solutions de Hartree-Fock : symétrie	79
B.1	Quelques cas concernant la symétrie et la conservation des observables	82

C Paramètres de l'interaction de Skyrme et d'appariement	84
D Calcul des différents termes de la fonctionnelle de Skyrme	86

Table des figures

Carte des isotopes	2
4-1 Variation de l'énergie de liaison par nucléon E/A de quelques isotopes $100 \leq Z \leq 110$ en fonction du nombre de neutrons.	61
4-2 Variation de l'énergie de liaison par nucléon E/A des isotopes $110 \leq Z \leq 120$ en fonction du nombre de neutrons.	62
4-3 Variation des moments quadrupolaires β_n, β_p des isotopes $110 \leq Z \leq 120$ en fonction du nombre de neutrons.	63
4-4 Variation des rayons quadratiques moyens r_n, r_p et r_c des isotopes $110 \leq Z \leq 120$ en fonction du nombre de neutrons.	66
4-5 Variation des énergies du niveau de Fermi λ_p et λ_n des isotopes $110 \leq Z \leq 120$ en fonction du nombre de neutrons.	67
4-6 Variation de l'énergie de séparation S_{2n} des isotopes $110 \leq Z \leq 120$ en fonction du nombre de neutrons.	69
4-7 Variation de l'énergie de désintégration Q_α des isotopes $112 \leq Z \leq 120$ en fonction du nombre de neutrons.	70
4-8 Variation du temps de demi-vie $\log_{10} T_\alpha$ des isotopes $112 \leq Z \leq 120$ en fonction du nombre de neutrons.	72
4-9 Variation du temps de demi-vie $\log_{10} T_\alpha$ des isotopes $112 \leq Z \leq 120$ en fonction du nombre de neutrons déterminé par la théorie HFB.	73

Introduction

Parmi environ 3000 noyaux connus à l'heure actuelle, seulement 287 noyaux existent dans la nature. Ces nombres sont, toutefois, faibles comparativement aux 7000 noyaux qui devraient exister avec des durées de vie variant de la fraction de seconde à des milliards d'années. Sur la carte des isotopes, figure 1, les drip-lines délimitent le domaine d'existence des noyaux. Si la drip-line positionnée du côté des noyaux riches en protons est relativement bien connue (jusqu'à $Z \sim 83$), celle des noyaux riches en neutrons n'est connue que jusqu'à l'oxygène. De vastes zones de la carte des isotopes restent donc ignorées, l'exploration de ces régions est l'un des principaux objectifs de la recherche actuelle en physique nucléaire.

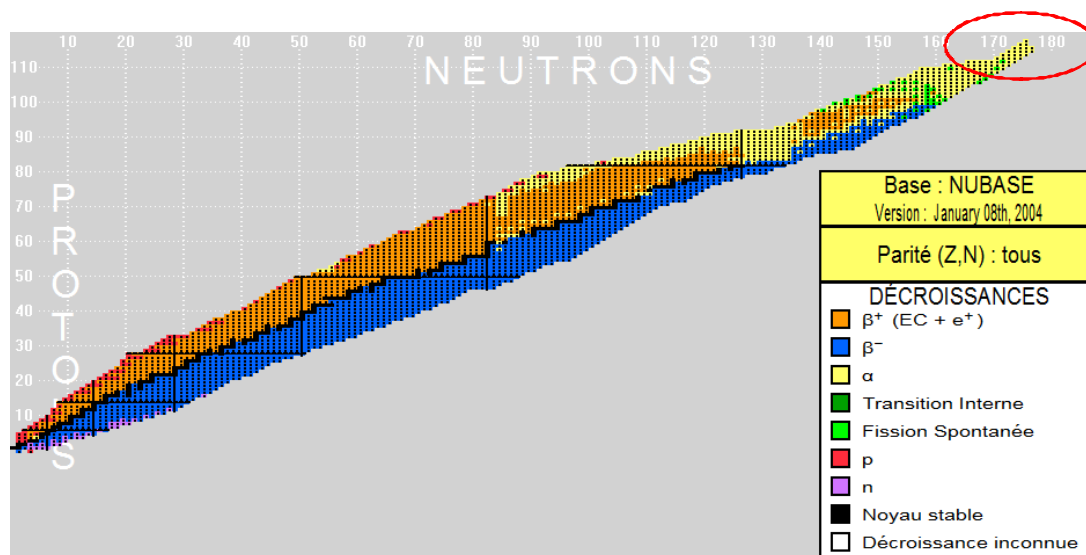


Fig. 1 : Carte des isotopes.

La synthèse des éléments lourds par des réactions nucléaires a été une source importante d'informations. Ces informations ont permis une meilleure compréhension de la structure élémentaire de la matière et de prévoir aussi bien l'existence que les propriétés d'éléments beaucoup plus lourds, les super lourds.

L'étude des noyaux lourds et super lourds est à l'origine de beaucoup de questions aussi bien du point de vue de la structure nucléaire que des mécanismes de réaction mis en jeu pour leur synthèse. Toutefois, les faibles sections efficaces de production de ces noyaux en laboratoire fait des modèles théoriques un outil indispensable fournissant des indications sur les techniques expérimentales à utiliser.

La majorité des études théoriques réalisées à ce jour sont basées sur le modèle macroscopique-microscopique (Myers et Swiatecki [1], Meldner [2], Nilsson et al. [3], 1968 ; Mosel et Greiner [4], Fiset et Nix [5], Randrup et al. [6]). La plupart de ces calculs prévoient que $N = 184$ serait le prochain nombre magique neutron, tandis que les deux nombres $Z = 114$ et 126 ont été suggérés en tant que nombres magiques proton. L'élément $Z = 114$ a été identifié comme magique par des modèles récents basés sur l'approche de Strutinsky (Moller et Nix [7], Sobiczewski [8]). Par contre, les calculs de Hartree-Fock prévoient la stabilité la plus élevée pour un nombre de proton $Z = 120$ (Rutz et al. [9]) ou $Z = 126$ (Cwiok et al. [10]). Les différents nombres prévus pour les fermetures de couches proton laissent également suggérer que la forme de l'énergie de correction de couches des noyaux super lourds est différente de celle des noyaux voisins du ^{208}Pb . Au lieu d'un minimum pointu au nombre magique proton et neutron, un éventail d'énergies de correction de couches négatives moins prononcées ont été obtenues de $Z = 114$ à 126 et de $N = 184$ à 196 . Par conséquence, les demi-vies prévues basées sur les divers calculs ont différé de plusieurs ordres de grandeur. Certaines des demi-vies ont approché l'âge de l'univers, et plusieurs tentatives ont eu lieu pour découvrir des éléments super lourds naturels. Des matériaux aussi bien terrestres qu'extraterrestres ont été étudiés dans ce but.

Les noyaux super lourds sont essentiellement stabilisés par des effets quantiques de couches et d'appariement. Ceci implique la nécessité de l'utilisation d'une approche microscopique [11] basée sur l'approximation du champ moyen tout en incluant les corrélations [12].

Dans le présent travail, nous nous sommes alors proposé d'étudier les noyaux super lourds dans le cadre de la théorie de Hartree-Fock-Bogoliubov avec une interaction effective de Skyrme exprimée dans la représentation position [13]. En effet, les approches de champ moyen auto-cohérent, du type Hartree-Fock, constituent l'un des outils les plus puissants pour l'étude de la structure nucléaire. Ces approches reposent sur l'hypothèse qui consiste à considérer le nucléon dans un puits de potentiel se déplaçant indépendamment de la présence d'autres nucléons voisins. Cela revient tout simplement à réduire le problème de N particules [14] en interaction à une seule particule qui se déplace dans

un potentiel moyen (d'où l'appellation théories de champ moyen). On passe donc d'un problème à N corps à N problèmes à un corps.

D'autre part, dans l'approche de Hartree-Fock [15] le potentiel nucléaire est déduit numériquement et ce à partir de l'interaction nucléon-nucléon. Il est nécessaire donc de résoudre l'équation de Schrödinger par une méthode itérative. Le potentiel qui apparaît dans les équations est self consistant car celui-ci dépend des fonctions d'onde qui s'écrivent sous la forme d'un déterminant de Slater. Cette méthode fera l'objet du premier chapitre du présent mémoire.

Les corrélations d'appariement seront abordées au chapitre 2. Elles seront initialement introduites dans le cadre de l'approximation BCS [16]. Dans un souci de simplicité l'interaction entre les nucléons appariés sera considérée constante (dite généralement interaction de séniorité). Cette force de séniorité sera manipulée dans des espaces variationnels restreints qui se limitent à une partie d'énergie qui se situe autour du niveau de Fermi.

Sur le plan formel l'approximation BCS traite les corrélations d'appariement au-delà du champ moyen de Hartree-Fock tandis que ces corrélations influencent le champ moyen et modifient les énergies des états individuels. Les corrélations d'appariement doivent donc être traitées au même niveau que le champ moyen de particules indépendantes ce qui impose de remplacer l'approximation BCS par une méthode plus générale, il s'agit de la méthode de Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB) [17, 18]. Par ailleurs, l'étude des noyaux dans des situations extrêmes révèle certaines faiblesses concernant le traitement de l'appariement par la méthode BCS. En effet, l'approximation BCS suppose que les nucléons appariés sont dans des états dégénérés en énergie et reliés entre eux via l'opérateur renversement du sens du temps. Ce postulat s'avère ne pas être toujours vérifié car pour les noyaux qui sont en rotation, l'hamiltonien du système contient une contrainte sur une des projections du moment angulaire ce qui implique que l'état propre calculé à partir du champ moyen brise la symétrie par renversement du sens du temps. D'autre part, pour les noyaux situés loin de la vallée de la stabilité, le niveau de Fermi est proche de zéro. Dans ce cas là, l'approximation BCS n'est plus correcte du fait que les corrélations d'appariement ont tendance à connecter les états liés à des états qui se situent dans le continuum. L'une des méthodes les plus efficaces pour traiter cette situation consiste à utiliser la théorie HFB dans la représentation position. Cette approche sera détaillée au chapitre 2.

Généralement, les approches auto-cohérentes du type HF ou HFB sont basées sur

des fonctionnelles de la densité d'énergie [19], souvent formulées en termes d'interactions effectives [20] nucléon-nucléon dépendantes de cette densité. Les paramètres libres de la fonctionnelle sont ajustés sur des données empiriques. Un choix approprié de ces paramètres exige un ensemble complet de contraintes relatives aux données expérimentales sur les noyaux finis, concernant aussi bien les propriétés statiques que les propriétés dynamiques, les caractéristiques empiriques de la matière nucléaire, et les données des observations de la nucléosynthèse, les étoiles à neutrons et les supernovas.

Dans le chapitre 3, nous aborderons l'interaction de Skyrme. C'est une interaction effective phénoménologique non locale et de portée nulle. Le choix de cette interaction est dû à sa simplicité et au fait qu'elle reproduit au mieux les valeurs de l'énergie des noyaux lourds dans leur état fondamental. L'utilisation de cette interaction conduit à une forme particulière de l'énergie de HFB qui sera établie de façon explicite. Dans le présent manuscrit, les résultats des calculs numériques seront exposés au chapitre 4 dans le cas des noyaux pair-pairs riches en neutrons dans la région $110 \leq Z \leq 120$. Il sera question en particulier de l'énergie de liaison, l'énergie de séparation de deux neutrons, le potentiel chimique, la déformation et le rayon quadratique moyen ainsi que l'énergie et de la demi-vie de la désintégration alpha. Les conclusions tirées de ce travail seront enfin présentées.

Chapitre 1

Théorie de Hartree-Fock

1.1 Théorie du champ moyen microscopique

L'interaction qui existe entre nucléons a tendance à les confiner à l'intérieur du noyau. Elle a la particularité d'être de portée finie [12] ce qui fait qu'elle varie en fonction de la distance qui sépare deux nucléons voisins : lorsque la distance entre les nucléons est très grande, l'interaction est nulle. A moyenne distance, elle devient attractive. Et enfin, elle est répulsive lorsque la distance tend vers zéro. Cette particularité illustre bien le principe de Pauli, car étant donnée que les nucléons sont des fermions, ils ne peuvent occuper un même état quantique, par conséquent le libre parcours moyen d'un nucléon qui se trouve à l'intérieur du noyau est beaucoup plus grand comparé à la taille du noyau. Ce résultat est bien confirmé à travers les expériences de diffusion de particules ce qui a conduit par la suite à élaborer un modèle à particules indépendantes. Ce dernier repose sur l'hypothèse qui consiste à considérer un nucléon se déplaçant dans un puits de potentiel indépendamment de la présence d'autres nucléons voisins (confinement dans un noyau). Cela revient tout simplement à réduire le problème de N particules en interaction à une seule particule qui se déplace dans un potentiel moyen (d'où l'appellation théorie du champ moyen). On passe donc d'un problème à N corps à N problèmes à un corps.

Initialement développée et utilisée en physique atomique, cette hypothèse a eu un succès considérable (bien qu'on lui reproche d'être très simplificatrice et ne reflétant pas la réalité du problème) non seulement en physique atomique mais notamment en physique nucléaire car les théories du champ moyen occupent une partie prépondérante de la théorie du noyau. Notons bien qu'il est souvent nécessaire de rajouter des termes supplémentaires qui apportent des corrections ainsi qu'un nombre de paramètres ajustables.

En pratique, l'une des tâches les plus difficiles rencontrées dans les théories du champ moyen réside dans la définition même du potentiel du champ moyen. Pour cela deux approches sont proposées :

La première est l'approche phénoménologique qui consiste à paramétriser le potentiel nucléaire par une fonction mathématique qui lui soit appropriée. Cette procédure fut appliquée la première fois par Nilsson qui utilisa un potentiel déformé du type oscillateur harmonique. Par la suite, des paramétrisations plus récentes ont été construites à base de fonctions plus réalistes décrivant fidèlement les expériences réalisées jusque là. Une des formes les plus célèbres est celle du potentiel de Woods-Saxon [17].

La seconde approche est l'approche auto-cohérente, ou approche de Hartree-Fock, dans ce cas le but est de déduire numériquement le potentiel nucléaire et ce à partir de l'interaction nucléon-nucléon. Il est nécessaire donc de résoudre l'équation de Schrödinger par une méthode itérative. Le potentiel qui apparaît dans les équations est self consistant car celui-ci dépend des fonctions d'onde qui s'écrivent sous la forme d'un déterminant de Slater.

Du fait que l'interaction nucléon-nucléon dans le noyau n'est pas connue analytiquement, la difficulté n'est donc pas de trouver la fonction qui décrit le mieux ce potentiel mais c'est de trouver la fonction qui se rapproche le plus de l'interaction nucléon-nucléon. En effet, l'action de l'interaction forte est seulement entre les quarks qui contribuent à la formation des nucléons et dans le modèle standard, l'interaction nucléon-nucléon dans le vide apparaît comme une conséquence d'une interaction quark-quark. Or, il n'existe pas de théorie qui permet de passer d'une interaction à l'autre. Par ailleurs, même si on parvient à résoudre ce problème il reste une grande différence entre l'interaction de deux nucléons qui interagissent dans le vide et celui de l'interaction de ces mêmes nucléons au sein d'un ensemble formé de plusieurs autres nucléons qui forment le noyau. Pour contourner cet obstacle, il faut introduire le concept d'interaction effective, l'idée est que cette interaction est une fonction mathématique qui contient un nombre de paramètres ajustables selon des données expérimentales.

L'approximation de Hartree-Fock relie l'interaction nucléon-nucléon effective au champ moyen tout en négligeant une partie des effets de la force nucléon-nucléon, ce qui rend cette approche capable de décrire d'une manière rigoureuse, uniquement les noyaux magiques où l'interaction résiduelle entre deux nucléons peut être considérée comme une très faible perturbation que l'on néglige.

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 introduite de deux manières différentes.

1.2 Equations de Hartree-Fock

Etant donné que les nucléons sont des fermions, ils obéissent au postulat de symétrisation qui stipule que la fonction d'onde représentant le noyau est complètement antisymétrique par permutation des coordonnées d'espace \vec{r} , de spin σ et d'isospin τ . Cette fonction d'onde est représentée par un ensemble de déterminants de Slater [12, 17, 21] construits à partir de fonctions d'onde individuelles. Dans le cas des particules indépendantes [11], la fonction d'onde à N corps est représentée par un seul déterminant de Slater ce qui fait que l'espace variationnel se restreint aux déterminants de Slater.

Le point fort de la théorie de Hartree-Fock est dû à son auto-cohérence. Cela vient du fait que c'est une théorie basée sur le modèle de particules indépendantes qui évoluent dans un champ moyen créé par elles mêmes. Ce champ moyen n'est autre qu'une interaction effective entre les nucléons.

Le point de départ, pour la formulation des équations de Hartree-Fock, est de supposer que l'hamiltonien total du système s'écrit comme une somme de deux opérateurs, le premier est le terme d'énergie cinétique et le second est celui d'une interaction à deux corps :

$$\hat{H} = \sum_i \hat{t}_i + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \hat{v}_{ij} = \hat{T} + \hat{V} \quad (1.1)$$

\hat{T} : est l'opérateur énergie cinétique.

\hat{V} : est la somme de toutes les interactions présent deux à deux subies par les fermions.

Il est important de signaler que généralement, les interactions à plus de deux corps sont négligées, leur contribution étant faible.

Considérons un système formé de A fermions indépendants, ce système est décrit par le déterminant de Slater :

$$\Phi(1, 2, \dots, A) = \frac{1}{\sqrt{A!}} \begin{vmatrix} \phi_1(r_1) & \phi_1(r_2) & \dots & \phi_1(r_A) \\ \phi_2(r_1) & \phi_2(r_2) & \dots & \phi_2(r_A) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_A(r_1) & \phi_A(r_2) & \dots & \phi_A(r_A) \end{vmatrix} \quad (1.2)$$

où $\phi_i \in$ l'espace de Hilbert.

Dans la méthode de Hartree-Fock, on cherche le déterminant qui minimise la valeur moyenne de l'hamiltonien \hat{H} , cet état que l'on note $|\Phi\rangle$. :

$$\delta \langle \Phi | \hat{H} | \Phi \rangle = 0 \quad (1.3)$$

Ce qui implique que :

$$\langle \delta\Phi | \hat{H} | \Phi \rangle + \langle \Phi | \hat{H} | \delta\Phi \rangle = 0 \quad (1.4)$$

Cette équation doit être satisfaite pour toute variation infinitésimale $|\delta\Phi\rangle$ laissant l'état $|\Phi\rangle$ normé, ce qui entraîne que $|\delta\Phi\rangle$ doit être orthogonal à $|\Phi\rangle$, et on écrit :

$$\delta \langle \Phi | \Phi \rangle = 0 \quad (1.5)$$

D'où :

$$\langle \delta\Phi | \Phi \rangle + \langle \Phi | \delta\Phi \rangle = 0 \quad (1.6)$$

En remplaçant $|\delta\Phi\rangle$ par $i|\delta\Phi\rangle$ dans l'équation (1.4), il vient que [17] :

$$-i \langle \delta\Phi | \hat{H} | \Phi \rangle + i \langle \Phi | \hat{H} | \delta\Phi \rangle = 0 \quad (1.7)$$

qui, combinée à l'équation (1.4), donne :

$$\langle \delta\Phi | \hat{H} | \Phi \rangle = \langle \Phi | \hat{H} | \delta\Phi \rangle = 0 \quad (1.8)$$

Comme l'hamiltonien est hermitique les équations précédentes sont équivalentes, il suffit donc que l'une soit satisfaite pour que l'autre le soit aussi.

On note par : u_λ , ou u_μ ($\lambda, \mu = 1, 2, 3, \dots, A$), les orbitales occupées et par : u_σ ou u_τ ($\sigma, \tau > A$), les orbitales inoccupées. Ainsi, à toute variation $\delta u_1, \delta u_2, \dots, \delta u_A$ des fonctions d'onde individuelles occupées u_1, u_2, \dots, u_A , dont le déterminant de Slater est :

$$|\Phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{A!}} |u_1, u_2, \dots, u_A| \quad (1.9)$$

lui correspond la variation :

$$|\delta\Phi\rangle = |\Phi + \delta\Phi\rangle - |\Phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{A!}} \{ |u_1 + \delta u_1, u_2 + \delta u_2, \dots, u_A + \delta u_A| - |u_1, u_2, \dots, u_A| \} \quad (1.10)$$

Qui s'écrit au premier ordre en δu :

$$|\delta\Phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{A!}} \sum_{\lambda}^A |u_1, u_2, \dots, \delta u_{\lambda}, \dots, u_A| \quad (1.11)$$

Le déterminant de Slater du second membre ne diffère de Φ que par sa colonne $n^{\circ}\lambda$ dans laquelle le vecteur colonne u_{λ} est remplacé par sa variation δu_{λ} . On développe δu_{λ} sur la base des états à une particule (u_{λ}, u_{σ}) de l'espace de Hilbert :

$$\delta u_{\lambda} = \sum_{\mu=1}^A a_{\mu}^{\lambda} u_{\mu} + \sum_{\sigma>A} a_{\sigma}^{\lambda} u_{\sigma} \quad (1.12)$$

Dans cette expression les coefficients a sont supposés petits. Dans ce cas, $|\delta\Phi\rangle$ prend la forme :

$$|\delta\Phi\rangle = \sum_{\lambda=1}^A \sum_{\mu=1}^A a_{\mu}^{\lambda} \Phi_{\lambda}^{\mu} + \sum_{\lambda=1}^A \sum_{\sigma>A} a_{\sigma}^{\lambda} \Phi_{\lambda}^{\sigma} \quad (1.13)$$

où Φ_{λ}^{μ} et Φ_{λ}^{σ} sont des déterminants de Slater obtenus à partir de Φ en remplaçant le vecteur u_{λ} par u_{μ} et u_{σ} respectivement. On voit que :

$$\Phi_{\lambda}^{\mu} = \delta_{\lambda\mu} \Phi \quad (1.14)$$

donc Φ_{λ}^{μ} est un état à une particule-un trou.

La condition d'orthogonalité $\langle \delta\Phi | \Phi \rangle = 0$ fait que :

$$\sum_{\lambda=1}^A a_{\lambda}^{\lambda} = 0 \quad (1.15)$$

De sorte que :

$$|\delta\Phi\rangle = \sum_{\lambda=1}^A \sum_{\sigma>A} a_{\sigma}^{\lambda} \Phi_{\lambda}^{\sigma} \quad (1.16)$$

Et la condition (1.8) devient :

$$\sum_{\lambda=1}^A \sum_{\sigma>A} a_{\sigma}^{\lambda*} \langle \Phi_{\lambda}^{\sigma} | \hat{H} | \Phi \rangle = 0 \quad (1.17)$$

Etant donné que les a_{σ}^{λ} sont arbitraires, on obtient la condition de Brillouin suivante :

$$\langle \Phi_{\lambda}^{\sigma} | \hat{H} | \Phi \rangle = 0 \quad (1.18)$$

Cela est vérifié $\forall \lambda \leq A$ et $\sigma > A$, ce qui signifie que l'hamiltonien du système ne connecte pas les états de Hartree-Fock et les états à une particule (trou).

Ecrivons l'hamiltonien du système comme suit :

$$\hat{H} = \sum_i \hat{t}_i + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \hat{v}_{ij} = \hat{T} + \hat{V} \quad (1.19)$$

Il vient que la condition de Brillouin se transforme en une condition sur les orbitales u_λ qu'on va noter $|\lambda\rangle$ telle que :

$$\langle \sigma | \hat{T} | \lambda \rangle + \sum_{\mu=1}^A \langle \sigma \mu | \hat{v}_{ij} | \lambda \mu \rangle = 0, \quad \forall \lambda, 1 \leq \lambda \leq A. \quad (1.20)$$

C'est la condition de Hartree-Fock qui s'écrit aussi :

$$\langle \sigma | \hat{h} | \lambda \rangle = 0 \quad (1.21)$$

où $\hat{h} \equiv \hat{h}(u_1, u_2, \dots, u_A)$ est appelé *hamiltonien de Hartree-Fock*. C'est un opérateur à un corps qui dépend du sous-espace $\{u_1, u_2, \dots, u_A\}$ engendré par les A orbitales occupées, cette condition signifie que \hat{h} ne connecte pas les états occupés et les états inoccupés.

La condition (1.21) peut s'écrire sous la forme d'un système de A équations couplées :

$$h u_\lambda = \sum_{\mu=1}^A e_{\lambda\mu} u_\mu \quad (1.22)$$

Généralement la matrice $E = (e_{\lambda\mu})$ est écrite sous sa forme diagonale :

$$e_{\lambda\mu} = e_\lambda \delta_{\lambda\mu}$$

La relation (1.22) s'écrit :

$$h u_\lambda = e_\lambda u_\lambda$$

1.2.1 Equations de Hartree-Fock dans le formalisme de la seconde quantification

Dans le formalisme de la seconde quantification [17], l'hamiltonien du système s'écrit :

$$\hat{H} = \sum_{ij} \langle i | \hat{t} | j \rangle a_i^\dagger a_j + \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \langle ij | \hat{v} | kl \rangle a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k \quad (1.23)$$

avec : a^\dagger et a sont respectivement les opérateurs de création et d'annihilation de particule.

$$\langle ij | \hat{v} | kl \rangle = - \langle ij | \hat{v} | lk \rangle \quad (1.24)$$

$$\{a_i^\dagger, a_j\} = \delta_{ij} \quad (1.25)$$

$$\{a_i^\dagger, a_j^\dagger\} = \{a_i, a_j\} = 0$$

La fonction d'onde qui est solution du système s'écrit :

$$|\Phi_{HF}\rangle = \prod_{\lambda} a_{\lambda}^{\dagger} |0\rangle \quad (1.26)$$

L'énergie de Hartree-Fock prend la forme :

$$E_{HF} = \langle \Phi_{HF} | \hat{H} | \Phi_{HF} \rangle = \sum_{ij} \langle i | \hat{t} | j \rangle \langle \Phi_{HF} | a_i^\dagger a_j | \Phi_{HF} \rangle + \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \langle ij | \hat{v} | kl \rangle \langle \Phi_{HF} | a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k | \Phi_{HF} \rangle \quad (1.27)$$

En appliquant le théorème de Wick :

$$\langle \Phi_{HF} | a_i^\dagger a_j | \Phi_{HF} \rangle = \delta_{ij} \quad (1.28)$$

$$\langle \Phi_{HF} | a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k | \Phi_{HF} \rangle = -\delta_{il} \delta_{jk} + \delta_{ik} \delta_{jl}$$

on obtient :

$$E_{HF} = \langle \Phi_{HF} | \hat{H} | \Phi_{HF} \rangle = \sum_{\lambda \in \Phi} \langle \lambda | \hat{t} | \lambda \rangle + \frac{1}{2} \sum_{\lambda, \mu \in \Phi} \langle \lambda \mu | \hat{v} | \lambda \mu \rangle \quad (1.29)$$

où la somme porte sur tous les états à une particule (ou orbitales de Hartree-Fock) occupés qui définissent l'état de Hartree-Fock $|\Phi_{HF}\rangle$.

Pour déterminer les états λ , procédons au développement de $|\lambda\rangle$ sur une base complète de la forme :

$$|\lambda\rangle = \sum_i C_i^\lambda |i\rangle \quad (1.30)$$

ce qui implique pour les opérateurs de création correspondants :

$$b_\lambda^\dagger = \sum_i C_i^\lambda a_i^\dagger \quad (1.31)$$

Les états $|\lambda\rangle$ sont normés :

$$\langle \lambda | \lambda \rangle = 1 \quad (1.32)$$

donc :

$$\sum_i |C_i^\lambda|^2 = 1 \quad (1.33)$$

L'expression (1.29) devient :

$$E_{HF} = \sum_{\lambda \in \Phi} \sum_{ij} C_i^{\lambda*} \langle i | \hat{t} | j \rangle C_j^\lambda + \frac{1}{2} \sum_{\lambda, \mu \in \Phi} \sum_{ijkl} C_i^{\lambda*} C_j^{\mu*} \langle ij | \hat{v} | kl \rangle C_k^\lambda C_l^\mu \quad (1.34)$$

L'énergie E_{HF} doit être stationnaire par rapport aux variations infinitésimales des C_i^λ , ce qui s'écrit :

$$\frac{\partial}{\partial C_i^{\lambda*}} [E_{HF} - \sum_\lambda e_\lambda \{ \sum_j |C_j^\lambda|^2 - 1 \}] = 0 \quad (1.35)$$

les e_λ étant des multiplicateurs de Lagrange.

En remplaçant E_{HF} par son expression, on obtient :

$$\frac{\partial}{\partial C_i^{\lambda*}} \left[\sum_{\lambda \in \Phi} \sum_{ij} C_i^{\lambda*} \langle i | \hat{t} | j \rangle C_j^\lambda + \frac{1}{2} \sum_{\lambda, \mu \in \Phi} \sum_{ijkl} C_i^{\lambda*} C_j^{\mu*} \langle ij | \hat{v} | kl \rangle C_k^\lambda C_l^\mu - \sum_\lambda e_\lambda \{ \sum_j |C_j^\lambda|^2 - 1 \} \right] = 0 \quad (1.36)$$

D'où :

$$\sum_j \{ \langle i | \hat{t} | j \rangle + \sum_{\mu \in \Phi} \langle i\mu | \hat{v} | j\mu \rangle \} C_j^\lambda = e_\lambda C_i^\lambda \quad (1.37)$$

où :

$$\langle i\mu | \hat{v} | j\mu \rangle = \sum_{kl} C_k^{\mu*} \langle ik | \hat{v} | jl \rangle C_l^\mu$$

On aboutit au problème aux valeurs propres :

$$\hat{h} |\lambda\rangle = e_\lambda |\lambda\rangle \quad (1.38)$$

où les états de Hartree-Fock $|\lambda\rangle$ ne sont rien d'autres que les fonctions propres de l'hamiltonien de Hartree-Fock :

$$\hat{h} = \langle i | \hat{t} | j \rangle + \sum_{\lambda \in \Phi} \langle i \lambda | \hat{v} | j \lambda \rangle \quad (1.39)$$

avec les énergies propres e_λ . \hat{h} est le champ self-consistant de Hartree-Fock, qui est lui-même défini en fonction de ses états propres.

1.2.2 Equations de Hartree-Fock dans la représentation coordonnées spatiales

Il est intéressant de donner la forme des équations de Hartree-Fock dans l'espace des coordonnées [17] :

$$\begin{aligned} \langle i \lambda | \hat{v} | j \lambda \rangle &= \langle i \lambda | \left(\int \int \vec{dr}_1 \vec{dr}_2 | \vec{r}_1 \vec{r}_2 \rangle \langle \vec{r}_1 \vec{r}_2 | \right) \hat{v} \left(\int \int \vec{dr}'_1 \vec{dr}'_2 | \vec{r}'_1 \vec{r}'_2 \rangle \langle \vec{r}'_1 \vec{r}'_2 | \right) | j \lambda \rangle \\ &= \int \int \int \int \vec{dr}_1 \vec{dr}_2 \vec{dr}'_1 \vec{dr}'_2 \langle i \lambda | \vec{r}_1 \vec{r}_2 \rangle \langle \vec{r}_1 \vec{r}_2 | \hat{v} | \vec{r}'_1 \vec{r}'_2 \rangle \langle \vec{r}'_1 \vec{r}'_2 | j \lambda \rangle \\ &= \int \int \vec{dr}_1 \vec{dr}_2 \langle i \lambda | \vec{r}_1 \vec{r}_2 \rangle \hat{v}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \langle \vec{r}_1 \vec{r}_2 | j \lambda \rangle \\ &= \int \int \vec{dr}_1 \vec{dr}_2 \phi_i^*(\vec{r}_1) \phi_\lambda^*(\vec{r}_2) \hat{v}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \{ \phi_j(\vec{r}_1) \phi_\lambda(\vec{r}_2) - \phi_\lambda(\vec{r}_1) \phi_j(\vec{r}_2) \} \\ &= \int \int \vec{dr}_1 \vec{dr}_2 \phi_i^*(\vec{r}_1) \phi_\lambda^*(\vec{r}_2) \hat{v}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \phi_j(\vec{r}_1) \phi_\lambda(\vec{r}_2) - \\ &\quad \int \int \vec{dr}_1 \vec{dr}_2 \phi_i^*(\vec{r}_1) \phi_\lambda^*(\vec{r}_2) \hat{v}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \phi_\lambda(\vec{r}_1) \phi_j(\vec{r}_2) \end{aligned} \quad (1.40)$$

Le champ moyen s'écrit comme étant la somme de deux termes, le premier terme local de Hartree :

$$v_L(\vec{r}_1) = \sum_{\lambda \in \Phi} \int \vec{dr}_2 \phi_\lambda^*(\vec{r}_2) \hat{v}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \phi_\lambda(\vec{r}_2) \quad (1.41)$$

et le deuxième terme non-local de Fock ou potentiel d'échange :

$$v_{NL}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = - \sum_{\lambda \in \Phi} \phi_\lambda^*(\vec{r}_2) \hat{v}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \phi_\lambda(\vec{r}_1) \quad (1.42)$$

Ces potentiels sont aussi self consistants car ils dépendent des fonctions d'onde individuelles ϕ_λ qui génèrent un système auto cohérent formé de A équations non linéaires :

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m}\Delta + v_L(\vec{r}_1)\right)\phi_\lambda(\vec{r}_1) + \int v_{NL}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\phi_\lambda(\vec{r}_1)d\vec{r}_2 = \varepsilon_\lambda\phi_\lambda(\vec{r}_1) \quad (1.43)$$

La résolution de ce système se fait par itération qui conduit à la convergence de l'ensemble que forment les fonctions d'onde individuelles ϕ_λ , ainsi que leur énergie correspondante ε_λ .

Dans le présent travail, une interaction nucléon-nucléon effective de type phénoménologique sera considérée.

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

Formulation de la matrice densité

Dans ce qui suit, on notera les états occupés par les indices (i, j) et par (m, n) les états non occupés (ou vides), et lorsqu'on ne fait pas de distinction (en général) le choix des indices est libre : k, l, p, q, \dots

Le potentiel de Hartree-Fock (ou potentiel moyen de la particule indépendante) est défini comme suit [17] :

$$\hat{H}_{HF} = \sum_i h(i) \quad (1.44)$$

La fonction d'onde, fonction propre de \hat{H}_{HF} , qui permet d'avoir une bonne approximation de l'énergie E_{HF}^0 de l'état fondamental n'est autre que $\Phi(1, 2, \dots, A)$ appelé généralement état de Hartree-Fock, défini comme suit :

$$|\Psi_{HF}\rangle = |\Phi(1, 2, \dots, A)\rangle = \prod_i a_i^+ |0\rangle, \quad (1.45)$$

construit à partir du déterminant de Slater à travers les fonctions propres de particules individuelles ϕ_k qui forment une base complète et orthogonale, et satisfont à l'équation aux valeurs propres :

$$h(i)\phi_k = \varepsilon_k\phi_k \quad (1.46)$$

Ces fonctions d'onde peuvent être développées sur une base $\{\chi_l\}$ de fonctions d'onde

connues qui forment une base complète et orthogonale¹, telle que :

$$\phi_k = \sum_l D_{lk} \chi_l \quad (1.47)$$

où les D_{lk} sont les coefficients de la transformation qui permettent le passage de la base $\{\phi_k\}$ à la base $\{\chi_l\}$, et qui vérifient la propriété suivante :

$$DD^\dagger = D^\dagger D = 1 \quad (1.48)$$

On peut aussi exprimer l'opérateur a_k^\dagger par :

$$a_k^\dagger = \sum_l D_{lk} c_l^\dagger \quad (1.49)$$

Le fait d'avoir une transformation unitaire permet de séparer les états particules et les états trous tout en laissant l'état Φ inchangé car il n'y a pas de correspondance entre l'état Φ et les états individuels ϕ_k , ce qui nous amène à introduire la notion de matrice densité de la particule individuelle ρ qui est définie comme étant un projecteur dans le sous-espace engendré par les états trous $\phi_i (i < \lambda)$, donné par :

$$\rho_{ll'} = \langle \Phi | c_l^\dagger c_{l'} | \Phi \rangle \quad (1.50)$$

Ce choix se traduit par :

1. Le fait que ρ est diagonale et a pour valeurs propres le nombre d'occupation à savoir 1 pour $l \leq A$ (trous) et 0 pour $l > A$ (particules).
2. La trace de ρ est égale au nombre total de nucléons : $Tr(\rho) = A$.

En tenant compte de (1.49) et (1.48) on a :

$$\begin{aligned} \rho_{ll'} &= \sum_{kk'} D_{lk} D_{l'k'}^* \langle \Phi | a_k^\dagger a_{k'} | \Phi \rangle \\ &= \sum_i D_{li} D_{l'i}^* \end{aligned} \quad (1.51)$$

D'après ce qu'on vient d'introduire, il y a une correspondance entre Φ et ρ qui est caractérisée par le fait d'avoir deux valeurs propres à savoir 0 et 1. Ceci assure l'idempotence

¹L'une des bases les plus utilisées est celle de l'oscillateur harmonique.

de ρ :

$$\rho^2 = \rho \quad (1.52)$$

De la même manière, on définit le projecteur σ , dans le sous-espace engendré par les états de particules ϕ_m , donné par :

$$\sigma = 1 - \rho \quad (1.53)$$

Equations de Hartree-Fock

L'énergie E_{HF} est donnée par :

$$E_{HF} = \langle \Phi | \hat{H} | \Phi \rangle \quad (1.54)$$

où l'hamiltonien en seconde quantification est :

$$\hat{H} = \sum_{ij} \langle i | \hat{t} | j \rangle a_i^\dagger a_j + \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \langle ij | \hat{v} | kl \rangle a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k \quad (1.55)$$

Dans ce cas :

$$E_{HF}(\rho) = \sum_{ij} \langle i | \hat{t} | j \rangle \langle \Phi | a_i^\dagger a_j | \Phi \rangle + \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \langle ij | \hat{v} | kl \rangle \langle \Phi | a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k | \Phi \rangle \quad (1.56)$$

En appliquant le théorème de Wick, on a :

$$\langle \Phi | a_i^\dagger a_j | \Phi \rangle = \rho_{ji} \quad (1.57)$$

$$\begin{aligned} \langle \Phi | a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k | \Phi \rangle &= \langle \Phi | a_i^\dagger a_k | \Phi \rangle \langle \Phi | a_j^\dagger a_l | \Phi \rangle - \langle \Phi | a_i^\dagger a_l | \Phi \rangle \langle \Phi | a_j^\dagger a_k | \Phi \rangle \\ &= \rho_{ki} \rho_{lj} - \rho_{li} \rho_{kj} \end{aligned} \quad (1.58)$$

et les contractions de la forme $\langle \Phi | a_i a_j | \Phi \rangle$ et $\langle \Phi | a_i^\dagger a_j^\dagger | \Phi \rangle$ sont nulles. Les ρ_{ji} sont les éléments de la matrice densité à un corps diagonale dans la base de Hartree-Fock.

L'énergie s'écrit donc :

$$E_{HF}(\rho) = \sum_{ij} \langle i | \hat{t} | j \rangle \rho_{ji} + \frac{1}{4} \sum_{ijkl} [\rho_{ki} \langle ij | \hat{v} | kl \rangle \rho_{lj} - \rho_{li} \langle ij | \hat{v} | kl \rangle \rho_{kj}] \quad (1.59)$$

Cette écriture devient, en introduisant la notion de trace et de double trace [17] :

$$E_{HF}(\rho) = Tr(t\rho) + \frac{1}{2}TrTr(\rho v \rho) \quad (1.60)$$

Sachant que $a_i^+ |\Psi\rangle = 0$ et $a_m |\Psi\rangle = 0$, on aboutit enfin à :

$$E_{HF}(\rho) = \sum_{ij} t_{ij} + \frac{1}{2} \sum_{ij} \bar{v}_{ijij} \quad (1.61)$$

où : $\bar{v}_{ijij} = v_{ijij} - v_{ijji}$.

La variation de l'énergie s'écrit :

$$\delta E_{HF}(\rho) = E_{HF}(\rho + \delta\rho) - E_{HF}(\rho) = Tr(\rho\delta\rho) = \sum_{mi} h_{mi}\delta\rho_{im} + cc \quad (1.62)$$

En tenant compte de l'idempotence de ρ et du fait que :

$$(\rho + \delta\rho)^2 = \rho + \delta\rho \quad (1.63)$$

on obtient :

$$\delta\rho = \rho \delta\rho + \delta\rho \rho \quad (1.64)$$

Dans la base où ρ est diagonale, on a :

$$\rho \delta\rho \rho = 0, \text{ pour les états trou-trou} \quad (1.65)$$

$$\sigma \delta\rho \sigma = 0, \text{ pour les états particule-particule} \quad (1.66)$$

À partir de la relation (1.62), la matrice hermitique h est donnée par :

$$h_{kk'} = \frac{\delta}{\delta\rho_{kk'}} E_{HF}(\rho) \quad (1.67)$$

En remplaçant $E_{HF}(\rho)$ par son expression (1.61), on obtient l'expression du hamiltonien de Hartree-Fock :

$$h = t + \Gamma \quad (1.68)$$

où t est le terme de l'énergie cinétique et $\Gamma_{kk'}$ est le champ self-consistant donné par :

$$\Gamma_{kk'} = \sum_{l'} v_{kl'k'l} \rho_{ll'} \quad (1.69)$$

Ce champ est responsable de l'auto-cohérence. Il est considéré comme un champ moyen créé par l'ensemble des particules.

Pour des valeurs arbitraires $\delta\rho_{mi}$, et pour avoir :

$$\delta E_{HF}(\rho) = 0, \quad (1.70)$$

il faut que :

$$h_{mi} = t_{mi} + \sum_j v_{mjij} = 0; \quad \begin{pmatrix} i \leq A \\ m > A \end{pmatrix} \quad (1.71)$$

avec la contrainte (1.52), l'équation variationnelle se met sous la forme :

$$\begin{aligned} \delta\{E(\rho) - Tr(\Lambda(\rho^2 - \rho))\} &= 0 & (1.72) \\ \implies Tr\{h\delta\rho\} - \delta\{Tr(\Lambda\rho^2) - Tr(\Lambda\rho)\} &= 0 \\ \implies Tr\{h\delta\rho - \Lambda\rho\delta\rho - \Lambda\delta\rho\rho + \Lambda\delta\rho\} &= 0 \\ \implies Tr\{(h - \Lambda\rho - \Lambda\rho + \Lambda)\delta\rho\} &= 0 \end{aligned}$$

Λ : est un multiplicateur de Lagrange, d'où :

$$Tr(h - \rho\Lambda - \Lambda\rho + \rho) = 0 \quad (1.73)$$

Pour cela, il suffit que :

$$h - \rho\Lambda - \Lambda\rho + \rho = 0 \quad (1.74)$$

En multipliant l'équation (1.74) par ρ , d'une part à droite et d'autre part à gauche, il vient que :

$$\begin{aligned} \rho h - \rho\Lambda - \rho\Lambda\rho + \rho\Lambda &= 0 & (1.75) \\ h\rho - \rho\Lambda\rho - \Lambda\rho + \Lambda\rho &= 0 \end{aligned}$$

à condition que :

$$[\Lambda, \rho] = 0$$

Après soustraction des deux équations, on obtient :

$$[h, \rho] = 0 \quad (1.76)$$

On remarque bien que h sépare les états particules et les états trous de ρ , ce qui se traduit par :

$$[h, \rho] = [t + \Gamma(\rho), \rho] = 0 \quad (1.77)$$

Dans le cas d'un changement de base :

$$\phi_k = \sum_l D_{lk} \chi_l \quad (1.78)$$

on obtient :

$$\sum_{l'} h_{ll'} D_{l'k} = \sum_{l'} (t_{ll'} + \sum_i v_{kik'i} \rho_{ii}) D_{l'k} = \varepsilon_k D_{lk} \quad (1.79)$$

ce qui revient à résoudre le système aux valeurs propres :

$$\sum_{l'} h_{ll'} D_{l'k} = \sum_{l'} (t_{ll'} + \sum_i \sum_{pp'} v_{lp'l'p} D_{pi} D_{p'i}) D_{l'k} = \varepsilon_k D_{lk} \quad (1.80)$$

ϕ_k : fonctions d'onde des états individuels qui sont à déterminer.

χ_l : états propres connus (en général ceux d'un oscillateur harmonique) [13].

les ε_k représentent les paramètres de Lagrange associés à la contrainte qui porte sur l'orthonormalité des fonctions d'onde et ne sont autres que les énergies des états de particules individuelles.

C'est le système d'équations de Hartree-Fock qu'on doit résoudre. L'état fondamental est ainsi obtenu à partir des A fonctions d'onde à une particule de plus basse énergie.

La partie de l'hamiltonien qui sera négligée dans l'approximation du champ moyen est dite "interaction résiduelle", et est donnée par :

$$v_{res} = H - \sum_k h_k \quad (1.81)$$

Par la suite, tout en restant dans le cadre de la théorie du champ moyen, une partie des corrélations induites par cette "interaction résiduelle" sera prise en compte.

1.3 États excités

En ce qui concerne les états excités, dans le cas d'une particule-un trou, ils s'écrivent sous la forme [17] :

$$|mi\rangle = a_m^\dagger a_i |\Phi\rangle \quad (1.82)$$

On parvient ainsi à déterminer l'énergie des états excités :

$$\begin{aligned} E_{mi} &= \langle mi | \hat{H} | mi \rangle \\ &= E_0 + \epsilon_m - \epsilon_i - \bar{v}_{mimi} \end{aligned} \quad (1.83)$$

E_0 : est l'énergie de l'état fondamental.

Notons que les équations de Hartree-Fock n'expriment que la stationnarité de la fonctionnelle d'énergie, par conséquent il faut toujours vérifier qu'elle correspond à un minimum après chaque solution trouvée [22]. Bien que le problème à N-corps est réduit à un problème effectif à un corps non linéaire, la résolution analytique des équations de Hartree-Fock n'est en général pas possible, surtout dans le cadre de la structure nucléaire. Elle nécessite donc des calculs numériques généralement compliqués.

Chapitre 2

Théorie de Hartree-Fock-Bogoliubov

2.1 Insuffisance de la théorie de Hartree-Fock : corrélations d'appariement

L'approximation de Hartree-Fock est bien adaptée pour décrire des noyaux, où dans le spectre de particules individuelles il y a un "*gap*" important [12] entre le dernier niveau occupé et le premier niveau inoccupé. Ce "*gap*" garantit la stabilité du noyau tout en générant un nombre magique de nucléons, qu'il soit pour les neutrons ou pour les protons. C'est le cas des noyaux pair-pairs à couches complètes. Par contre l'approximation devient insuffisante dès que l'on veut décrire l'état fondamental des noyaux dont le niveau de Fermi est situé en milieu de couches. Dans ce cas l'état fondamental sera quasiment dégénéré avec une multitude d'autres états obtenus à partir de configurations de type particule-trou construites sur ce dernier. Il faut donc construire une fonction d'onde représentant correctement l'état fondamental de ces noyaux. Pour cela, il est nécessaire de prendre en compte les corrélations résiduelles. La plus importante de ces corrélations est celle liée à l'appariement responsable en particulier de plusieurs faits expérimentaux tels que :

1. La différence entre les spectres expérimentaux de l'énergie qui caractérisent les deux types de noyaux : pair-pairs et pair-impairs.
2. L'effet pair-impair qui donne généralement une énergie de liaison du noyau pair-impair plus faible que la moyenne arithmétique de l'énergie que possède deux noyaux pair-pairs voisins.
3. Le caractère vibrationnel collectif des premiers états 2^+ qui existe dans les noyaux

pair-pairs voisins des noyaux à couches fermées [14].

4. L'apparition de la barrière de fission dans les noyaux ^{235}U et ^{238}U .
5. Le moment d'inertie [17].
6. Le phénomène du Backbending [17].
7. Les sections efficaces des réactions de transfert.
8. Les probabilités d'émission bêta.

Pour tenir compte de la force d'appariement deux formalismes essentiellement ont été développés : le formalisme de Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB) et le formalisme de Bardeen, Cooper et Schrieffer (BCS) [23]. Ce dernier reste, toutefois, le plus utilisé en raison de sa simplicité.

2.2 Théorie BCS

2.2.1 Equations BCS dans la représentation particule

Soit l'hamiltonien d'un système de particules toutes appariées décrit dans le formalisme de la seconde quantification [16] :

$$\hat{H} = \sum_{\nu>0} \varepsilon_{\nu} (a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu} + a_{\tilde{\nu}}^{\dagger} a_{\tilde{\nu}}) - G \sum_{\nu\mu>0} a_{\nu}^{\dagger} a_{\tilde{\nu}}^{\dagger} a_{\tilde{\mu}} a_{\mu} \quad (2.1)$$

L'ensemble des indices ν, μ porte sur les états à particules indépendantes, généralement solutions des équations de Hartree-Fock.

avec :

a_{ν}^{\dagger} : est l'opérateur de création d'une particule dans un état $|\nu\rangle$.

$a_{\tilde{\nu}}^{\dagger}$: est l'opérateur de création d'une particule dans un état $|\tilde{\nu}\rangle$ obtenu par renversement du sens du temps.

ε_{ν} : est l'énergie du $\nu^{\text{ème}}$ niveau.

G : est la force d'appariement qui est supposée constante.

La description d'un état de paires indépendantes se fait à travers une forme particulière que prend la fonction d'onde :

$$|\Psi\rangle = \prod_{\nu=1} P_{\nu}^{\dagger} |0\rangle \quad (2.2)$$

$|0\rangle$: représente l'état du vide de particules.

Dans chaque paire, il doit y avoir des corrélations entre nucléons. Par conséquent, les opérateurs P_ν^\dagger doivent avoir la particularité d'être plus qu'un simple produit d'opérateurs de création de nucléons. Il convient alors de prendre :

$$P_\nu^\dagger = u_\nu + v_\nu a_\nu^\dagger a_{\tilde{\nu}}^\dagger \quad (2.3)$$

Dans ce cas, l'état fondamental du noyau s'écrit :

$$|\Psi\rangle = \prod_{\nu>0} (u_\nu + v_\nu a_\nu^\dagger a_{\tilde{\nu}}^\dagger) |0\rangle \quad (2.4)$$

Cet état est dit état BCS.

Les paramètres variationnels u_ν, v_ν représentent les amplitudes de probabilités pour que la paire $(\nu, \tilde{\nu})$ soit inoccupée ou occupée. Ils sont déterminés en minimisant la valeur moyenne de l'hamiltonien auxiliaire :

$$\hat{H}' = \hat{H} - \lambda \hat{N} \quad (2.5)$$

où λ est un multiplicateur de Lagrange introduit pour assurer la conservation en moyenne du nombre de particules :

$$\langle \Psi | \hat{N} | \Psi \rangle = 2 \sum_{\nu>0} v_\nu^2 = N_0 \quad (2.6)$$

N_0 étant le nombre de particules du système.

On suppose que les paramètres variationnels sont réels et satisfont aux relations suivantes :

$$\begin{aligned} u_\nu^2 + v_\nu^2 &= 1 \\ u_\nu &= u_{\tilde{\nu}} \\ v_\nu &= v_{\tilde{\nu}} \end{aligned} \quad (2.7)$$

La valeur moyenne de \hat{H}' est donnée par :

$$E' = 2 \sum_{\nu>0} (\varepsilon_\nu - \lambda - \frac{G}{2} v_\nu^2) v_\nu^2 - G \sum_{\nu\mu>0} u_\nu v_\nu u_\mu v_\mu \quad (2.8)$$

Le principe variationnel prend alors la forme suivante :

$$\frac{\partial E'}{\partial u_\nu} = \frac{\partial E'}{\partial v_\nu} = 0 \quad (2.9)$$

Tenant compte de (2.7), on aboutit au système d'équations suivantes :

$$2(\varepsilon_\nu - \lambda - Gv_\nu^2)u_\nu v_\nu - \Delta(u_\nu^2 - v_\nu^2) = 0 \quad (2.10)$$

où la quantité Δ est définie par :

$$\Delta = G \sum_{\nu>0} u_\nu v_\nu \quad (2.11)$$

Pour établir les équations BCS, dites équations du gap, il suffit de résoudre le système (2.10) ce qui conduit aux équations :

$$\left. \begin{array}{l} u_\nu^2 \\ v_\nu^2 \end{array} \right\} = \frac{1}{2} \left[1 \pm \frac{\varepsilon_\nu - \lambda - Gv_\nu^2}{\sqrt{(\varepsilon_\nu - \lambda - Gv_\nu^2)^2 + \Delta^2}} \right] \quad (2.12)$$

Ici, le paramètre Δ mesure la demi largeur du gap dans l'espace des énergies $(\varepsilon_\nu - Gv_\nu^2)$ autour de λ .

L'énergie totale du système s'écrit donc comme :

$$E_{BCS} = 2 \sum_{\nu>0} (\varepsilon_\nu - Gv_\nu^2)v_\nu^2 - \Delta \sum_{\nu>0} u_\nu v_\nu \quad (2.13)$$

En remplaçant les u_ν et les v_ν par leurs expressions (2.12) dans (2.11), on obtient :

$$\frac{2}{G} = \sum_{\nu>0} \frac{1}{\sqrt{(\varepsilon_\nu - \lambda - Gv_\nu^2)^2 + \Delta^2}} \quad (2.14)$$

Cette dernière expression n'admet de solution non triviale que si la condition suivante est satisfaite :

$$\frac{G}{2} \sum_{\nu>0} \frac{1}{|\varepsilon_\nu - \lambda - Gv_\nu^2|} > 1 \quad (2.15)$$

Il est clair qu'il ne peut y avoir d'appariement ($\Delta = 0$) en dessous d'une certaine valeur critique G_{crit} qui est inversement proportionnelle à la densité des états à particules indépendantes autour du niveau de Fermi, dans ce cas l'énergie a pour expression :

$$E_{HF} = 2 \sum_{\nu \text{ occupé}} (\varepsilon_\nu - G) \quad (2.16)$$

L'énergie d'appariement est d'une nature collective, originaire de l'étalement des proba-

bilités d'occupation autour de la surface de Fermi. Son expression est donnée par :

$$E_{pairing} = 2 \sum_{\nu>0} (\varepsilon_\nu - Gv_\nu^2)v_\nu^2 - \frac{\Delta^2}{G} - 2 \sum_{\nu:occupé} (\varepsilon_\nu - G) \quad (2.17)$$

2.2.2 Concept de quasi-particule dans le cadre de la théorie BCS

Introduit par Bogoliubov et Valatin [16], de nouveaux opérateurs de création et d'annihilation, dits de quasi-particules, sont définis par la transformation canonique suivante :

$$\alpha_{\bar{\nu}}^\dagger = u_\nu a_{\bar{\nu}}^\dagger + v_\nu a_\nu \quad (2.18)$$

$$\alpha_\nu = u_\nu a_\nu - v_\nu a_{\bar{\nu}}^\dagger$$

Dans ce cas, une quasi-particule qui est créée par l'opérateur $\alpha_{\bar{\nu}}^\dagger$ représente une vraie particule avec une amplitude de probabilité u_ν et un vrai trou avec une amplitude de probabilité v_ν . L'état fondamental est alors défini comme étant le vide de quasi-particules :

$$\alpha_\nu |\Psi\rangle = 0, \forall \nu \quad (2.19)$$

Dans cette nouvelle représentation dite "représentation quasi-particule", l'hamiltonien réduit est donné par :

$$\hat{H}' = E_0 + H_{11} + H_2 + H_{résid} \quad (2.20)$$

avec :

$$E_0 = 2 \sum_{\nu>0} (\varepsilon_\nu - \lambda - \frac{G}{2}v_\nu^2)v_\nu^2 - \frac{\Delta^2}{G} \quad (2.21)$$

$$H_{11} = \sum_{\nu>0} E_\nu (\alpha_\nu^\dagger \alpha_\nu + \alpha_{\bar{\nu}}^\dagger \alpha_{\bar{\nu}})$$

$$H_2 = \sum_{\nu>0} H_2^\nu (\alpha_\nu^\dagger \alpha_{\bar{\nu}}^\dagger + \alpha_{\bar{\nu}} \alpha_\nu)$$

$$H_{résid} = H_{22} + H_3 + H_4$$

où les différents termes sont donnés par :

$$\begin{aligned}
E_\nu &= (\varepsilon_\nu - \lambda - Gv_\nu^2)(u_\nu^2 - v_\nu^2) + 2\Delta u_\nu v_\nu & (2.22) \\
H_2^\nu &= 2(\varepsilon_\nu - \lambda - Gv_\nu^2)u_\nu v_\nu - \Delta(u_\nu^2 - v_\nu^2) \\
H_{22} &= \sum_{\nu\mu>0} \{H_{22}^{\nu\mu} \alpha_\nu^\dagger \alpha_\nu^\dagger \alpha_\mu^\dagger \alpha_\mu^\dagger + \bar{H}_{22}^{\nu\mu} (\alpha_\nu^\dagger \alpha_\mu^\dagger \alpha_\mu^\dagger \alpha_\nu^\dagger + \alpha_\nu^\dagger \alpha_\mu^\dagger \alpha_\mu^\dagger \alpha_\nu^\dagger + 2\alpha_\nu^\dagger \alpha_\mu^\dagger \alpha_\mu^\dagger \alpha_\nu^\dagger)\} \\
H_3 &= \sum_{\nu\mu>0} H_3^{\nu\mu} \{\alpha_\nu^\dagger \alpha_\nu^\dagger (\alpha_\mu^\dagger \alpha_\mu^\dagger + \alpha_\mu^\dagger \alpha_\mu^\dagger) + (\alpha_\mu^\dagger \alpha_\mu^\dagger + \alpha_\mu^\dagger \alpha_\mu^\dagger) \alpha_\nu^\dagger \alpha_\nu^\dagger\} \\
H_4 &= \sum_{\nu\mu>0} H_4^{\nu\mu} (\alpha_\nu^\dagger \alpha_\nu^\dagger \alpha_\mu^\dagger \alpha_\mu^\dagger + \alpha_\mu^\dagger \alpha_\mu^\dagger \alpha_\nu^\dagger \alpha_\nu^\dagger)
\end{aligned}$$

avec les notations suivantes :

$$\begin{aligned}
H_{22}^{\nu\mu} &= -G(u_\nu^2 v_\mu^2 + v_\nu^2 u_\mu^2) & (2.23) \\
\bar{H}_{22}^{\nu\mu} &= -Gu_\nu v_\nu u_\mu v_\mu \\
H_3^{\nu\mu} &= G(u_\nu^2 - v_\nu^2)u_\mu v_\mu \\
H_4^{\nu\mu} &= \frac{G}{2}(u_\nu^2 v_\mu^2 + u_\mu^2 v_\nu^2)
\end{aligned}$$

Dans l'approximation BCS, le terme $H_{résid}$, qui représente une interaction entre quasi-particules est négligé. Par ailleurs, les paramètres u_ν et v_ν sont choisis de sorte que H_2 soit nul ce qui est exprimé par la relation (2.10). Le problème à N particules corrélées est ainsi transformé en un problème de quasi-particules indépendantes.

2.3 Théorie HFB

2.3.1 Généralisation du concept de quasi-particule

La théorie de Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB) consiste à prendre en compte de manière self-consistante les corrélations d'appariement. Pour ce faire, le concept de quasi-particule est utilisé. Dans la théorie HFB, la quasi-particule est définie comme étant une superposition d'états de particules et de trous [17], donnée par :

$$\alpha_\nu^\dagger = \sum_\mu U_{\mu\nu} a_\mu^\dagger + \sum_\mu V_{\mu\nu} a_\mu \quad (2.24)$$

Dans ce cas, la particule et le trou peuvent appartenir à deux niveaux différents contrairement au cas de la théorie BCS.

2.3.2 Formalisme de HFB

L'hamiltonien en seconde quantification s'écrit :

$$\hat{H} = \sum_{\nu\mu} \epsilon_{\nu\mu} a_{\nu}^{\dagger} a_{\mu} + \sum_{\nu\mu\beta\gamma} v_{\nu\mu\beta\gamma} a_{\nu}^{\dagger} a_{\mu}^{\dagger} a_{\gamma} a_{\beta} \quad (2.25)$$

où : $\epsilon_{\nu\mu}$: est l'élément de matrice de l'opérateur énergie cinétique \hat{T} . Il est donné par :

$$\epsilon_{\nu\mu} = \langle \nu | \hat{T} | \mu \rangle \quad (2.26)$$

$v_{\nu\mu\beta\gamma} = \langle \nu\mu | \hat{V} | \beta\gamma \rangle$: sont les éléments de matrice antisymétrisés d'une interaction effective générale que nous supposons dépendante de la densité.

Le problème aux valeurs propres est résolu par le principe variationnel avec comme fonction d'essai le vide de quasi-particules tout en gardant la simplicité de la description dans le cadre du champ moyen. Cet état, appelé état HFB, est construit par l'élimination de toutes les quasi-particules du vide de particules :

$$\begin{aligned} |\Psi_{HFB}\rangle &= \left(\prod_{\nu} \alpha_{\nu} \right) |0\rangle \\ \alpha_{\mu} |\Psi_{HFB}\rangle &= 0, \forall \mu \end{aligned} \quad (2.27)$$

Les opérateurs d'annihilation et de création de quasi-particules sont définis par la transformation canonique de Bogoliubov (2.24), qui s'écrit en représentation matricielle [17] :

$$\begin{pmatrix} \alpha \\ \alpha^{\dagger} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U^{\dagger} & V^{\dagger} \\ V^T & U^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ a^{\dagger} \end{pmatrix} = W^{\dagger} \begin{pmatrix} a \\ a^{\dagger} \end{pmatrix} \quad (2.28)$$

La matrice W étant unitaire, elle vérifie :

$$W.W^{\dagger} = W^{\dagger}.W = 1 \quad (2.29)$$

ce qui conduit aux propriétés suivantes [24] :

$$\begin{aligned}
U^\dagger U + V^\dagger V &= 1 \\
U^T V + V^T U &= 0 \\
UU^\dagger + V^* V^T &= 1 \\
UV^\dagger + V^* U^T &= 0
\end{aligned} \tag{2.30}$$

La transformation inverse de Bogoliubov se déduit facilement :

$$\begin{pmatrix} a \\ a^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U & V^* \\ V & U^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \alpha^\dagger \end{pmatrix} = W \begin{pmatrix} \alpha \\ \alpha^\dagger \end{pmatrix} \tag{2.31}$$

Pour la suite des calculs, il est commode de définir la matrice densité :

$$\rho = \langle \Psi_{HFB} | a^\dagger a | \Psi_{HFB} \rangle \tag{2.32}$$

ainsi que le tenseur d'appariement :

$$\kappa = \langle \Psi_{HFB} | aa | \Psi_{HFB} \rangle \tag{2.33}$$

En utilisant la transformation inverse de Bogoliubov donnée par (2.31), il vient que :

$$\begin{aligned}
\rho_{\mu\nu} &= \langle \Psi_{HFB} | a_\nu^\dagger a_\mu | \Psi_{HFB} \rangle \\
&= \sum_{\beta\gamma} \langle \Psi_{HFB} | (V_{\nu\beta} \alpha_\beta + U_{\nu\beta}^* \alpha_\beta^\dagger) (U_{\mu\gamma} \alpha_\gamma + V_{\mu\gamma}^* \alpha_\gamma^\dagger) | \Psi_{HFB} \rangle \\
&= \sum_{\beta\gamma} V_{\nu\beta} V_{\mu\gamma}^* \langle \Psi_{HFB} | \alpha_\beta \alpha_\gamma^\dagger | \Psi_{HFB} \rangle \\
&= \sum_{\beta} V_{\nu\beta} V_{\mu\beta}^* = \sum_{\beta} V_{\mu\beta}^* V_{\beta\nu}^T \\
&= (V^* \cdot V^T)_{\mu\nu}
\end{aligned} \tag{2.34}$$

De même, on a :

$$\begin{aligned}
\kappa_{\mu\nu} &= \langle \Psi_{HFB} | a_\nu a_\mu | \Psi_{HFB} \rangle \\
&= \sum_{\beta\gamma} \left\langle \Psi_{HFB} | (V_{\nu\beta}^* \alpha_\beta^\dagger + U_{\nu\beta} \alpha_\beta) (U_{\mu\gamma} \alpha_\gamma + V_{\mu\gamma}^* \alpha_\gamma^\dagger) | \Psi_{HFB} \right\rangle \\
&= \sum_{\beta\gamma} U_{\nu\beta} V_{\mu\gamma}^* \langle \Psi_{HFB} | \alpha_\beta \alpha_\gamma^\dagger | \Psi_{HFB} \rangle \\
&= \sum_{\beta} U_{\nu\beta} V_{\mu\beta}^* = \sum_{\beta} V_{\mu\beta}^* U_{\beta\nu}^T \\
&= (V^* \cdot U^T)_{\mu\nu} = -(U \cdot V^T)_{\nu\mu}
\end{aligned} \tag{2.35}$$

En utilisant les propriétés (2.30), on montre que la matrice densité est hermitique :

$$\rho^\dagger = (V^T)^\dagger (V^*)^\dagger = V^* \cdot V^T = \rho \tag{2.36}$$

et que le tenseur d'appariement est antisymétrique :

$$\kappa^T = (V^* \cdot U^T)^T = U \cdot V^\dagger = -\kappa \tag{2.37}$$

et qu'ils possèdent les propriétés suivantes :

$$\begin{aligned}
\rho - \rho^2 &= V^* V^T - V^* V^T V^* V^T = V^* V^T (1 - V^* V^T) = V^* V^T U U^\dagger \\
&= -V^* U^T V U^\dagger = -\kappa \cdot \kappa^*
\end{aligned} \tag{2.38}$$

$$\rho \cdot \kappa = V^* V^T V^* U^T = V^* V^T (-U V^\dagger) = V^* U^T V V^\dagger = \kappa \cdot \rho^* \tag{2.39}$$

On introduit également la matrice densité généralisée R associée à l'état $|\Psi_{HFB}\rangle$, définie par :

$$R = \begin{pmatrix} \langle \Psi_{HFB} | a^\dagger a | \Psi_{HFB} \rangle & \langle \Psi_{HFB} | a a | \Psi_{HFB} \rangle \\ \langle \Psi_{HFB} | a^\dagger a^\dagger | \Psi_{HFB} \rangle & \langle \Psi_{HFB} | a a^\dagger | \Psi_{HFB} \rangle \end{pmatrix} \tag{2.40}$$

Les éléments $\langle \Psi_{HFB} | a^\dagger a | \Psi_{HFB} \rangle$ et $\langle \Psi_{HFB} | a a | \Psi_{HFB} \rangle$ étant calculés plus haut, on se limitera au calcul de $\langle \Psi_{HFB} | a^\dagger a^\dagger | \Psi_{HFB} \rangle$ et $\langle \Psi_{HFB} | a a^\dagger | \Psi_{HFB} \rangle$. En utilisant le fait que :

$$\{a_\nu, a_\mu^\dagger\} = \delta_{\nu\mu} \implies a_\nu a_\mu^\dagger = \delta_{\nu\mu} - a_\mu^\dagger a_\nu \tag{2.41}$$

on montre que :

$$\begin{aligned}\langle \Psi_{HFB} | a_\nu a_\mu^\dagger | \Psi_{HFB} \rangle &= \delta_{\nu\mu} - \langle \Psi_{HFB} | a_\mu^\dagger a_\nu | \Psi_{HFB} \rangle \\ &= \delta_{\nu\mu} - \rho_{\nu\mu} \\ &= \delta_{\nu\mu} - (\rho^\dagger)_{\mu\nu}^T\end{aligned}\quad (2.42)$$

et que :

$$\langle \Psi_{HFB} | a_\nu a_\mu^\dagger | \Psi_{HFB} \rangle = \delta_{\mu\nu} - \rho^*_{\mu\nu} \quad (2.43)$$

Pour calculer $\langle \Psi_{HFB} | a^\dagger a^\dagger | \Psi_{HFB} \rangle$, on utilise le fait que :

$$\begin{aligned}\langle \Psi_{HFB} | a^\dagger a^\dagger | \Psi_{HFB} \rangle &= (\langle \Psi_{HFB} | a a | \Psi_{HFB} \rangle)^\dagger \\ &= (\kappa)^\dagger = (-\kappa^T)^\dagger\end{aligned}\quad (2.44)$$

Donc :

$$\langle \Psi_{HFB} | a^\dagger a^\dagger | \Psi_{HFB} \rangle = -\kappa^* \quad (2.45)$$

D'où finalement :

$$\begin{aligned}R &= \begin{pmatrix} \rho & \kappa \\ -\kappa^* & 1 - \rho^* \end{pmatrix} \\ &= W \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} W^+\end{aligned}\quad (2.46)$$

C'est une matrice hermitique, idempotente d'ordre $2n$.

Pour qu'un état $|\Psi\rangle$ complètement antisymétrique soit un vide de quasi-particules, il faut et il suffit que la matrice densité généralisée associée à cet état satisfait aux relations suivantes [25] :

$$\begin{aligned}R^2 &= R, \\ ARA &= 1 - R^*, \\ R^\dagger &= R\end{aligned}\quad (2.47)$$

$$\text{où } A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

La première relation s'écrit :

$$R.R = \begin{pmatrix} \rho & \kappa \\ -\kappa^* & 1 - \rho^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \rho & \kappa \\ -\kappa^* & 1 - \rho^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho^2 - \kappa\kappa^* & \rho\kappa + \kappa(1 - \rho^*) \\ -\kappa^*\rho - (1 - \rho^*)\kappa^* & -\kappa^*\kappa + (1 - \rho^*)^2 \end{pmatrix} \quad (2.48)$$

En utilisant les propriétés (2.36) à (2.39), on montre que :

$$\rho - \rho^2 = -\kappa\kappa^* \implies \rho^2 - \kappa\kappa^* = \rho \quad (2.49)$$

$$\rho\kappa + \kappa(1 - \rho^*) = \rho\kappa + \kappa - \kappa^*\rho = \kappa \quad (2.50)$$

$$\begin{aligned} -\kappa^*\rho - (1 - \rho^*)\kappa^* &= -\kappa^*\rho - \kappa^* + \rho^*\kappa^* \\ &= -\kappa^*\rho - \kappa^* + \kappa^*\rho = -\kappa^* \end{aligned} \quad (2.51)$$

$$\begin{aligned} -\kappa^*\kappa + (1 - \rho^*)^2 &= -\kappa^*\kappa + 1 - 2\rho^* + \rho^{*2} \\ &= 1 - \rho^* - \kappa^*\kappa - \rho^*(1 - \rho^*) \\ &= 1 - \rho^* - \kappa^*\kappa + \kappa^*\kappa \\ &= 1 - \rho^* \end{aligned} \quad (2.52)$$

Donc :

$$R^2 = \begin{pmatrix} \rho & \kappa \\ -\kappa^* & 1 - \rho^* \end{pmatrix} = R \quad (2.53)$$

Pour la seconde relation :

$$ARA = 1 - R^* \quad (2.54)$$

Calculons le membre de droite de l'équation :

$$\begin{aligned}
 ARA &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \rho & \kappa \\ -\kappa^* & 1 - \rho^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \kappa & \rho \\ 1 - \rho^* & -\kappa^* \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} 1 - \rho^* & -\kappa^* \\ \kappa & \rho \end{pmatrix}
 \end{aligned} \tag{2.55}$$

Calculons maintenant $1 - R^*$, on a :

$$\begin{aligned}
 R^* &= \begin{pmatrix} \rho^* & \kappa^* \\ -\kappa & 1 - \rho \end{pmatrix} \\
 \implies 1 - R^* &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \rho^* & \kappa^* \\ -\kappa & 1 - \rho \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 - \rho^* & -\kappa^* \\ \kappa & \rho \end{pmatrix}
 \end{aligned} \tag{2.56}$$

ce qui montre bien que les deux membres sont égaux.

Il reste à présent à vérifier que :

$$R^\dagger = R \tag{2.57}$$

Le calcul de R^\dagger donne :

$$R^\dagger = \begin{pmatrix} \rho^\dagger & \kappa \\ -\kappa^* & (1 - \rho^*)^\dagger \end{pmatrix} \tag{2.58}$$

On a :

$$\begin{aligned}
 (1 - \rho^*)^\dagger &= 1 - (\rho^*)^\dagger \\
 &= 1 - (\rho^\dagger)^* \\
 &= 1 - \rho^*
 \end{aligned} \tag{2.59}$$

Donc, il est clair que :

$$R^\dagger = \begin{pmatrix} \rho^\dagger & \kappa \\ -\kappa^* & 1 - \rho^* \end{pmatrix} = R \tag{2.60}$$

2.3.3 Valeurs et vecteurs propres

La propriété montrée précédemment ($R^2 = R$), impose aux valeurs propres d'être toutes égales à deux valeurs possibles 0 ou 1.

Soit X_ν et Y_ν les vecteurs propres associés à ces valeurs propres, alors :

$$RX_\nu = 0 \quad (2.61)$$

$$RY_\nu = Y_\nu \quad (2.62)$$

Les composantes des vecteurs X_ν et Y_ν se déduisent facilement.

Pour cela, il suffit de calculer :

$$\begin{aligned} RW &= W \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} W^+ W \\ &= W \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\ \Rightarrow R \begin{pmatrix} U & V^* \\ V & U^* \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 0 & V^* \\ 0 & U^* \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.63)$$

Cela signifie que :

$$\begin{aligned} R \begin{pmatrix} U \\ V \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\ R \begin{pmatrix} V^* \\ U^* \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} V^* \\ U^* \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.64)$$

D'où finalement :

$$\begin{aligned} X_\nu &= \begin{pmatrix} U \\ V \end{pmatrix} \\ Y_\nu &= \begin{pmatrix} V^* \\ U^* \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.65)$$

Ils vérifient donc l'équation :

$$X_\nu = AY_\nu^* \quad (2.66)$$

On remarque que les composantes des vecteurs propres X_ν , associés à la valeur propre 0 ne sont rien d'autres que les coefficients de l'opérateur d'annihilation de quasi-particules et les composantes des vecteurs propres Y_ν , associés à la valeur propre 1 sont les coefficients de l'opérateur création de quasi-particules. Cela implique que X_ν est un vecteur propre associé aux états excités et Y_ν est le vecteur propre associé à l'état fondamental.

2.3.4 Etat fondamental

Dans le cas d'un système constitué d'un nombre pair de nucléons, l'état fondamental n'est rien d'autre que le vide de quasi-particules $|\Psi_{HFB}\rangle$. Cet état peut être donné par le théorème de Thouless¹ :

$$|\Psi_{HFB}\rangle = \mathcal{N} \exp\left\{\frac{1}{2} \sum_{\nu\mu} M_{\nu\mu} a_{\nu}^{\dagger} a_{\mu}^{\dagger}\right\} |0\rangle \quad (2.67)$$

où \mathcal{N} : est une constante de normalisation calculée en utilisant le théorème d'Onishi [17] :

$$\mathcal{N} = \langle \Psi_{HFB} | \Psi_{HFB} \rangle^{\frac{1}{2}} = \sqrt{|\det U|} \quad (2.68)$$

M : est une matrice antisymétrique définie par :

$$M = (VU^{-1})^* = -\rho\kappa^{*-1} \quad (2.69)$$

En général, l'état $|\Psi_{HFB}\rangle$ n'est pas état propre de l'opérateur nombre de particules. Dans ce cas, on impose la condition suivante :

$$\langle \Psi_{HFB} | \hat{N} | \Psi_{HFB} \rangle = \langle \Psi_{HFB} | \sum_{\nu} a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu} | \Psi_{HFB} \rangle = Tr\rho = N_0 \quad (2.70)$$

N_0 étant le nombre de particules du système. Le nombre de particules est donc conservé en moyenne.

2.3.5 Energie HFB

L'énergie HFB est déterminée par le principe variationnel tout en tenant compte de la conservation en moyenne du nombre de particules. Ceci revient à minimiser la valeur moyenne de l'hamiltonien auxiliaire :

$$\hat{H}' = \hat{H} - \lambda(\hat{N} - N_0) \quad (2.71)$$

où λ est un multiplicateur de Lagrange, qui n'est rien d'autre que le potentiel chimique. Il représente l'augmentation de l'énergie $\langle \Psi_{HFB} | \hat{H}' | \Psi_{HFB} \rangle$ avec le changement du nombre

¹Voir annexe A.

de particules correspondant. Il est donné par :

$$\lambda = \frac{d \langle \hat{H}' \rangle}{dN} \quad (2.72)$$

Le calcul de la valeur moyenne de l'hamiltonien auxiliaire se fait en appliquant le théorème de Wick :

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{HFB} | \hat{H}' | \Psi_{HFB} \rangle &= \sum_{\nu\mu} (\epsilon_{\nu\mu} - \lambda) \langle \Psi_{HFB} | a_{\nu}^+ a_{\mu} | \Psi_{HFB} \rangle \\ &+ \frac{1}{4} \sum_{\nu\mu\beta\gamma} v_{\nu\mu\beta\gamma} \{ \langle \Psi_{HFB} | a_{\nu}^+ a_{\beta} | \Psi_{HFB} \rangle \langle \Psi_{HFB} | a_{\mu}^+ a_{\gamma} | \Psi_{HFB} \rangle \\ &- \langle \Psi_{HFB} | a_{\nu}^+ a_{\gamma} | \Psi_{HFB} \rangle \langle \Psi_{HFB} | a_{\mu}^+ a_{\beta} | \Psi_{HFB} \rangle \\ &+ \langle \Psi_{HFB} | a_{\nu}^+ a_{\mu}^+ | \Psi_{HFB} \rangle \langle \Psi_{HFB} | a_{\gamma} a_{\beta} | \Psi_{HFB} \rangle \} \end{aligned} \quad (2.73)$$

On a :

$$\langle \Psi_{HFB} | a_{\nu} a_{\mu} | \Psi_{HFB} \rangle = \kappa_{\mu\nu} \quad (2.74)$$

Ainsi :

$$\langle \Psi_{HFB} | a_{\nu}^+ a_{\mu}^+ | \Psi_{HFB} \rangle = \langle \Psi_{HFB} | a_{\nu} a_{\mu} | \Psi_{HFB} \rangle^+ = \kappa_{\nu\mu}^+ = (\kappa_{\nu\mu}^T)^* = \kappa_{\mu\nu}^* = -\kappa_{\nu\mu}^* \quad (2.75)$$

Il vient que :

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{HFB} | \hat{H}' | \Psi_{HFB} \rangle &= \sum_{\nu\mu} (\epsilon_{\nu\mu} - \lambda) \rho_{\mu\nu} + \frac{1}{4} \sum_{\nu\mu\beta\gamma} v_{\nu\mu\beta\gamma} \{ \rho_{\beta\nu} \rho_{\gamma\mu} - \rho_{\gamma\nu} \rho_{\beta\mu} + \kappa_{\mu\nu}^* \kappa_{\beta\gamma} \} \\ &= \sum_{\nu\mu} (\epsilon_{\nu\mu} - \lambda) \rho_{\mu\nu} + \frac{1}{4} \sum_{\nu\mu\beta\gamma} v_{\nu\mu\beta\gamma} \rho_{\beta\nu} \rho_{\gamma\mu} + \frac{1}{4} \sum_{\nu\mu\beta\gamma} v_{\mu\nu\beta\gamma} \rho_{\gamma\nu} \rho_{\beta\mu} + \frac{1}{4} \sum_{\nu\mu\beta\gamma} v_{\nu\mu\beta\gamma} \kappa_{\mu\nu}^* \kappa_{\beta\gamma} \\ &= \sum_{\nu\mu} (\epsilon_{\nu\mu} - \lambda) \rho_{\mu\nu} + \frac{1}{4} \sum_{\nu\mu\beta\gamma} v_{\nu\mu\beta\gamma} \rho_{\beta\nu} \rho_{\gamma\mu} + \frac{1}{4} \sum_{\nu\mu\beta\gamma} v_{\nu\mu\beta\gamma} \rho_{\gamma\mu} \rho_{\beta\nu} + \frac{1}{4} \sum_{\nu\mu\beta\gamma} v_{\nu\mu\beta\gamma} \kappa_{\mu\nu}^* \kappa_{\beta\gamma} \\ &= \sum_{\nu\mu} (\epsilon_{\nu\mu} - \lambda) \rho_{\mu\nu} + \frac{1}{4} \sum_{\nu\mu\beta\gamma} v_{\nu\mu\beta\gamma} \{ 2\rho_{\beta\nu} \rho_{\gamma\mu} + \kappa_{\mu\nu}^* \kappa_{\beta\gamma} \} \end{aligned} \quad (2.76)$$

qui s'écrit comme :

$$\langle \Psi_{HFB} | \hat{H}' | \Psi_{HFB} \rangle = \sum_{\nu\mu} (\epsilon_{\nu\mu} - \lambda) \rho_{\mu\nu} + \frac{1}{2} \sum_{\nu\beta} \left(\sum_{\gamma\mu} v_{\nu\mu\beta\gamma} \rho_{\gamma\mu} \right) \rho_{\beta\nu} + \frac{1}{4} \sum_{\nu\mu} \left(\sum_{\beta\gamma} v_{\nu\mu\beta\gamma} \kappa_{\beta\gamma} \right) \kappa_{\mu\nu}^* \quad (2.77)$$

ou encore

$$\langle \Psi_{HFB} | \hat{H}' | \Psi_{HFB} \rangle = \sum_{\nu\mu} \bar{\epsilon}_{\nu\mu} \rho_{\mu\nu} + \frac{1}{2} \sum_{\nu\beta} \Gamma_{\nu\beta} \rho_{\beta\nu} + \frac{1}{4} \sum_{\nu\mu} \Delta_{\nu\mu} \kappa_{\mu\nu}^* \quad (2.78)$$

en posant :

$$\begin{aligned} \bar{\epsilon}_{\nu\mu} &= (\epsilon_{\nu\mu} - \lambda) \\ \Gamma_{\nu\beta} &= \sum_{\gamma\mu} v_{\nu\mu\beta\gamma} \rho_{\gamma\mu} \\ \Delta_{\nu\mu} &= \frac{1}{2} \sum_{\beta\gamma} v_{\nu\mu\beta\gamma} \kappa_{\beta\gamma} \end{aligned} \quad (2.79)$$

où Γ est dit le champ self-consistant et Δ est le potentiel d'appariement.

Finalement [13, 26, 27] :

$$E'(\rho, \kappa) = \sum_{\nu\mu} \{ (\epsilon_{\nu\mu} - \lambda) \rho_{\mu\nu} + \frac{1}{2} \Gamma_{\nu\mu} \rho_{\mu\nu} + \frac{1}{2} \Delta_{\nu\mu} \kappa_{\mu\nu}^* \} \quad (2.80)$$

2.3.6 Equations de HFB

Il s'agit maintenant de minimiser l'énergie du système sous la contrainte (2.53). Ceci revient à introduire un second multiplicateur de Lagrange Λ et écrire la variation sous la forme suivante [17] :

$$\delta \{ E'(\rho, \kappa) - Tr(\Lambda(R^2 - R)) \} = 0 \quad (2.81)$$

Etant donné que l'énergie ne dépend que de ρ et de κ , la variation de l'énergie s'écrit :

$$\delta E'(\rho, \kappa) = \sum_{\nu\mu} \left\{ \frac{\partial E'}{\partial \rho_{\mu\nu}} \delta \rho_{\mu\nu} + \frac{\partial E'}{\partial \rho_{\mu\nu}^*} \delta \rho_{\mu\nu}^* + \frac{\partial E'}{\partial \kappa_{\mu\nu}} \delta \kappa_{\mu\nu} + \frac{\partial E'}{\partial \kappa_{\mu\nu}^*} \delta \kappa_{\mu\nu}^* \right\} \quad (2.82)$$

En introduisant l'hamiltonien de Hartree-Fock :

$$\begin{aligned} h'_{ij} &= \frac{\partial E'}{\partial \rho_{ji}} = h'_{ji}^* = \sum_{\nu\mu} \{ (\epsilon_{\nu\mu} - \lambda) \delta_{j\mu} \delta_{i\nu} + \frac{1}{2} (\Gamma_{\nu\mu} \delta_{j\mu} \delta_{i\nu} + \rho_{\mu\nu} \sum_{\beta\gamma} v_{\nu\mu\beta\gamma} \delta_{j\mu} \delta_{i\nu}) \} \\ &= t_{ij} - \lambda \delta_{ij} + \sum_{\beta\gamma} v_{ij\beta\gamma} \rho_{\gamma\beta} = h_{ij} - \lambda \end{aligned} \quad (2.83)$$

et le champ d'appariement :

$$\Delta_{ij} = \frac{\partial E'}{\partial \kappa_{ji}^*} = -\Delta_{ji} = \frac{1}{2} \sum_{\beta\gamma} v_{ij\beta\gamma} \kappa_{\beta\gamma} \quad (2.84)$$

et puisque E est réelle :

$$h'_{ij} = \frac{\partial E'}{\partial \rho_{ji}^*} \quad (2.85)$$

$$\Delta_{ij}^* = -\frac{\partial E'}{\partial \kappa_{ji}} \quad (2.86)$$

On obtient :

$$\begin{aligned} \delta E'(\rho, \kappa) &= \frac{1}{2} \sum_{ij} \{h'_{ij} \delta \rho_{ji} + h'_{ij}^* \delta \rho_{ji}^* - \Delta_{ij}^* \delta \kappa_{ji} - \Delta_{ij} \delta \kappa_{ji}^*\} \\ &= \frac{1}{2} \{Tr(h' \cdot \delta \rho) + Tr(h'^* \cdot \delta \rho^*) - Tr(\Delta^* \cdot \delta \kappa) - Tr(\Delta \cdot \delta \kappa^*)\} \end{aligned} \quad (2.87)$$

$$\delta E'(\rho, \kappa) = \frac{1}{2} Tr \left\{ \begin{pmatrix} h' & \Delta \\ -\Delta^* & -h'^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta \rho & \delta \kappa \\ -\delta \kappa^* & -\delta \rho^* \end{pmatrix} \right\} \quad (2.88)$$

On définit l'hamiltonien de quasi-particules par :

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} h' & \Delta \\ -\Delta^* & -h'^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} h - \lambda & \Delta \\ -\Delta^* & -(h - \lambda)^* \end{pmatrix} = \mathcal{H}^\dagger \quad (2.89)$$

On a alors :

$$\delta E'(\rho, \kappa) = \frac{1}{2} Tr(\mathcal{H} \cdot \delta R) \quad (2.90)$$

où

$$\delta R = \begin{pmatrix} \delta \rho & \delta \kappa \\ -\delta \kappa^* & -\delta \rho^* \end{pmatrix}$$

L'expression (2.81) devient :

$$\begin{aligned} \delta \{E'(\rho, \kappa) - Tr(\Lambda(R^2 - R))\} &= \frac{1}{2} Tr(\mathcal{H} \cdot \delta R) - Tr(\delta(\Lambda R \cdot (R - 1))) \\ &= \frac{1}{2} Tr(\mathcal{H} \cdot \delta R - 2\Lambda \delta R \cdot (R - 1) - 2\Lambda R \delta R) \\ &= \frac{1}{2} Tr(\mathcal{H} \cdot \delta R - 2\Lambda \delta R \cdot R + 2\Lambda \delta R - 2\Lambda R \delta R) \end{aligned} \quad (2.91)$$

En utilisant la propriété de la trace :

$$\text{Tr}(ABC) = \text{Tr}(CAB) = \text{Tr}(BCA) \quad (2.92)$$

Il vient que :

$$\delta\{E'(\rho, \kappa) - \text{Tr}(\Lambda(R^2 - R))\} = \frac{1}{2}\text{Tr}[(\mathcal{H} - 2\Lambda R - 2R\Lambda + 2\Lambda)\delta R] = 0 \quad (2.93)$$

Etant donné que δR est une variation arbitraire, il suffit donc que :

$$\mathcal{H} - 2\Lambda R - 2R\Lambda + 2\Lambda = 0 \quad (2.94)$$

Le multiplicateur de Lagrange peut être éliminé comme suit :

Multiplications par R à droite l'équation (2.94) :

$$\mathcal{H}R - 2R\Lambda R = 0 \quad (2.95)$$

Ensuite multiplions par R à gauche l'équation (2.94) :

$$R\mathcal{H} - 2R\Lambda R = 0 \quad (2.96)$$

par soustraction des deux équations précédentes, on obtient :

$$\mathcal{H}R - R\mathcal{H} = 0 \quad (2.97)$$

D'où l'équation de Hartree-Fock-Bogoliubov :

$$[\mathcal{H}, R] = 0 \quad (2.98)$$

L'équation (2.98) est résolue en diagonalisant la matrice \mathcal{H} et en construisant R à partir des vecteurs propres de \mathcal{H} ce qui revient à résoudre le système :

$$\begin{pmatrix} h - \lambda & \Delta \\ -\Delta^* & -(h - \lambda)^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U \\ V \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} U \\ V \end{pmatrix} \quad (2.99)$$

Dans le cas où il n'y a pas d'appariement ($\Delta = 0$), l'équation de Hartree-Fock-

Bogoliubov (2.99) se réduit à celle de Hartree-Fock. Dans ce sens, la théorie HF correspond au cas particulier (trivial) sans appariement d'une théorie HFB plus générale.

2.3.7 Résolution des équations de HFB

Le système d'équations (2.99) n'est pas réellement un système d'équations aux valeurs propres car le champ h et le potentiel d'appariement Δ sont self-consistants puisqu'ils dépendent eux même des U et V par l'intermédiaire de la matrices densité ρ et du tenseur d'appariement κ . Ils constituent donc un système non linéaire dont la résolution se fait par la méthode itérative en suivant ces différentes étapes :

1. Un choix de valeurs initiales de la matrice densité ρ et du tenseur d'appariement κ , ce choix doit dépendre des symétries de h et Δ .
2. Le champ h et le potentiel d'appariement Δ sont calculés à partir des relations (2.83) et (2.84).
3. L'hamiltonien de quasi-particules \mathcal{H} est ainsi construit et ses vecteurs propres X_ν et Y_ν sont déterminés en résolvant le problème aux valeurs propres donné par (2.99).
4. La matrice densité généralisée est construite à partir de la relation (2.46) ou en utilisant la relation suivante :

$$R = \sum_{\nu} Y_{\nu} Y_{\nu}^{\dagger} \quad (2.100)$$

Résulte du fait que $RY = Y$, comme Y est normalisé $Y^{\dagger}Y = 1 \implies Y^{\dagger} = Y^{-1}$ d'où $R = YY^{\dagger}$.

5. La construction de la matrice densité généralisée R à partir des vecteurs propres Y_{ν} relatifs aux valeurs propres négatives est analogue au remplissage des orbitales de plus basses énergies dans la théorie de Hartree-Fock, ce qui conduit à l'état fondamental du système. Cependant, dans certains cas, il pourrait être nécessaire d'introduire un champ externe qui permet d'inclure dans R un ou plusieurs vecteurs propres relatifs à des vecteurs propres positifs. Par contre, ce qui n'est pas permis, c'est l'inclusion des deux vecteurs propres X_{ν} et Y_{ν} correspondant à la paire de valeurs propres $\pm E_{\nu}$ car cela fait que les opérateurs de quasi-particules α n'obéiraient plus aux relations d'anticommutation des fermions.
6. La matrice densité ρ et le tenseur d'appariement κ sont alors évalués à l'aide des relations (2.34) et (2.35).

Le nombre N_0 donné par l'expression (2.70) n'est pas, en général, égal au nombre de particules du système, dans ce cas là, on fait le changement suivant du potentiel chimique :

$$\lambda \rightarrow \lambda + \delta\lambda \quad (2.101)$$

Ensuite, on retourne à l'étape $n^\circ 3$ et on continue à chercher le potentiel chimique pour lequel la valeur de N_0 est égale au nombre de particules du système, ensuite on passe à l'étape $n^\circ 2$.

Le processus itératif est répété jusqu'à l'obtention d'une même matrice densité et le même tenseur d'appariement au cours de deux itérations successives à une précision choisie.

2.4 Equations HFB dans la représentation espace des coordonnées

Dans le but de résoudre les équations HFB dans la représentation espace des coordonnées [28], elles doivent être réécrites dans cette représentation. Pour ce faire, il suffit d'introduire la relation de fermeture $\int d\vec{r}' \sum_{\sigma'} |\vec{r}'\sigma'\rangle \langle \vec{r}'\sigma'|$ et de multiplier à gauche par le bra $\langle r\sigma|$. On aboutie ainsi à l'équation [13, 29–31] :

$$\begin{aligned} & \int d\vec{r}' \sum_{\sigma'} \begin{pmatrix} h(\vec{r}, \vec{\sigma}; \vec{r}', \vec{\sigma}') & \Delta(\vec{r}, \vec{\sigma}; \vec{r}', \vec{\sigma}') \\ -\Delta^*(\vec{r}, \vec{\sigma}; \vec{r}', \vec{\sigma}') & -h^*(\vec{r}, \vec{\sigma}; \vec{r}', \vec{\sigma}') \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_\nu(\vec{r}', \vec{\sigma}') \\ V_\nu(\vec{r}', \vec{\sigma}') \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} E_\nu + \lambda & 0 \\ 0 & E_\nu - \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_\nu(\vec{r}, \vec{\sigma}) \\ V_\nu(\vec{r}, \vec{\sigma}) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.102)$$

où les $U_\nu(\vec{r}, \vec{\sigma})$ et $V_\nu(\vec{r}, \vec{\sigma})$ sont les fonctions d'onde de quasi-particules. La définition de ces fonctions d'onde se fait à travers la matrice densité et le tenseur d'appariement donnés par les équations (2.32) et (2.33) écrites dans l'espace des coordonnées :

$$\begin{aligned} \rho(\vec{r}, \vec{\sigma}; \vec{r}', \vec{\sigma}') &= \sum_{ij} \rho_{ij} \varphi_i(\vec{r}, \vec{\sigma}) \varphi_j^*(\vec{r}', \vec{\sigma}') \\ \kappa(\vec{r}, \vec{\sigma}; \vec{r}', \vec{\sigma}') &= \sum_{ij} \kappa_{ij} \varphi_i(\vec{r}, \vec{\sigma}) \varphi_j(\vec{r}', \vec{\sigma}') \end{aligned} \quad (2.103)$$

où les $\varphi_i(\vec{r}, \vec{\sigma})$: sont les fonctions d'onde individuelles.

Les matrices ci-dessus peuvent être exprimées en fonction des fonctions d'onde de quasi-particules $U_\nu(\vec{r}, \vec{\sigma})$ et $V_\nu(\vec{r}, \vec{\sigma})$:

$$\begin{aligned}\rho(\vec{r}, \vec{\sigma}; \vec{r}', \vec{\sigma}') &= \sum_{\nu} V_{\nu}^*(\vec{r}, \vec{\sigma}) V_{\nu}(\vec{r}', \vec{\sigma}') \\ \kappa(\vec{r}, \vec{\sigma}; \vec{r}', \vec{\sigma}') &= \sum_{\nu} V_{\nu}^*(\vec{r}, \vec{\sigma}) U_{\nu}(\vec{r}', \vec{\sigma}')\end{aligned}\tag{2.104}$$

avec :

$$\begin{aligned}U_{\nu}(\vec{r}, \vec{\sigma}) &= \sum_i U_{i\nu} \varphi_i(\vec{r}, \vec{\sigma}) \\ V_{\nu}(\vec{r}, \vec{\sigma}) &= \sum_i V_{i\nu} \varphi_i^*(\vec{r}, \vec{\sigma})\end{aligned}\tag{2.105}$$

Il est important de rappeler que les U et V dépendent des énergies de quasi-particules. Dans la présente notation, cette dépendance apparaît implicitement à travers l'indice ν qui porte sur tous les états d'énergie E_ν positive.

Chapitre 3

Théorie HFB avec interaction de Skyrme

3.1 Interaction nucléon-nucléon

3.1.1 Interaction nucléon-nucléon libres

Généralement, la forme du potentiel nucléon-nucléon dépend de plusieurs observables physiques qui caractérisent deux nucléons en interaction, à savoir : la position, l'impulsion, le spin et l'isospin [12, 17, 18, 32] :

$$v = v(\vec{r}, \vec{r}'; \vec{p}, \vec{p}'; \vec{\sigma}, \vec{\sigma}'; \vec{\tau}, \vec{\tau}') \quad (3.1)$$

Par nécessité de reproduire certains effets physiques comme le principe de Pauli et les différentes symétries du système, on est amené à lui donner une forme particulière car elle ne possède pas de forme analytique bien définie. En plus de l'hermité, le potentiel nucléon-nucléon possède les symétries suivantes :

Invariance par échange de coordonnées

Etant donné que les nucléons sont des fermions, leur fonction d'onde est antisymétrique :

$$v = v(\vec{r}, \vec{r}'; \vec{p}, \vec{p}'; \vec{\sigma}, \vec{\sigma}'; \vec{\tau}, \vec{\tau}') = v(\vec{r}', \vec{r}; \vec{p}', \vec{p}; \vec{\sigma}', \vec{\sigma}; \vec{\tau}', \vec{\tau}) \quad (3.2)$$

Dans la représentation position, spin et isospin, elle s'écrit :

$$\langle \vec{r}_1 \sigma_1 \tau_1, \vec{r}_2 \sigma_2 \tau_2 | 1, 2 \rangle = \varphi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \chi(\sigma_1, \sigma_2) \xi(\tau_1, \tau_2) \quad (3.3)$$

Il en résulte, quatre combinaisons possibles compatibles qui vérifient bien le principe de Pauli (chacune d'elles correspond 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

Elle résulte du fait que l'interaction ne dépend que de la position d'un nucléon par rapport à l'autre, cela va permettre de remplacer les positions \vec{r} et \vec{r}' par la position relative ($\vec{r} - \vec{r}'$), que l'on note \vec{r} . Il vient que :

$$v = v(\vec{r}; \vec{p}, \vec{p}'; \vec{\sigma}, \vec{\sigma}'; \vec{\tau}, \vec{\tau}') \quad (3.4)$$

Invariance galiléenne

Lors d'une transformation dans un autre repère galiléen, le potentiel d'interaction reste inchangé ce qui fait que l'interaction ne dépend que de la quantité de mouvement relative ($\vec{p} - \vec{p}'$), que l'on note \vec{p} :

$$v = v(\vec{r}; \vec{p}; \vec{\sigma}, \vec{\sigma}'; \vec{\tau}, \vec{\tau}') \quad (3.5)$$

Invariance par réflexion (parité)

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

$$v(\vec{r}; \vec{p}; \vec{\sigma}, \vec{\sigma}'; \vec{\tau}, \vec{\tau}') = v(-\vec{r}; -\vec{p}; \vec{\sigma}, \vec{\sigma}'; \vec{\tau}, \vec{\tau}') \quad (3.6)$$

Cette propriété se vérifie en considérant uniquement des termes quadratiques de \vec{r} et \vec{p} .

Invariance par renversement du sens du temps

Le renversement du temps \hat{T} correspond à l'inversion de la coordonnée temporelle $\{t \rightarrow -t\}$ [33]. Cependant, on peut montrer que \hat{T} est un opérateur anti-linéaire qui s'écrit sous la forme :

$$\hat{T}\Phi(\vec{r}, t) = \Phi^*(\vec{r}, -t) \quad (3.7)$$

Il a pour effet de laisser l'équation de Schrödinger invariante. Il n'a donc pas de vecteurs propres et n'est donc pas une observable.

Le renversement du temps laisse inchangée la forme du potentiel nucléaire :

$$v(\vec{r}; \vec{p}; \vec{\sigma}, \vec{\sigma}'; \vec{\tau}, \vec{\tau}') = v(\vec{r}; -\vec{p}; -\vec{\sigma}, -\vec{\sigma}'; \vec{\tau}, \vec{\tau}') \quad (3.8)$$

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

$$\vec{\sigma} \cdot \vec{\sigma}'; (\vec{r} \cdot \vec{\sigma})(\vec{r} \cdot \vec{\sigma}') \quad \text{ou} \quad \vec{L} \cdot \vec{S} = -i\hbar(\vec{r} \wedge \vec{p})(\vec{\sigma} + \vec{\sigma}') \quad (3.9)$$

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

Invariance par rotation dans le système de coordonnées d'espace

Cette propriété 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. Partant des vecteurs \vec{r} et \vec{p} , on a la possibilité de construire trois scalaires indépendants, à savoir, \vec{r}^2 , \vec{p}^2 et $\vec{r} \cdot \vec{p} + \vec{p} \cdot \vec{r}$, ce dernier ne peut apparaître que sous forme quadratique dû à l'invariance par renversement du sens du temps.

L'invariance d'isospin

Proposée par Heisenberg, cette propriété précédant la découverte des quarks, considère que le proton et le neutron sont deux états de la même particule ce qui implique que le neutron et le proton sont des particules identiques [34]. Le potentiel d'interaction

peut s'écrire alors sous la forme :

$$v = v(\vec{r}, \vec{p}, \vec{\sigma}, \vec{\sigma}') + v(\vec{r}, \vec{p}, \vec{\sigma}, \vec{\sigma}') \vec{\tau} \vec{\tau}' \quad (3.10)$$

3.1.2 Construction d'une interaction nucléon-nucléon

Interaction effective

Le problème auquel se heurte toute tentative de passage d'une situation où l'on a un système nucléon-nucléon libres vers une situation nucléon-nucléon dans le noyau [35] réside dans le fait que l'interaction de deux nucléons libres (système isolé) est totalement différente de l'interaction de ces deux mêmes nucléons en présence d'autres nucléons avec lesquels ils peuvent aussi interagir. De plus l'interaction nucléon-nucléon libre comporte un cœur dur extrêmement répulsif dont on est incapable de traiter dans le cadre du problème à N corps. Afin d'éliminer ce problème, des interactions effectives ont été proposées [12, 17, 20, 32].

Interaction effective microscopique

Afin de résoudre le problème lié à la forte interaction qui existe dans un système de fermions, plusieurs techniques ont vues le jour citons par exemple la méthode de Brückner-Bethe-Goldstone, cette dernière consiste à réintégrer la partie répulsive à courte portée par la matrice G de Brückner qui représente la réaction lors de la diffusion de deux nucléons à l'intérieur du noyau. Sa définition est analogue à celle de la matrice T de réaction qui décrit la diffusion N-N libre fournissant ainsi l'interaction effective qui règne entre nucléons indépendants.

Dans le cadre de cette méthode, la minimisation de l'énergie du noyau conduit aux équations de Hartree-Fock. Pour cela, elle est dite : méthode de Brückner-Hartree-Fock.

Malgré les progrès apportés par la suite, cette méthode s'avère lourde à manipuler et ne fournit pas les résultats souhaités.

Interaction effective Phénoménologique

Actuellement, il existe un grand nombre d'interactions phénoménologiques. Chacune d'elles a été développée pour un problème spécifique répondant à la nécessité de résoudre le problème dû à la complexité des interactions effectives microscopiques. L'avantage de

ces méthodes réside dans le fait de contenir un certain nombre de paramètres ajustables pour reproduire les données expérimentales.

Il existe deux types d'interactions effectives phénoménologiques. La première est de portée nulle comme celle de Skyrme. La seconde est de portée finie comme celle décrite par l'interaction de Gogny [36]. Bien que cette dernière autorise un traitement auto-cohérent des propriétés d'appariement et permet d'avoir une meilleure simulation des longues et moyennes portées de l'interaction N-N réaliste, elle demeure lourde à manipuler. Ceci a fait que la majorité des études récentes se basent sur une interaction du type Skyrme qui possède une forme analytique simple.

3.2 Interaction de Skyrme

Il s'agit d'une interaction effective phénoménologique non locale et de portée nulle. Sa forme particulière la rend facile à utiliser et simplifie largement les calculs les plus compliqués. Dans sa première formulation, l'interaction proposée par Skyrme en 1959 contenait deux termes : un terme correspondant à une interaction à deux corps et un second terme correspondant à une interaction à trois corps [12, 17, 18, 32]

$$v_{ijk}^{(3)} = t_3 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \delta(\vec{r}_2 - \vec{r}_3) \quad (3.11)$$

C'est par la suite que Vautherin et Brink [37] ont montré, lors des premières applications aux noyaux sphériques, qu'il y a équivalence entre le terme qui représente l'interaction à trois corps et celui d'une interaction de type δ à deux corps qui dépend de la densité, sous condition que la symétrie par renversement du sens du temps ne soit pas brisée :

$$v_{ijk}^{(3)} \Leftrightarrow v_{ij}^{(2)} = \frac{1}{6} t_3 (1 + x_3 \hat{P}_\sigma) [\rho(\vec{R})]^\alpha \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \quad (3.12)$$

où :

$$\vec{R} = \frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{2} \quad (3.13)$$

et

$$\hat{P}_\sigma = \frac{1}{2} (1 + \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2) \quad (3.14)$$

est l'opérateur d'échange de spin. t_3 et x_3 sont des coefficients.

Sous sa forme standard, l'interaction de Skyrme s'écrit :

$$\begin{aligned}
v_{12}^{(2)} &= t_0(1 + x_0\hat{P}_\sigma)\delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \\
&+ \frac{1}{2}t_1(1 + x_1\hat{P}_\sigma)\{\overleftarrow{K}_{12}^2\delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) + \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)\overrightarrow{K}_{12}^2\} \\
&+ t_2(1 + x_2\hat{P}_\sigma)\overleftarrow{K}_{12}\delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)\overrightarrow{K}_{12} \\
&+ \frac{1}{6}t_3(1 + x_3\hat{P}_\sigma)[\rho(\vec{R})]^\alpha\delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \\
&+ iW_0(\vec{\sigma}_1 + \vec{\sigma}_2)\cdot\{\overleftarrow{K}_{12} \times \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)\overrightarrow{K}_{12}\}
\end{aligned} \tag{3.15}$$

\overrightarrow{K}_{12} : représente le moment relatif des particules 1 et 2 agissant à droite :

$$\overrightarrow{K}_{12} = \frac{1}{2i}(\overrightarrow{\nabla}_1 - \overrightarrow{\nabla}_2) \tag{3.16}$$

Quand à \overleftarrow{K}_{12} , il agit à gauche :

$$\overleftarrow{K}_{12} = -\frac{1}{2i}(\overleftarrow{\nabla}_1 - \overleftarrow{\nabla}_2) \tag{3.17}$$

On en déduit alors les relations suivantes :

$$\overleftarrow{K}_{12}^2 + \overrightarrow{K}_{12}^2 = \left(-\frac{1}{4}\right)(\overleftarrow{\nabla}_1^2 + \overrightarrow{\nabla}_1^2 + \overleftarrow{\nabla}_2^2 + \overrightarrow{\nabla}_2^2 - 2\overleftarrow{\nabla}_1\overleftarrow{\nabla}_2 - 2\overrightarrow{\nabla}_1\overrightarrow{\nabla}_2) \tag{3.18}$$

$$\overleftarrow{K}_{12}\overrightarrow{K}_{12} = \left(-\frac{1}{4}\right)(\overleftarrow{\nabla}_1\overrightarrow{\nabla}_1 + \overleftarrow{\nabla}_2\overrightarrow{\nabla}_2 - \overleftarrow{\nabla}_1\overrightarrow{\nabla}_2 - \overleftarrow{\nabla}_2\overrightarrow{\nabla}_1) \tag{3.19}$$

Dans l'expression (3.15) de l'interaction de Skyrme, le premier terme est dit central et représente la partie qui caractérise la portée nulle de l'interaction. Le second et le troisième terme sont dits non locaux car ils dépendent d'un terme de vitesse. Le quatrième terme est une correction apportée au terme général. Il contient le terme de la densité de nucléons paramétré par α qui module la dépendance en densité de l'interaction. Ce terme représente l'influence du milieu nucléaire sur l'interaction entre les nucléons. Enfin, le dernier terme correspond à l'interaction spin-orbite.

En fait, le choix de la forme (3.15) vient de l'expression de l'interaction nucléon-nucléon. En effet, la définition des différents paramètres associés à la forme générale du potentiel à deux corps n'est pas unique. Ce choix dépend du type d'effets et de forces qu'on veut mettre en évidence, à savoir : les forces d'échanges entre les deux nucléons ainsi que les nombres quantiques propres à chaque nucléon, (dans ce cas, cette formulation est

liée aux paramètres de la diffusion nucléon-nucléon libre). La forme donnée ci-dessus est toutefois la plus commode pour faire des calculs.

3.3 Equations HFB avec interaction de Skyrme

3.3.1 Fonctionnelle de la densité d'énergie de Skyrme

Le choix d'une interaction du type Skyrme conduit à une forme particulière de l'énergie de HFB. Cette dernière s'écrit comme une fonctionnelle de la densité d'énergie local [13, 29] :

$$E[\rho, \tilde{\rho}] = \int d\vec{r} \mathcal{H}(\vec{r}) \quad (3.20)$$

avec [24] :

$$\mathcal{H}(\vec{r}) = H(\vec{r}) + \tilde{H}(\vec{r}) \quad (3.21)$$

$H(\vec{r})$: est la densité d'énergie du champ moyen qui a pour expression :

$$\begin{aligned} H(\vec{r}) = & \frac{\hbar^2}{2m}t + \frac{1}{2}t_0[(1 + \frac{1}{2}x_0)\rho^2 - (x_0 + \frac{1}{2})\sum_q \rho_q^2] \\ & + \frac{1}{2}t_1[(\frac{1}{2}x_1 + 1)\rho(\tau - \frac{3}{4}\Delta\rho) - (x_1 + \frac{1}{2})\sum_q \rho_q(\tau_q - \frac{3}{4}\Delta\rho_q)] \\ & + \frac{1}{2}t_2[(\frac{1}{2}x_2 + 1)(\tau - \frac{1}{4}\Delta\rho) - (x_2 + \frac{1}{2})\sum_q \rho_q(\tau_q + \frac{1}{4}\Delta\rho_q)] \\ & + \frac{1}{12}t_3\rho^\alpha[(\frac{1}{2}x_3 + 1)\rho^2 - (x_3 + \frac{1}{2})\sum_q \rho_q^2] \\ & - \frac{1}{8}(t_1x_1 + t_2x_2)\sum_{ij} \vec{J}_{ij}^2 + \frac{1}{8}(t_1 - t_2)\sum_{q,ij} \vec{J}_{q,ij}^2 \\ & - \frac{1}{2}W_0\sum_{ijk} \varepsilon_{ijk}[\rho\nabla_k \vec{J}_{ij} + \sum_q \rho_q\nabla_k \vec{J}_{q,ij}] \end{aligned} \quad (3.22)$$

et $\tilde{H}(\vec{r})$: est la densité d'énergie d'appariement qui s'écrit comme :

$$\tilde{H}(\vec{r}) = \frac{1}{2}V_0[1 - \eta(\frac{\rho}{\rho_0})^\gamma]\sum_q \tilde{\rho}_q^2 \quad (3.23)$$

L'indice q de sommation fait référence au type de particule qu'elle soit proton ou neutron.

Les deux quantités $H(\vec{r})$ et $\tilde{H}(\vec{r})$ dépendent de la densité locale $\rho(\vec{r})$:

$$\rho(\vec{r}) = \rho(\vec{r}, \vec{r}) = \sum_{i\sigma} |\Phi_i(\vec{r}, \sigma)|^2 \quad (3.24)$$

de la densité d'appariement locale $\tilde{\rho}(\vec{r})$:

$$\tilde{\rho}(\vec{r}) = \tilde{\rho}(\vec{r}, \vec{r}), \quad (3.25)$$

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

$$\tau(\vec{r}) = \nabla_r \nabla_{r'} \rho(\vec{r}, \vec{r}')|_{r'=r}, \quad (3.26)$$

et enfin la densité de courant de spin $\vec{J}_{ij}(\vec{r})$:

$$\vec{J}_{ij}(\vec{r}) = \frac{1}{2i} (\nabla_i - \nabla_{i'}) \rho_j(\vec{r}, \vec{r}')|_{r'=r} \quad (3.27)$$

où les matrices densité spinorielle à un corps sont définies par [27, 29, 38] :

$$\rho(\vec{r}\sigma, \vec{r}'\sigma') = \frac{1}{2} \rho(\vec{r}, \vec{r}') \delta_{\sigma,\sigma'} + \frac{1}{2} \sum_i \langle \sigma | \sigma_i | \sigma' \rangle \rho_i(\vec{r}, \vec{r}') \quad (3.28)$$

$$\tilde{\rho}(\vec{r}\sigma, \vec{r}'\sigma') = \frac{1}{2} \tilde{\rho}(\vec{r}, \vec{r}') \delta_{\sigma,\sigma'} + \frac{1}{2} \sum_i \langle \sigma | \sigma_i | \sigma' \rangle \tilde{\rho}_i(\vec{r}, \vec{r}') \quad (3.29)$$

$\tilde{\rho}(\vec{r}\sigma, \vec{r}'\sigma')$ étant définie par :

$$\tilde{\rho}(\vec{r}\sigma, \vec{r}'\sigma') = (-2\sigma') \kappa(\vec{r}\sigma, \vec{r}' - \sigma') \quad (3.30)$$

3.3.2 Equations HFB avec interaction de Skyrme

Dans l'espace des coordonnées, le champ local h_q est calculé à partir de l'expression suivante [13, 29] :

$$h_q(\vec{r}, \sigma, \sigma') = -\nabla M_q \nabla + U_q + \frac{1}{2i} \sum_{ij} (\nabla_i \sigma_j B_{q,ij} + B_{q,ij} \nabla_i \sigma_j t) \quad (3.31)$$

et pour Δ :

$$\Delta(\vec{r}, \sigma, \sigma') = V_0 [1 - V_1 (\frac{\rho}{\rho_0})^\gamma] \tilde{\rho}_\tau \quad (3.32)$$

avec :

$$M_q = \frac{\hbar}{2m} + \frac{1}{4}t_1[(1 + \frac{1}{2}x_1)\rho - (x_1 + \frac{1}{2})\rho_q^2] + \frac{1}{4}t_2[(1 + \frac{1}{2}x_2)\rho - (x_2 + \frac{1}{2})\rho_q^2] \quad (3.33)$$

$$B_{q,ij} = -\frac{1}{4}(t_1x_1 + t_2x_2)J_{ij} + \frac{1}{4}(t_1 - t_2)J_{q,ij} + \frac{1}{2}W_0 \sum_{ijk} \varepsilon_{ijk} \nabla_k(\rho + \rho_k) \quad (3.34)$$

$$\begin{aligned} U_q &= t_0[(1 + \frac{1}{2}x_0)\rho - (x_0 + \frac{1}{2})\rho_q] \\ &+ \frac{1}{4}t_1[(1 + \frac{1}{2}x_1)(\tau - \frac{3}{2}\Delta\rho) - (x_1 + \frac{1}{2})(\tau_q - \frac{3}{2}\Delta\rho_q)] \\ &+ \frac{1}{4}t_2[(1 + \frac{1}{2}x_2)(\tau - \frac{1}{2}\Delta\rho) - (x_2 + \frac{1}{2})(\tau_q - \frac{1}{2}\Delta\rho_q)] \\ &+ \frac{1}{12}t_3\rho^\alpha[(1 + \frac{1}{2}x_3)(2 + \alpha)\rho - (x_3 + \frac{1}{2})(2\rho_q + \frac{\alpha}{\rho} \sum_{q'} \rho_{q'}^2)] \\ &- \frac{\gamma V_0 V_1}{2\rho} (\frac{\rho}{\rho_0}) \sum_q \tilde{\rho}_q^2 - \frac{1}{2}W_0 \sum_{ijk} \varepsilon_{ijk} \nabla_k [\vec{J}_{ij} + \vec{J}_{q,ij}] \end{aligned} \quad (3.35)$$

Dans le cas d'un spectre d'énergies discret. Pour $E_k > 0$ et $\lambda < 0$, les matrices densité s'écrivent [13, 38] :

$$\rho(\vec{r}\sigma, \vec{r}'\sigma') = \sum_k V_k(\vec{r}\sigma) V_k^*(\vec{r}'\sigma') \quad (3.36)$$

$$\tilde{\rho}(\vec{r}\sigma, \vec{r}'\sigma') = - \sum_k V_k(\vec{r}\sigma) U_k^*(\vec{r}'\sigma') \quad (3.37)$$

La relation d'orthogonalité est donnée par :

$$\int d\vec{r} \sum_\sigma [U_k^*(\vec{r}\sigma) U_{k'}(\vec{r}\sigma) + V_k^*(\vec{r}\sigma) V_{k'}(\vec{r}\sigma)] = \delta_{k,k'} \quad (3.38)$$

Le nombre de particules total du système s'écrit :

$$N = \int d\vec{r} \rho(\vec{r}) = \sum_k N_k \quad (3.39)$$

avec :

$$N_k = \int d\vec{r} \sum_\sigma |V_k(\vec{r}\sigma)|^2 \quad (3.40)$$

3.3.3 Solution des équations HFB

Les solutions des équations HFB sont obtenues en développant les fonctions de quasi-particules sur un ensemble complet d'une base de fonctions d'onde qui conserve la symétrie axiale et la parité. A cet effet, on considère comme base celle de l'oscillateur harmonique. Dans ce cas, les constantes standards sont données par [13, 15, 18, 37] :

$$\beta_z = \frac{1}{b_z} = \left(\frac{m\omega_z}{\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} \quad (3.41)$$

$$\beta_{\perp} = \frac{1}{b_{\perp}} = \left(\frac{m\omega_{\perp}}{\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} \quad (3.42)$$

En raison de la symétrie du problème, on effectue le changement de variables suivant :

$$\xi = z\beta_z \quad (3.43)$$

$$\eta = r^2\beta_{\perp}^2 \quad (3.44)$$

Il vient que les fonctions propres de l'oscillateur harmonique s'écrivent :

$$\Phi_{\alpha}(\vec{r}, \sigma) = \Psi_{n_r}^{\Lambda}(r)\varphi_{n_z}^{\Lambda}(z)\frac{\exp(i\Lambda\varphi)}{(2\pi)^{\frac{1}{2}}}\chi_{\Sigma}(\sigma) \quad (3.45)$$

avec :

$$\Psi_{n_r}^{\Lambda}(r) = N_{n_r}^{\Lambda}\beta_{\perp}\sqrt{2\eta}^{\frac{|\Lambda|}{2}}\exp\left(\frac{-\eta}{2}\right)L_{n_r}^{|\Lambda|}(\eta) \quad (3.46)$$

$$\varphi_{n_z}(z) = N_{n_z}\beta_z^{\frac{1}{2}}\exp\left(\frac{-\xi^2}{2}\right)H_{n_z}(\xi) \quad (3.47)$$

où $L_{n_r}^{|\Lambda|}$: sont les polynômes de Laguerre et $H_{n_z}(\xi)$: sont les polynômes d'Hermite [39].

Les constantes de normalisations $N_{n_r}^{\Lambda}$ et N_{n_z} sont données par :

$$N_{n_z} = \left(\frac{1}{(\pi)^{\frac{1}{2}}2^{n_z}n_z!}\right)^{\frac{1}{2}} \quad (3.48)$$

$$N_{n_r}^{\Lambda} = \left(\frac{n_r!}{(n_r + |\Lambda|)!}\right)^{\frac{1}{2}} \quad (3.49)$$

Les nombres quantiques n_r et n_z sont respectivement, le nombre de nœuds dans les directions r et z et les nombres quantiques Λ et Σ sont respectivement les projections des opérateurs du moment angulaire et de spin.

Enfin les énergies propres associées aux états propres de l'oscillateur harmonique s'écrivent comme suit :

$$\epsilon_\alpha = (2n_r + |\Lambda| + 1)\hbar\omega_\perp + (n_z + \frac{1}{2})\hbar\omega_z \quad (3.50)$$

Le nombre d'états de plus basses énergies associés aux fréquences propres $\hbar\omega_\perp$ et $\hbar\omega_z$ sont au nombre de $M_0 = \frac{(N_{sh}+1) \cdot (N_{sh}+2) \cdot (N_{sh}+3)}{6}$, où N_{sh} : représente le nombre de couches. Dans notre travail, on a pris $N_{sh} = 14$ couches. Il vient que $M_0 = 680$.

3.3.4 Diagonalisation de l'hamiltonien de HFB

La difficulté majeure dans ce problème réside dans le fait de diagonaliser l'hamiltonien. La dimension des matrices étant très grande fait que le problème soit quasi impossible à résoudre même par les méthodes numériques les plus sophistiquées. Pour ce faire, on doit réduire les dimensions des matrices en utilisant les propriétés que satisfont les fonctions d'onde HFB.

Les fonctions d'onde de quasi-particule sont développées sur la base des fonctions propres de l'oscillateur harmonique [13, 40, 41] :

$$U_k(\vec{r}, \sigma, \tau) = \chi_k(\tau) \sum_{\alpha} U_{k\alpha} \Phi_{\alpha}(\vec{r}, \sigma) \quad (3.51)$$

$$V_k(\vec{r}, \sigma, \tau) = \chi_k(\tau) \sum_{\alpha} V_{k\alpha} \Phi_{\alpha}(\vec{r}, \sigma) \quad (3.52)$$

En substituant les deux relations dans l'équation HFB (2.102) et en utilisant la relation d'orthogonalité que satisfont les vecteurs de la base, on trouve que les coefficients du développement sont les valeurs propres de l'hamiltonien de HFB [42] :

$$\begin{pmatrix} h^{(q)} - \lambda^{(q)} & \Delta^{(q)} \\ \Delta^{(q)} & -h^{(q)} + \lambda^{(q)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_k \\ V_k \end{pmatrix} = E_k \begin{pmatrix} U_k \\ V_k \end{pmatrix} \quad (3.53)$$

où E_k : sont les énergies de quasi-particules, $\lambda^{(q)}$: est le potentiel chimique et les matrices $h_{\alpha\beta}^{(q)}$ et $\Delta_{\alpha\beta}^{(q)}$ sont données par :

$$h_{\alpha\beta}^{(q)} = \langle \Phi_{\alpha} | h_q | \Phi_{\beta} \rangle \quad (3.54)$$

$$\Delta_{\alpha\beta}^{(q)} = \langle \Phi_{\alpha} | \Delta_q | \Phi_{\beta} \rangle \quad (3.55)$$

Remarquons tout d'abord que la théorie HFB ne mélange pas les isospins des particules en

interaction. Par conséquent, les blocs protons et neutrons sont diagonalisés séparément. Dans le cas de la déformation axiale, $\Omega_k = \Lambda_k + \Sigma_k$ sont les valeurs propres de \hat{j}_z , ce qui fait que $h_{\alpha\beta}^{(q)}$ et $\Delta_{\alpha\beta}^{(q)}$ se diagonalisent par bloc Ω_k . D'autre part, en tenant compte de l'invariance par rapport au renversement du sens du temps, la matrice de l'hamiltonien est construite en tenant compte seulement des valeurs de Ω_k positives. Et enfin, compte tenu de la conservation de la parité $\Pi = (-1)^{n_z + \Lambda}$, tout bloc correspondant à une valeur particulière de Ω_k se scinde en deux sous-blocs caractérisés par les deux signes possibles de la parité $\Pi = \pm 1$.

$$\left(\begin{array}{cc} \left(\begin{array}{cc} \Pi_{\text{paire}} \text{ et } \Omega_k^+ & 0 \\ 0 & \Pi_{\text{paire}} \text{ et } \Omega_k^- \end{array} \right) & 0 \\ 0 & \left(\begin{array}{cc} \Pi_{\text{impaire}} \text{ et } \Omega_k^+ & 0 \\ 0 & \Pi_{\text{impaire}} \text{ et } \Omega_k^- \end{array} \right) \end{array} \right)$$

3.3.5 Calcul des densités locales

Après la diagonalisation, on aura à calculer les densités locales [13] :

$$\rho(\vec{r}\sigma, \vec{r}'\sigma') = \sum_{\alpha\beta} \rho_{\alpha\beta} \Phi_{\alpha}^*(\vec{r}\sigma) \Phi_{\beta}(\vec{r}'\sigma') \quad (3.56)$$

$$\tilde{\rho}(\vec{r}\sigma, \vec{r}'\sigma') = \sum_{\alpha\beta} \tilde{\rho}_{\alpha\beta} \Phi_{\alpha}^*(\vec{r}\sigma) \Phi_{\beta}(\vec{r}'\sigma') \quad (3.57)$$

avec :

$$\rho_{\alpha\beta} = \sum_k V_{\alpha k}^* V_{\beta k} \quad (3.58)$$

$$\tilde{\rho}_{\alpha\beta} = - \sum_k V_{\alpha k}^* U_{\beta k} \quad (3.59)$$

Lorsque le nombre d'états de quasi-particules augmente, les énergies calculées pour une interaction d'appariement de portée nulle diverge [43]. Dans ce cas, il faut tronquer les niveaux des énergies de quasi-particules et n'en tenir compte que des énergies inférieures à une certaine valeur [29]. Le choix de cette valeur va dépendre du résultat du calcul du spectre équivalent :

$$\bar{\epsilon}_k = (1 - 2N_k)E_k \quad (3.60)$$

et des gaps d'appariement :

$$\bar{\Delta}_k = 2E_k(N_k(1 - N_k))^{\frac{1}{2}} \quad (3.61)$$

où N_k représente la probabilité d'occupation du $k^{\text{ème}}$ niveau donnée par la relation (3.40).

Les énergies considérées seront celles dont les valeurs \bar{e}_k sont telles que :

$$\bar{e}_k \leq \bar{e}_{\max} \quad (3.62)$$

cela résulte du fait qu'il y a équivalence entre le spectre des \bar{e}_k et celui des énergies des particules indépendantes. Dans la pratique, nous avons pris $\bar{e}_{\max} = 60$ MeV.

3.3.6 Interaction coulombienne

Concernant le système proton, des termes additionnels doivent apparaître dans l'expression du potentiel central. Ce sont les termes correspondant au champ coulombien direct qui s'écrit comme [13] :

$$V_d^C(\vec{r}) = e^2 \int d\vec{r}' \frac{\rho_p(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \quad (3.63)$$

et le champ coulombien d'échange qui, dans l'approximation du champ moyen, est donné par :

$$V_{ex}^C(\vec{r}) = -e^2 \left(\frac{3}{\pi}\right)^{\frac{1}{3}} \rho_p^{\frac{1}{3}}(\vec{r}) \quad (3.64)$$

L'intégrant dans la relation (3.63) présente une singularité au point $\vec{r} = \vec{r}'$, pour contourner ce problème plusieurs méthodes sont proposées, entre autres, celle de Vautherin [37] qui consiste à utiliser l'identité :

$$\Delta_{r'} |\vec{r} - \vec{r}'| = \frac{2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \quad (3.65)$$

Après intégration par parties, on trouve :

$$V_d^C(\vec{r}) = \frac{e^2}{2} \int d\vec{r}' |\vec{r} - \vec{r}'| \Delta_{r'} \rho_p(\vec{r}') \quad (3.66)$$

L'intégration est calculée par la méthode de quadrature de Gauss-Legendre dans l'intervalle $[0, 1]$ subdivisé en 30 points. Cette dernière méthode est plus fiable en matière

de précision, d'où la raison de la choisir pour nos calculs.

3.4 Restauration de la symétrie nombre de particules

3.4.1 Brisure de symétrie

Parmi les concepts primordiaux de la physique apparaît celui de la symétrie. Ce concept s'illustre clairement dans la théorie lors de la construction de l'interaction nucléon-nucléon ainsi qu'en pratique à travers toutes les interactions effectives. En effet, toutes ces interactions possèdent un certain nombre de symétries [18] telles que l'invariance par translation, l'invariance par rotation et l'invariance par renversement du sens du temps.

La notion de symétrie est intimement liée à celle du champ moyen. Les solutions obtenues par l'approximation de Hartree-Fock peuvent briser une ou plusieurs symétries [26]. Dans ce cas de figure, on dit qu'il y a brisure de symétrie d'une manière spontanée. Cette brisure est due au fait que la théorie du champ moyen, par hypothèse, considère le noyau comme étant un ensemble de particules indépendantes. Dans l'approximation de Hartree-Fock, par exemple, la fonction d'onde totale qui est un déterminant de Slater, est un produit antisymétrisé de fonctions d'onde individuelles propres à chaque nucléon. Leur forme particulière élimine automatiquement tous les effets qui n'interviennent pas dans le cadre du champ moyen. Tel est le cas de la plupart des corrélations qui existent entre nucléons. Ces dernières sont contenues dans l'hamiltonien total du système (l'hamiltonien à deux corps qui conserve les symétries). Par contre, elles n'apparaissent pas dans la solution finale du problème variationnel. Les symétries de l'interaction nucléon-nucléon sont brisées au niveau de l'hamiltonien de HF (l'hamiltonien de champ moyen obtenu à partir de la variation de l'énergie totale du système de nucléons dans notre cas représenté par une fonctionnelle de la densité où différentes symétries sont systématiquement brisées).

Au départ, le noyau présente des corrélations qui ne sont pas prises en compte dans le champ moyen par la suite le choix d'une densité initiale pour le calcul itératif brise un certain nombre de symétries, ce qui implique que l'hamiltonien de HF brise ces symétries. Néanmoins, le processus itératif peut converger vers une solution symétrique acceptable physiquement du point de vue énergétique.

3.4.2 Méthode de Lipkin-Nogami

Etant donnée que le nombre de particules n'est conservé qu'en moyenne dans l'état HFB, on fait généralement appel à l'une des méthodes [44–49] élaborées pour résoudre ce problème. Parmi ces méthodes, celle de Lipkin-Nogami [13, 24, 50–52] demeure la plus utilisée de nos jours dû à sa simplicité. En effet, cette méthode permet de traiter le problème dans l'approximation du champ moyen et d'implémenter de façon simple les corrections apportées aux équations HFB.

La méthode de Lipkin-Nogami est une technique de *projection avant variation* qui permet d'éliminer d'une manière approximative les fluctuations du nombre de particules, en particulier leurs effets sur l'énergie de l'état fondamental. Pour ce faire, il suffit de remplacer l'énergie E par :

$$E_N = \langle \hat{H} \rangle - \lambda_2 \langle \Delta \hat{N}^2 \rangle \quad (3.67)$$

où la quantité $\lambda_2 \langle \Delta \hat{N}^2 \rangle$: est la correction de Kamlah [53] au second ordre et le coefficient λ_2 s'écrit [54, 55] :

$$\lambda_2 = \frac{\langle \hat{H}(\Delta \hat{N}^2 - \langle \Delta \hat{N}^2 \rangle) \rangle - \frac{\langle \hat{H} \Delta \hat{N} \rangle \langle \Delta \hat{N}^3 \rangle}{\langle \Delta \hat{N}^2 \rangle}}{\langle \Delta \hat{N}^4 \rangle - \langle \Delta \hat{N}^2 \rangle^2 - \frac{\langle \Delta \hat{N}^3 \rangle^2}{\langle \Delta \hat{N}^2 \rangle}} \quad (3.68)$$

Il est à noter que dans la pratique, la méthode de projection de Lipkin-Nogami est implémentée dans les équations HFB avec uniquement de simples modifications du potentiel de HF :

$$h' = h - 2\lambda_2(1 - 2\rho) \quad (3.69)$$

du champ self-consistant de Hartree-Fock :

$$\Gamma_{\nu\beta} = \sum_{\gamma\mu} v_{\nu\mu\beta\gamma} \rho_{\gamma\mu} \rightarrow \Gamma'_{\nu\beta} = \sum_{\gamma\mu} v_{\nu\mu\beta\gamma} (\rho(1 - \rho))_{\gamma\mu} \quad (3.70)$$

et d'appariement :

$$\Delta_{\nu\mu} = \frac{1}{2} \sum_{\beta\gamma} v_{\nu\mu\beta\gamma} \kappa_{\beta\gamma} \rightarrow \Delta'_{\nu\mu} = \frac{1}{2} \sum_{\beta\gamma} v_{\nu\mu\beta\gamma} (\rho \cdot \kappa)_{\beta\gamma} \quad (3.71)$$

Le calcul explicite des différents moments [56] de l'équation (3.68) donne [31, 57] :

$$\lambda_2 = \frac{4Tr\Gamma'\rho(1-\rho) + 4Tr\Delta'(1-\rho)\kappa}{8(Tr\rho(1-\rho))^2 - 16Tr\rho^2(1-\rho)^2} \quad (3.72)$$

Chapitre 4

Résultats numériques et discussion

Les grandeurs physiques caractérisant les noyaux super lourds comme : l'énergie de liaison, le moment quadrupolaire, le rayon quadratique moyen, l'énergie de séparation des derniers neutrons ainsi que l'énergie de désintégration et le temps de demi-vie fournissent d'importantes informations concernant ces noyaux.

Dans le but d'étudier ces différentes grandeurs physiques, nous avons effectué, dans un premier temps, une série de tests afin de choisir parmi les deux interactions de Skyrme SkP et SLy4¹ [12, 58] la plus appropriée dans cette région de la table de masses.

Une étude bibliographique nous a révélé que seule la valeur expérimentale de l'énergie des noyaux pour lesquels $Z \leq 110$ est disponible à l'heure actuelle. Aussi, nous nous sommes limité pour nos tests à cette grandeur et aux noyaux pour lesquels $100 \leq Z \leq 110$.

L'énergie de liaison a été calculée en résolvant les équations HFB en utilisant les interactions de Skyrme SkP et SLy4. Les valeurs obtenues sont représentées sur la figure 4-1 pour différents noyaux. Il apparaît clairement que la force SkP reproduit mieux les valeurs expérimentales comparée à SLy4 qui présente un écart nettement plus grand. Notons également que les différentes énergies calculées par l'interaction SkP sont plus faibles que les valeurs expérimentales. Toutefois, l'écart est inférieur à 0.1%. Il est à noter que les erreurs sur les valeurs expérimentales sont de l'ordre du KeV, c'est pourquoi on ne peut pas les représenter sur les figures.

Les résultats SkP étant satisfaisant, nous avons adopté cette interaction pour toute la suite de notre étude.

Dans notre travail, nous avons utilisé le code qui a été écrit en langage Fortran. Ce code écrit initialement pour l'étude de noyaux lourds a été généralisé aux noyaux super

¹Voir annexe C.

lourds.

4.1 Energie de liaison

La figure 4-2 montre la variation de l'énergie de liaison par nucléon E/A des isotopes $110 \leq Z \leq 120$ en fonction du nombre de neutrons en comparaison à celles de Moller [59], ce dernier a fait le calcul sur la base du modèle de la gouttelette augmenté des corrections de couche et d'appariement. Il ressort de cette figure que pour $N \leq 184$, l'énergie de liaison varie faiblement puis décroît rapidement dès que $N > 184$. Cette diminution pourrait être due à une fermeture de couche autour de $N = 184$.

On remarque aussi que les valeurs HFB sont légèrement inférieures à celle de Moller. L'écart est cependant inférieur à 2%. De plus, on peut voir que cette différence diminue avec l'augmentation du nombre de neutrons.

4.2 Déformation nucléaire

Sur la figure 4-3, la variation du paramètre de déformation :

$$\beta = \sqrt{\frac{\pi}{5}} \frac{\langle \hat{Q} \rangle}{\langle r^2 \rangle} \quad (4.1)$$

où $\langle \hat{Q} \rangle$: est le moment quadrupolaire.

$\langle r^2 \rangle$: est le rayon quadratique moyen.

a été représentée en fonction du nombre de neutrons N . Il faut noter que la forme des noyaux dépend du signe du moment quadrupolaire. Trois cas de figure se présentent dans le cas de la symétrie axiale : le noyau est oblate pour $\beta < 0$, il est sphérique pour $\beta = 0$ et enfin a la forme prolate pour $\beta > 0$.

Dans le cas des isotopes $Z = 110$, on remarque que pour la valeur de $N = 180$ le noyau est oblate. Un changement de forme apparaît ensuite pour $182 \leq N \leq 188$, où les noyaux sont sphériques. On constate que les deux systèmes neutron et proton ont la même déformation ($\beta_n = \beta_p$). Lorsque le nombre de neutrons augmente, on remarque qu'il y a encore un changement de forme : les isotopes pour lesquels $190 \leq N \leq 242$ ont une forme prolate. Au début, ils sont super déformés (pour $190 \leq N \leq 204$) et un léger écart existe entre β_p et β_n ($\beta_p > \beta_n$). Ensuite, ils sont moins déformés et l'écart entre β_p et β_n diminue progressivement. Un autre changement de forme apparaît pour

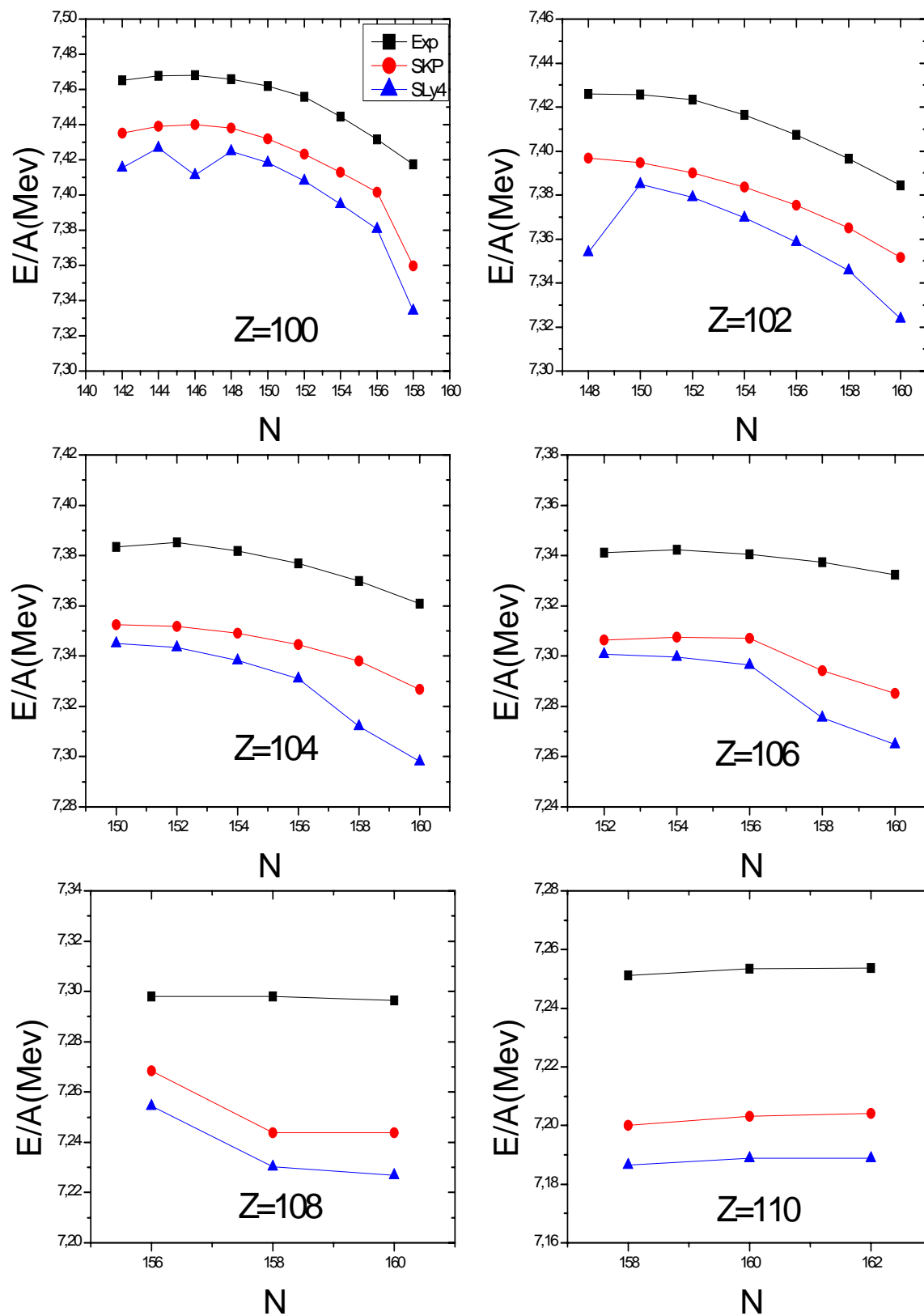


Fig. 4-1 : Variation de l'énergie de liaison par nucléon E/A de quelques isotopes $100 \leq Z \leq 110$ en fonction du nombre de neutrons.

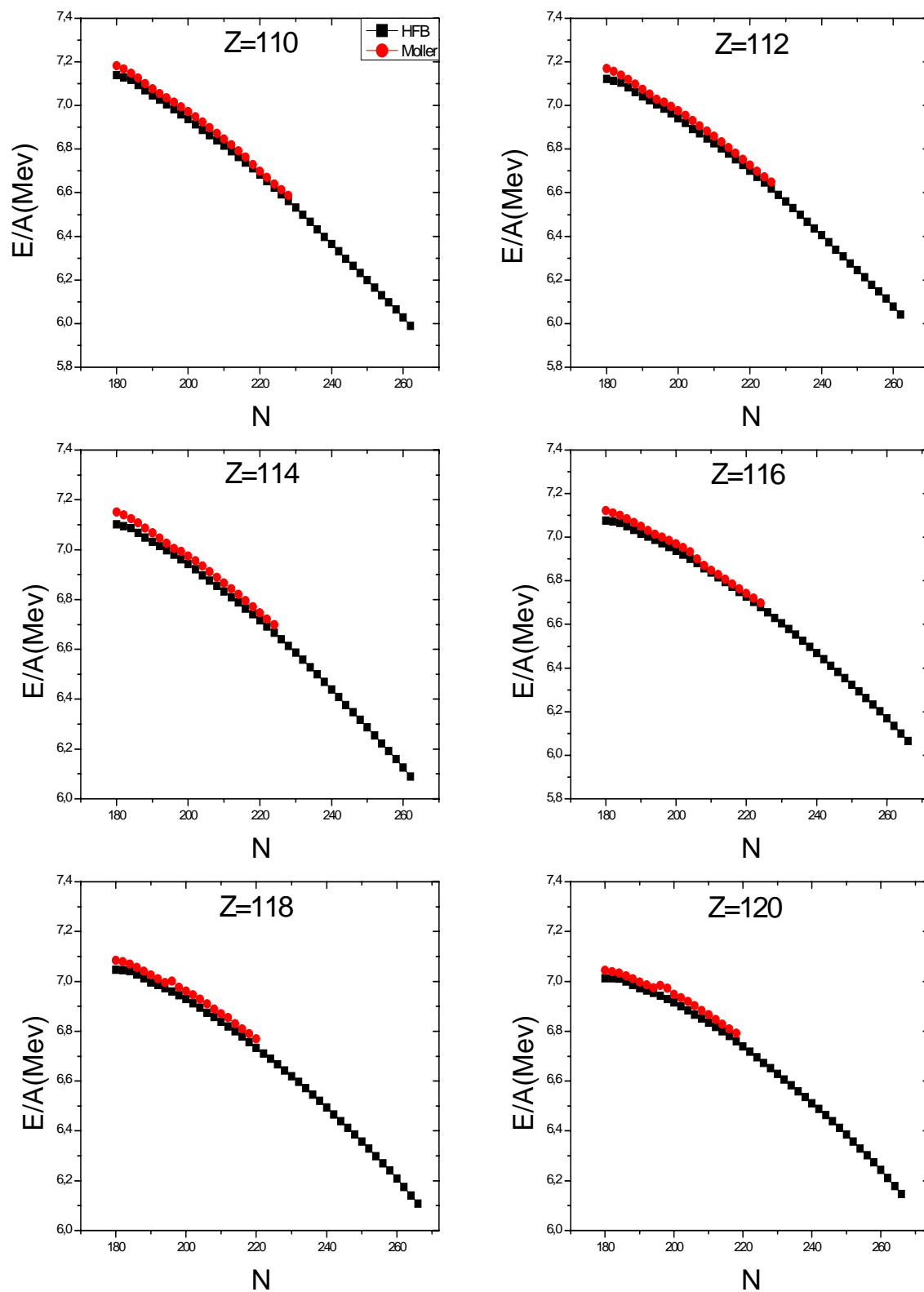


Fig. 4-2 : Variation de l'énergie de liaison par nucléon E/A des isotopes $110 \leq Z \leq 120$ en fonction du nombre de neutrons.

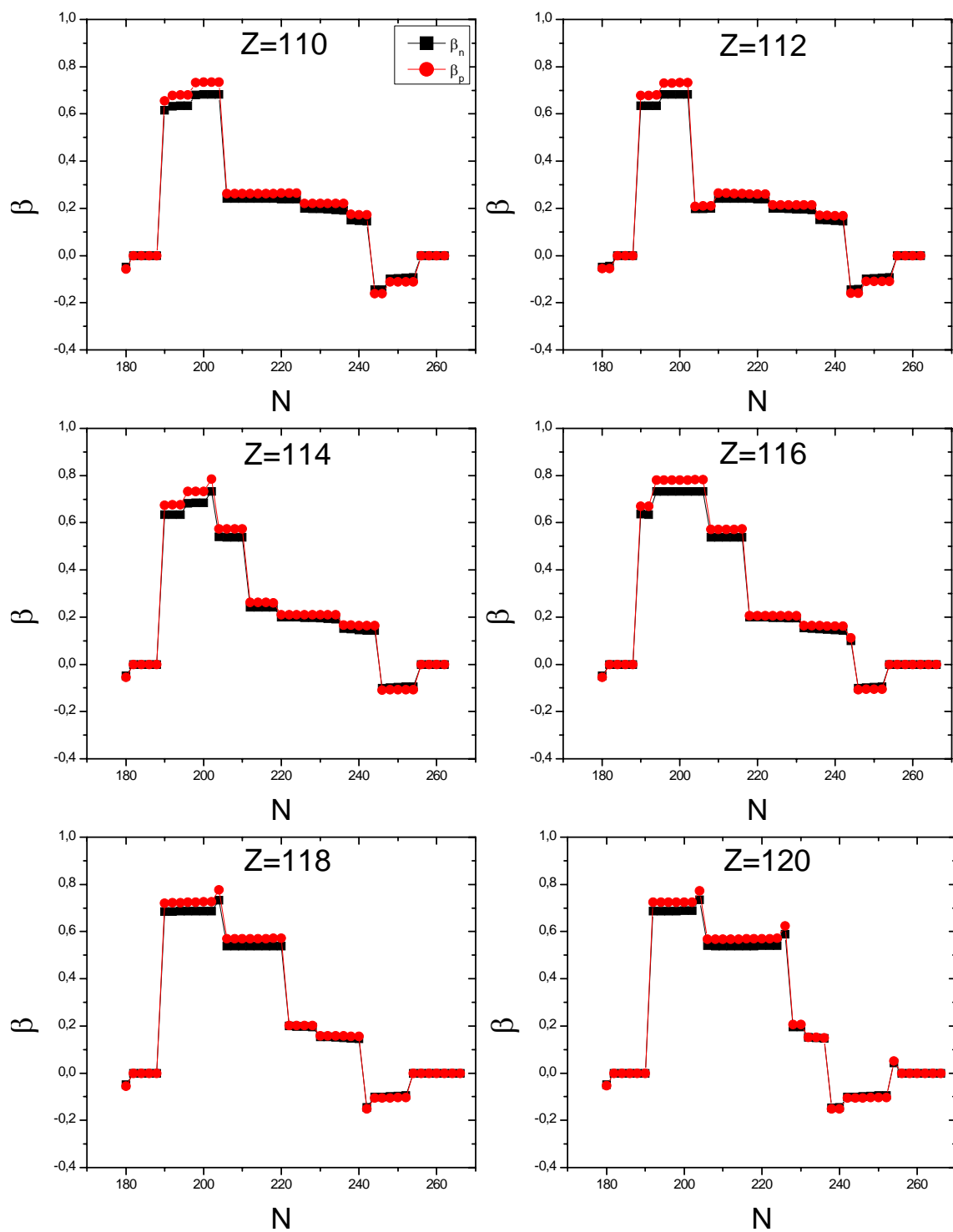


Fig. 4-3 : Variation des moments quadrupolaires β_n, β_p des isotopes $110 \leq Z \leq 120$ en fonction du nombre de neutrons.

$244 \leq N \leq 254$. Dans cette région, les noyaux ont une forme oblate avec un léger écart entre β_p et β_n ($\beta_p < \beta_n$). Enfin, à partir de $N = 256$, les noyaux sont tous sphériques et $\beta_p = \beta_n$ jusqu'à $N = 262$.

On remarque clairement que les deux premiers isotopes de $Z = 112$, $N = 180$ et $N = 182$ sont oblates, il y a ensuite un changement de forme à partir de $N = 184$ jusqu'à $N = 188$, où les noyaux sont sphériques $\beta_p = \beta_n$. Pour $190 \leq N \leq 242$, les noyaux sont prolates avec $\beta_p > \beta_n$, on remarque que cet intervalle se scinde en deux parties, la première est caractérisée par des noyaux super déformés, β a des valeurs au tour de 0.7 pour $190 \leq N \leq 202$, ensuite la deuxième partie est caractérisée par la diminution du paramètre β , il passe d'environ 0.7 jusqu'aux alentours de 0.2 pour $204 \leq N \leq 242$ et l'écart entre β_p et β_n diminue. Pour $244 \leq N \leq 254$, les noyaux ont une forme oblate avec $\beta_p < \beta_n$ et enfin les derniers noyaux sont sphériques pour $256 \leq N \leq 262$.

Pour $Z = 114$ à 120, les premiers isotopes de la série sont oblates pour $N = 180$, en suite on aperçoit un changement de forme pour $N = 182$, les noyaux deviennent sphériques pour $182 \leq N \leq 190$. un autre changement de forme aura lieu cette fois à partir de $N = 192$ et jusqu'au alentour de $N = 240$ pour la série de $Z = 114 - 116$, mais pour $Z = 118$ le dernier noyau prolate se situe à $N = 240$, et pour $Z = 120$, il est situé à $N = 236$, on constate que dans cet intervalle les isotopes passe d'un état super déformé $\beta \in [0.5; 0.8]$ à un état moins déformé où $\beta \sim 0.2$. Un autre changement de forme a lieu pour $N > 236$, cette fois ci les isotopes ont un forme oblate jusqu'à $N = 252$. Au-delà de $N = 254$ tous les isotopes sont sphériques jusqu'au dernier élément stable de la série isotopique.

4.3 Rayons quadratiques

En parlant de rayon nucléaire, on fait souvent allusion à des noyaux sphériques. Cependant, si les noyaux magiques (ou semi-magiques) ainsi que leurs voisins, ont une forme sphériques dans leur état fondamental, les noyaux à couches ouvertes en neutrons (ou en protons) sont généralement déformés (oblates ou prolates). On parvient généralement à remonter à la distribution des nucléons dans ces noyaux ainsi qu'à leurs déformations en calculant les différents rayons quadratiques moyens :

$$\langle r^2 \rangle = \int r^2 \rho(\vec{r}) d\vec{r}$$

La figure 4-4 montre les variations des rayons quadratiques moyens des systèmes protons r_p , et neutrons r_n et de charge r_c . Ce dernier est donné par la relation : $r_c = \sqrt{0.64 + r_p^2}$ qui tient compte de la taille finie des protons [60].

Une des principales caractéristiques des noyaux riches en neutrons est le développement d'une peau de neutrons qui se manifeste par une différence entre les rayons neutron r_n et proton r_p . On peut voir que pour les noyaux les plus légers, les rayons neutron et proton sont proches. Par contre, en se rapprochant de la drip-line neutron, on voit clairement la grande différence entre les rayons quadratiques neutron et proton et par conséquent le développement d'une peau de neutrons.

Par ailleurs, il apparaît des courbes deux changements brusques dans la systématique des rayons quadratiques des isotopes $Z = 110$ et 112 . Le premier autour de $N = 190$ et le second pour $N \sim 200$. Par contre pour les isotopes $114 - 120$, trois grands changements apparaissent autour de $N = 190, 200$ et 220 . Ces changements sont causés par le changement de la forme des noyaux dans leur l'état fondamental.

4.4 Niveaux de Fermi

La figure 4-5 représente deux courbes, qui caractérisent la variation de l'énergie des niveaux de Fermi λ_p et λ_n en fonction de N . On voit clairement que pour toutes les séries d'isotopes, λ_p augmente en fonction de N tandis que λ_n diminue. On remarque également qu'il y a intersection des deux courbes autour de $-5MeV$.

Par ailleurs, il apparaît des différentes courbes que les derniers noyaux stables ($\lambda \sim 0$) sont : $(Z, N) = (110, 256), (112, 258), (114, 258), (116, 260), (118, 262), (120, 264)$.

4.5 Energie de séparation de deux neutrons

Le calcul de l'énergie de séparation des deux derniers neutrons :

$$S_{2n} = E(N - 2, Z) - E(N, Z)$$

permet de déterminer le dernier isotope stable. A partir de la figure 4-6, où l'énergie de séparation est représentée en fonction du nombre de neutrons, on voit bien que cette énergie décroît lorsque N augmente. On constate toutefois, qu'il y a de brusques variations qui apparaissent sous forme de diminution de l'énergie de séparation. Ceci est dû à

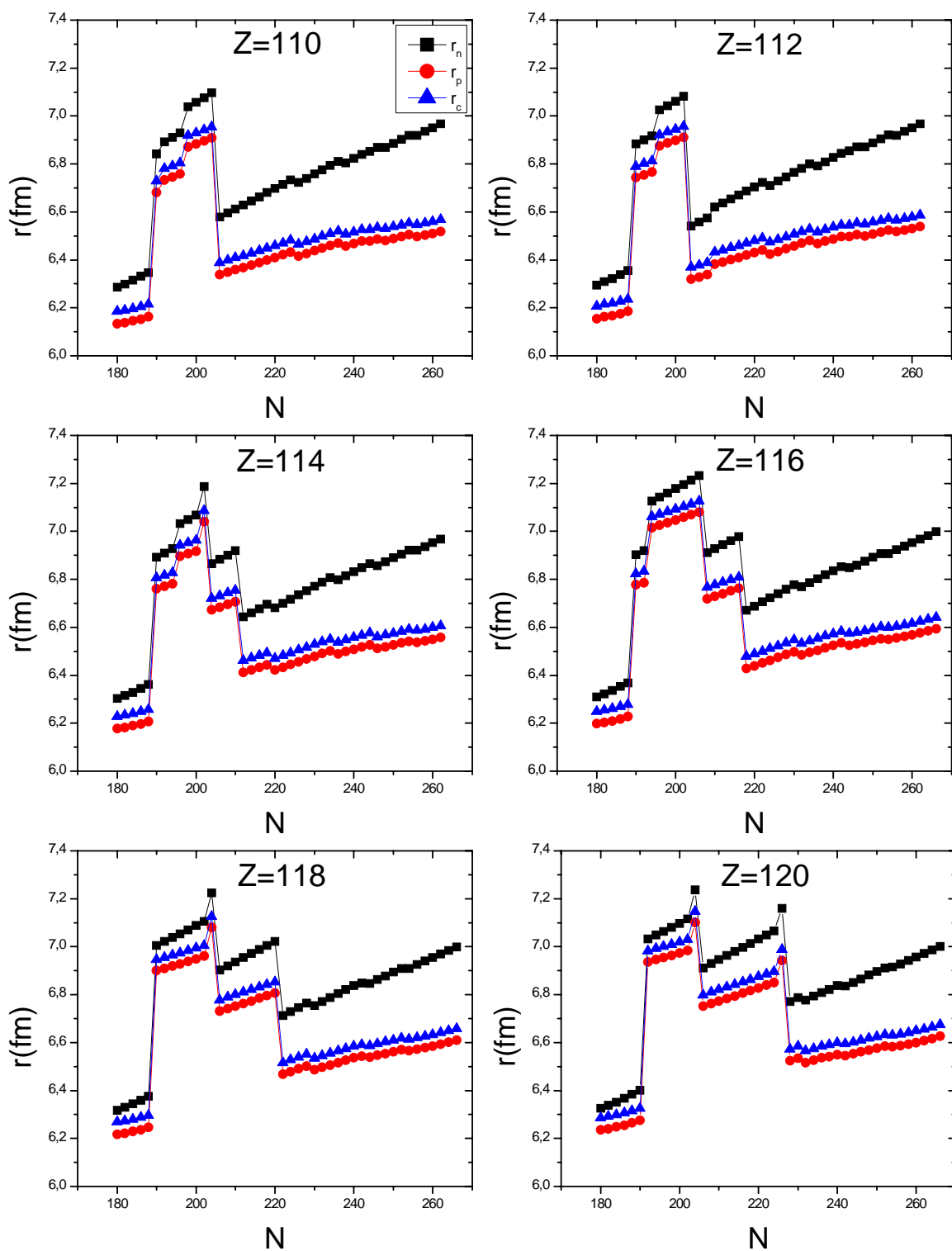


Fig. 4-4 : Variation des rayons quadratiques moyens r_n , r_p et r_c des isotopes $110 \leq Z \leq 120$ en fonction du nombre de neutrons.

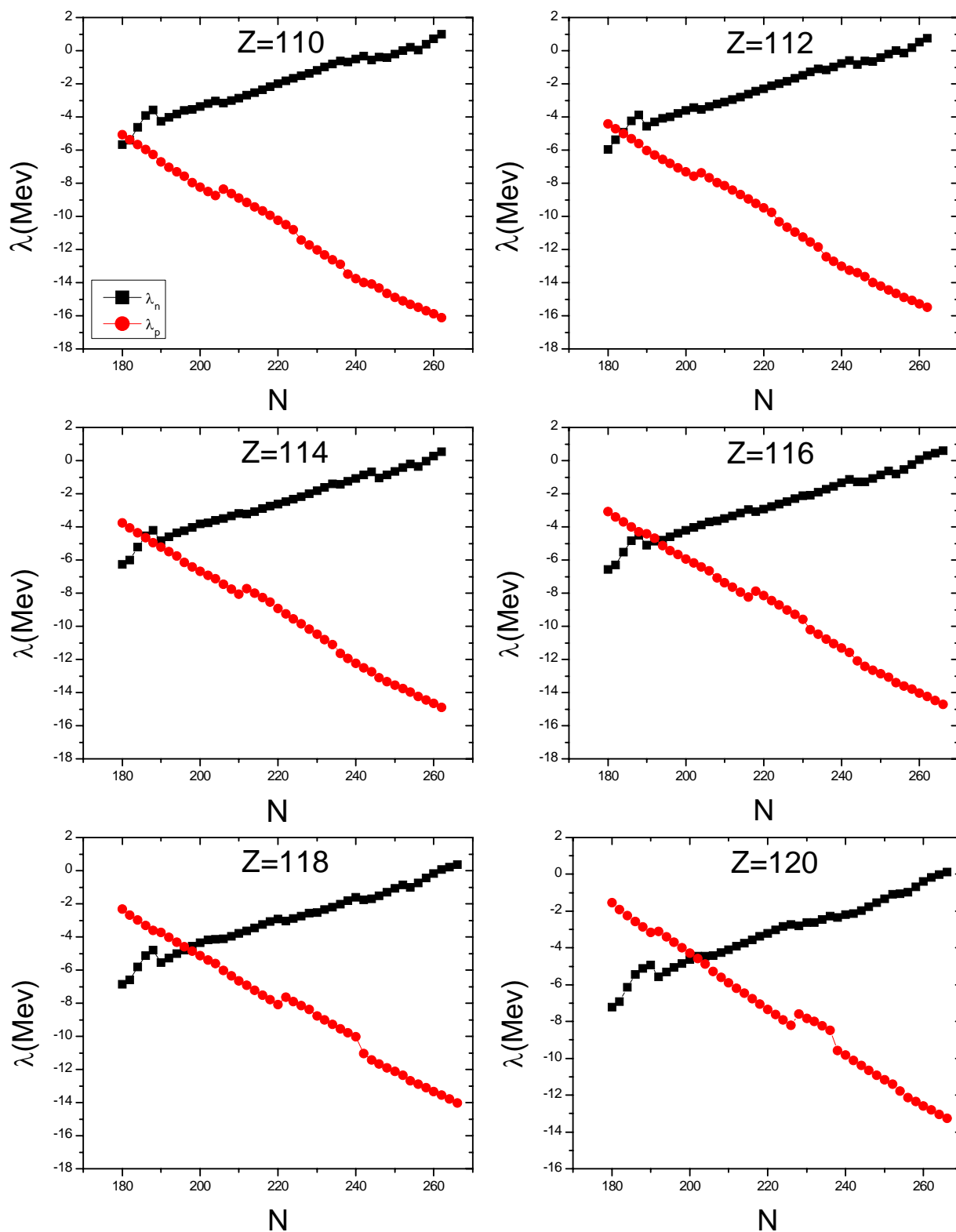


Fig. 4-5 : Variation des énergies du niveau de Fermi λ_p et λ_n des isotopes $110 \leq Z \leq 120$ en fonction du nombre de neutrons.

la fermeture de couche (ou sous-couche) ce qui explique le changement de forme de certains noyaux super lourds en particulier autour de $N = 184$. Nos résultats confirment la possibilité que $N = 184$ soit un nombre magique.

La drip-line neutron est généralement déterminée par l'énergie de séparation des deux derniers neutrons ($S_{2n} = 0$). Nos calculs prédisent les derniers noyaux pouvant exister dans la région d'intérêt sont : $(Z, N) = (110, 256), (112, 256), (114, 256), (116, 256), (118, 258)$ et $(110, 260)$.

Signalons toutefois l'existence d'un îlot de stabilité entre $N = 252$ et 258 pour l'élément 110.

4.6 Energie de désintégration

Pour établir l'expression de l'énergie de désintégration, on a utilisé la théorie de HFBLN, qui incluant l'effet d'appariement, nous a permis de calculer l'énergie de l'état fondamental des noyaux super lourds et d'obtenir l'expression formelle suivante [58, 61] :

$$Q_\alpha = BE(A - 4, Z - 2) + BE(4, 2) - BE(A, Z) \quad (4.2)$$

où BE représente l'énergie de liaison, prise positive.

Nous avons ainsi évalué l'énergie de désintégration alpha Q_α des noyaux super lourds pour $Z = 112 - 120$ de $N = 180$ jusqu'à la drip-line neutron en utilisant les valeurs des énergies de liaison obtenues à partir de l'approche HFBLN.

Sur la figure 4-7, nous comparons nos résultats aux valeurs de Q_α extraites à partir des tables de masses de Moller-Nix-Kratz [59] et des masses évaluées par Koura, Tachibana, Uno et Yamada (KUTY) [62].

Il s'avère que les résultats obtenus avec les trois méthodes montrent des allures tout à fait semblables : une augmentation soudaine de l'énergie de désintégration autour de $N = 184$ ainsi qu'il a été prévu par des études précédentes. Ce résultat peut indiquer la signature d'une fermeture de couche autour de ce nombre de neutrons.

Par ailleurs, nos calculs montrent que pour $N > 186$, Q_α diminue avec l'augmentation du nombre de neutrons, pour un nombre fixe de protons, jusqu'à ce qu'elle devient pratiquement nulle au delà de $N = 240$ à l'exception des isotopes $Z = 120$, pour lesquels Q_α est toujours positive.

Notons enfin qu'un écart apparaît entre nos valeurs et ceux de Moller pour $N \sim 220$

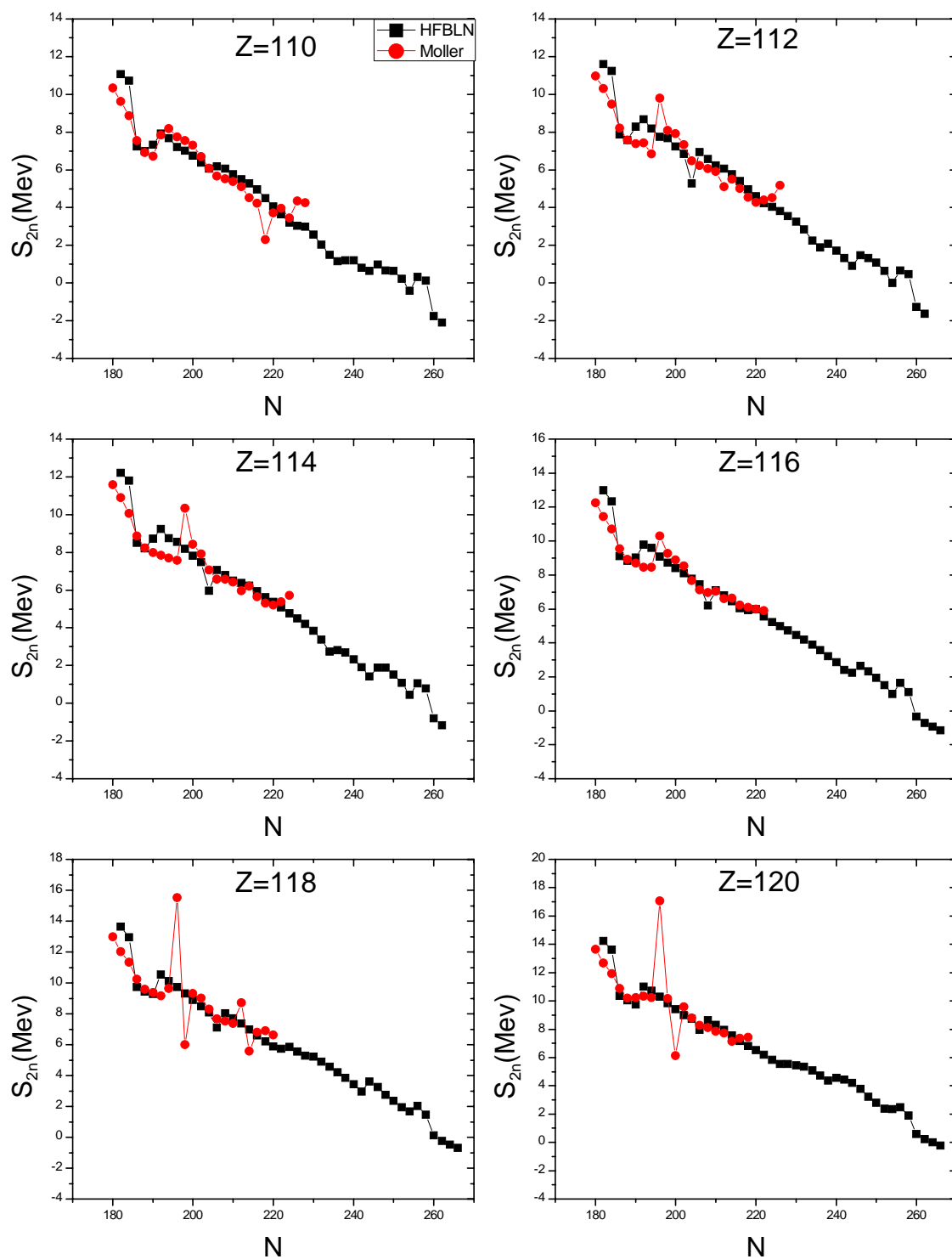


Fig. 4-6 : Variation de l'énergie de séparation S_{2n} des isotopes $110 \leq Z \leq 120$ en fonction du nombre de neutrons.

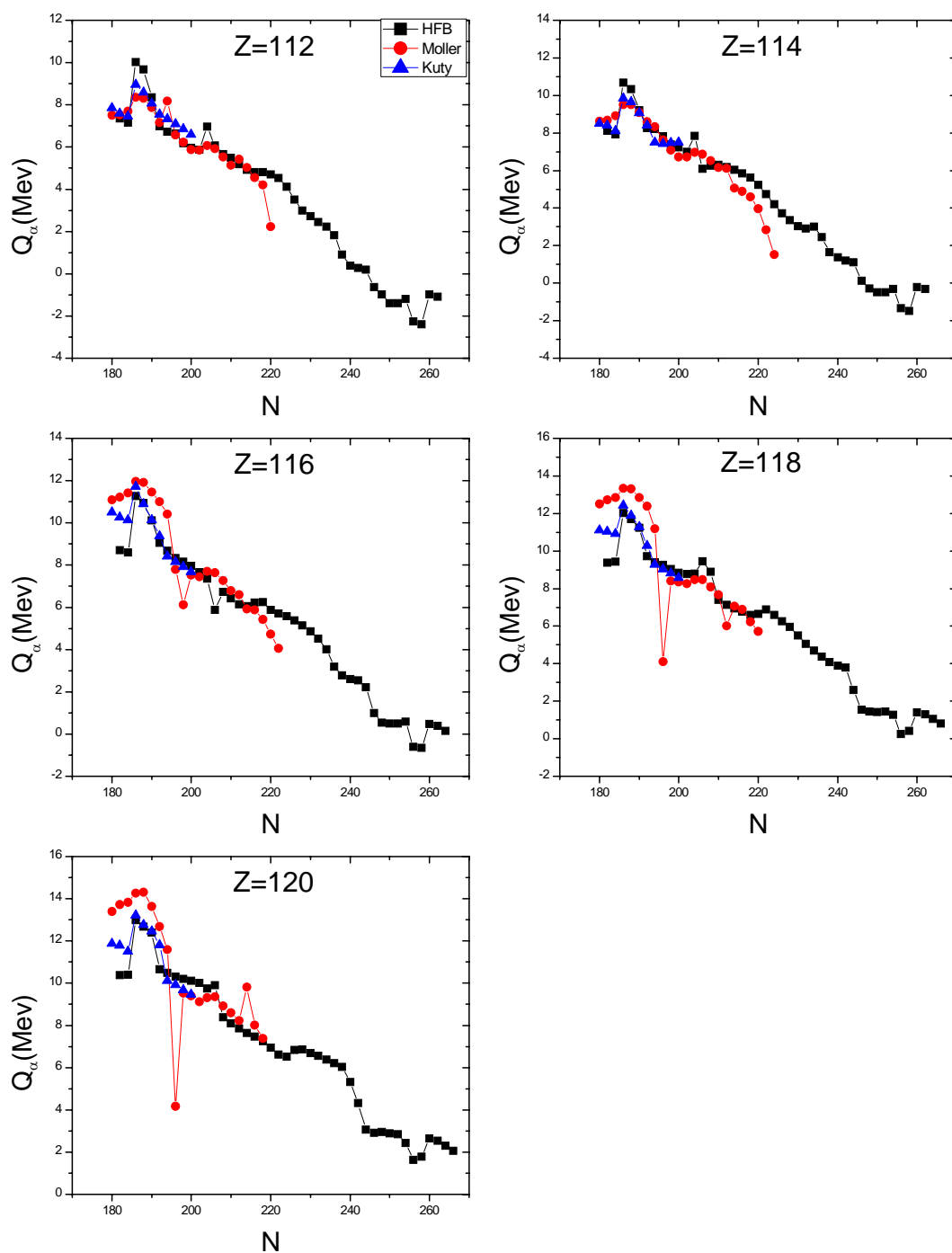


Fig. 4-7 : Variation de l'énergie de désintégration Q_α des isotopes $112 \leq Z \leq 120$ en fonction du nombre de neutrons.

qui semble augmenter avec le nombre de neutrons.

4.7 Demi-vie

L'énergie de désintégration calculée précédemment nous a permis d'établir les prévisions de demi-vies en se basant sur la formule de Viola-Seaborg-Sobiczewski [58, 61, 63–65] :

$$\log_{10}(T_\alpha) = (aZ + b)Q_\alpha^{-\frac{1}{2}} + cZ + d \quad (4.3)$$

avec : $a = 1.66175$, $b = -8.5166$, $c = -0.20228$, $d = -33.9069$ [66].

Les périodes de désintégration alpha obtenues par la formule (4.3) sont montrées sur la figure 4-8 en fonction du nombre de neutrons. Sur la figure nous comparons nos résultats à ceux calculés avec des valeurs de Q_α déduites des tables de masses Moller utilisant la formule de Seaborg-Viola-Sobiczewski.

Nous comparons également nos résultats aux évaluations théoriques de Chowdhury, et al. [63]. Ces derniers sont obtenus à partir de la probabilité de pénétration de la barrière déterminer dans le cadre d'approximation WKB [65] en utilisant les masses théoriques de KUTY.

La figure 4-8 montre que nos résultats [67] sont en bon accord avec ceux de Chowdhury et ceux calculés avec des valeurs de Q_α déduites des tables de Moller à l'exception de quelques noyaux.

Il apparaît que la période augmente avec le nombre de neutrons. Évidemment une chute soudaine de T_α apparaît autour de $N = 184$ en conséquence de l'augmentation de l'énergie de désintégration. Les noyaux qui se situent dans la région où $N \leq 220$ sont instables et se désintègrent en émettant une particule alpha, quand aux noyaux qui se situent au-delà de $N = 220$ sont stables par rapport à la désintégration alpha et se désintègrent probablement par fission spontanée.

Enfin, on peut voir de la figure 4-9 que les présents calculs n'indiquent pas un îlot de stabilité accrue autour de $Z = 114$ tel qu'il est prévu par le modèle en couches ou le modèle macroscopique-microscopique [7, 8]. En général, les demi-vies de désintégration diminuent avec l'augmentation du nombre de protons jusqu'à $Z = 120$.

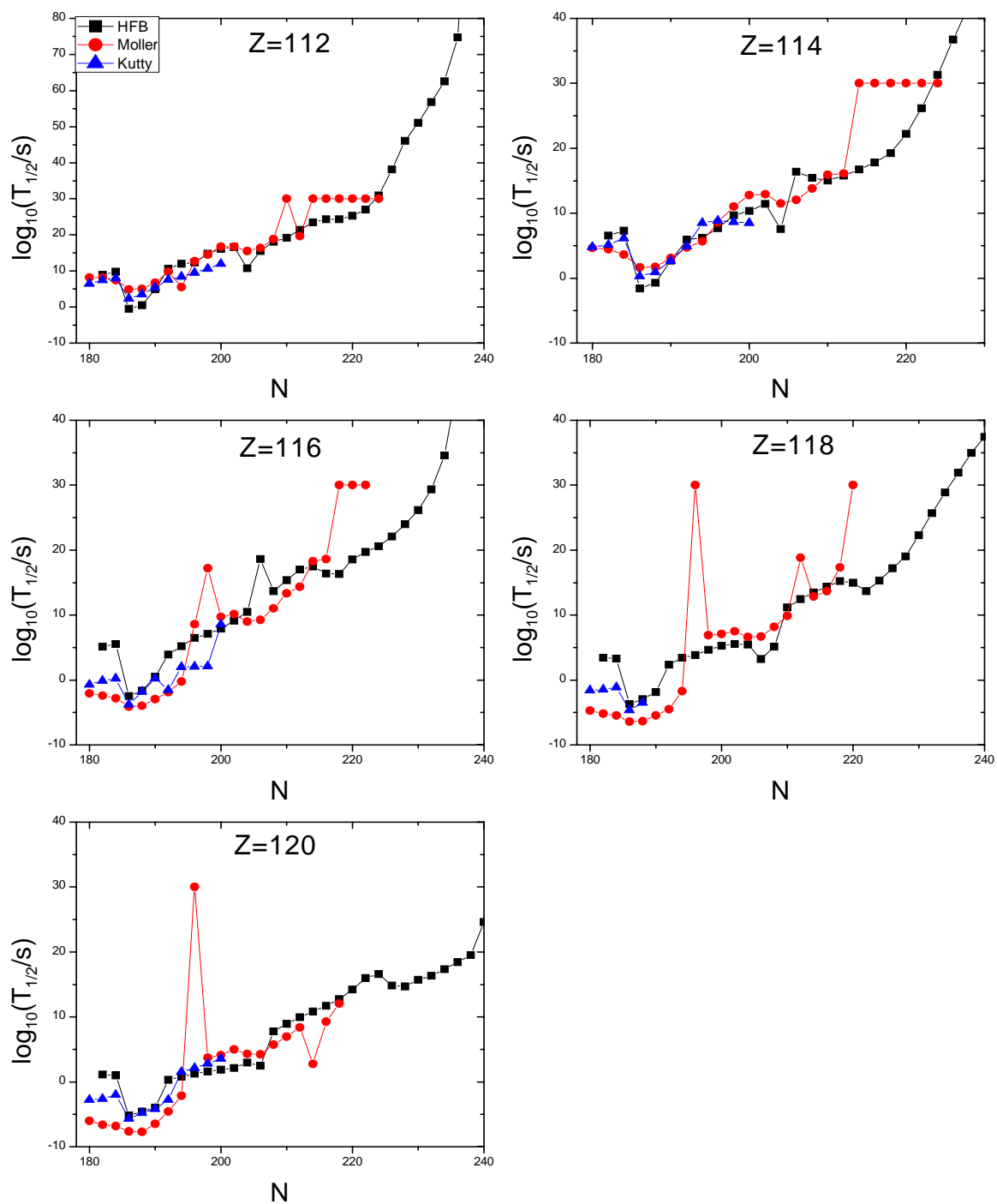


Fig. 4-8 : Variation du temps de demi-vie $\log_{10} T_{\alpha}$ des isotopes $112 \leq Z \leq 120$ en fonction du nombre de neutrons.

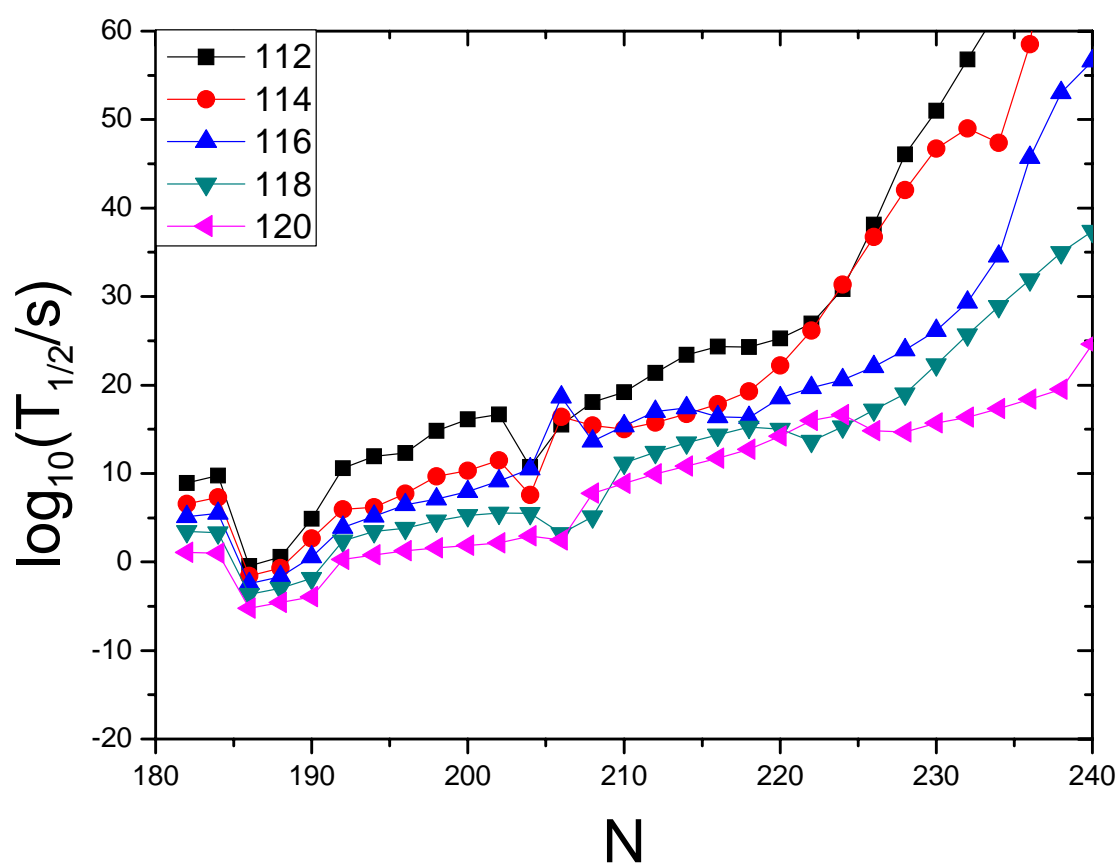


Fig. 4-9 : Variation du temps de demi-vie $\log_{10} T_{\alpha}$ des isotopes $112 \leq Z \leq 120$ en fonction du nombre de neutrons déterminé par la théorie HFB.

Conclusion

Dans le présent travail, nous nous sommes intéressés à l'étude de quelques noyaux super lourds pair-pairs à symétrie axiale proches de la drip-line neutron dans leur état. Cette étude a été réalisée dans le cadre de l'approche microscopique de Hartree-Fock-Bogoliubov. Dans cette approche les calculs sont effectués sur la base d'une fonctionnelle de la densité d'énergie formulée en terme de l'interaction effective de Skyrme. Les corrélations d'appariement ont été prises en compte sous la forme d'une force delta qui dépend de la densité. Le nombre de particule n'est conservé qu'en moyenne dans l'état HFB ce qui introduit des effets non physiques et des erreurs dans le calcul des différentes observables. Pour éliminer ce défaut, il a été fait appel à la méthode de projection de Lipkin-Nogami. La résolution des équations HFB a été faite numériquement en développant les fonctions d'onde de quasi-particules sur la base des fonctions d'onde de l'oscillateur harmonique à symétrie axiale.

Dans un premier temps, l'énergie de liaison, dans la région $100 \leq Z \leq 110$, a été calculée afin de choisir parmi les deux interactions de Skyrme SkP et SLy4 la plus adéquate pour l'étude des noyaux super lourds. Il a été constaté que l'interaction SkP donne des valeurs plus proches des résultats expérimentales, ce qui a fixé notre choix.

L'étude de la variation de l'énergie de liaison, des noyaux d'intérêt ($110 \leq Z \leq 120$), en fonction du nombre de neutrons a montré qu'il y a une faible variation de l'énergie pour une valeur de $N \leq 184$. Par contre, au-delà de cette valeur l'énergie décroît rapidement. Ce comportement traduit probablement une fermeture de couche autour de cette valeur de N.

Le calcul des rayons quadratiques moyens, a révélé que l'augmentation du nombre de neutrons (le nombre de protons étant fixe) entraîne l'augmentation des rayons quadratiques neutrons r_n et protons r_p ainsi que l'écart entre les deux ($r_n - r_p$) ce qui montre que les protons restent confinés à l'intérieur du surplus de neutrons.

Les énergies de Fermi donnent une idée sur le pouvoir d'extraire le dernier nucléon. Leur étude a montrée que λ_p augmente avec le nombre de neutrons tandis que λ_n diminue

ce qui est dû au fait que les neutrons ont tendance à former une couche de neutrons périphériques plus facile à extraire.

L'énergie de séparation des deux derniers neutrons a été également considérée. L'étude de cette grandeur nous a permis, d'une part, de déterminer le dernier noyau stable de chaque série isotopique et d'autre part, d'identifier le nombre de neutrons $N = 184$ comme un nombre magique.

Dans la présente étude un intérêt particulier a été accordé à la désintégration alpha. Il a été montré que pour la plupart des noyaux étudiés, les énergies de désintégration alpha déterminées par la théorie HFB sont en bon accord avec les valeurs théoriques de Q_α extraites des tables de masse de Moller-Nix-Kratz et de KUTY. Les énergies de désintégration obtenues ont été alors utilisées pour prévoir les demi-vies en se basant sur la formule de Viola-Seaborg. Les résultats calculés sont dans leur globalité en bon accord avec ceux déterminés par la même formule basée sur des valeurs de Q_α déduites des tables de Moller et les demi-vies obtenues dans le cadre de l'approximation WKB employant des valeurs de Q_α déterminées à partir des masses de KUTY. Ce calcul a montré que la théorie est en accord avec les différentes approches théoriques. Certains noyaux sont instables et se désintègrent en émettant une particule alpha, quant aux autres, la demi-vie est beaucoup plus grande ce qui fait que ces noyaux sont stables par rapport à la désintégration alpha et se désintègrent probablement par fission spontanée.

Notons enfin que la conception d'expériences en vue d'identifier de nouveaux éléments dépend des demi-vies de ces derniers. Dans ce sens, les présents résultats pourraient servir de guide aux expérimentateurs qui conçoivent des expériences pour identifier des noyaux super lourds.

Réciproquement, l'étude microscopique que nous avons réalisée a besoin de s'appuyer sur des résultats expérimentaux. En effet, la disponibilité des données expérimentales permettrait de raffiner notre approche de sorte à la rendre plus réaliste et augmenter ainsi son pouvoir prédictif. Il sera ainsi possible de décrire d'une manière rigoureuse les noyaux dans des régions non encore explorées et de mieux comprendre leurs propriétés.

Annexe A

Théorème de Thouless

Pour le calcul du commutateur $[a_\alpha, \exp(\frac{1}{2} \sum_{\nu\mu} M_{\nu\mu} a_\nu^\dagger a_\mu^\dagger)]$, on utilise la formule de Glauber [68] :

Soit A et B deux opérateurs qui commutent avec leur commutateur $[A, B]$ alors :

$$\exp(A) \exp(B) = \exp(A + B) \exp\left(\frac{1}{2}[A, B]\right) \quad (\text{A.1})$$

Soit $f(t)$ un opérateur, définit comme une fonction qui dépend de la variable réelle t par :

$$f(t) = \exp(At) \exp(Bt) \quad (\text{A.2})$$

Dérivons cette expression par rapport à t :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} f(t) &= A \exp(At) \exp(Bt) + \exp(At) B \exp(Bt) \\ &= [A + \exp(At) B \exp(-At)] f(t) \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

puisque A et B commutent avec $[A, B]$, on a :

$$[A, f(B)] = [A, B] f'(B) \quad (\text{A.4})$$

Dans ce cas :

$$[\exp(At), B] = t[A, B] \exp(At) \quad (\text{A.5})$$

ce qui implique que :

$$\exp(At) B = B \exp(At) + t[A, B] \exp(At) \quad (\text{A.6})$$

Multiplions les deux membres par $\exp(-At)$, il vient que :

$$\frac{d}{dt}f(t) = (A + B + t[A, B])f(t) \quad (\text{A.7})$$

par hypothèse $A + B$ commute aussi avec $[A, B]$, dans ce cas il est possible d'intégrer l'expression (A.7) comme si $A + B$ et $[A, B]$ sont des nombres, il vient que :

$$f(t) = f(0) \exp(\{A + B\}t + \frac{1}{2}[A, B]t^2) \quad (\text{A.8})$$

pour $t = 0$, on a :

$$f(0) = I \quad (\text{A.9})$$

pour $t = 1$, on a bien : $\exp(A) \exp(B) = \exp(A + B) \exp(\frac{1}{2}[A, B])$.

on a :

$$\begin{aligned} \alpha &= U^\dagger a + V^\dagger a^\dagger \\ &= U^\dagger (a + U^{\dagger-1} V^\dagger a^\dagger) \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

posons :

$$M = (VU^{-1})^* = -\rho\kappa^{*-1} \quad (\text{A.11})$$

c'est une matrice antisymétrique.

il vient que :

$$\alpha = U^\dagger (a + M^\dagger a^\dagger) \quad (\text{A.12})$$

$$\begin{aligned} [a_l, \exp(\frac{1}{2} \sum_{\nu\mu} M_{\nu\mu} a_\nu^\dagger a_\mu^\dagger)] &= (a_l \frac{1}{2} \sum_{\nu\mu} M_{\nu\mu} a_\nu^\dagger a_\mu^\dagger - \frac{1}{2} \sum_{\nu\mu} M_{\nu\mu} a_\nu^\dagger a_\mu^\dagger a_l) \exp(\frac{1}{2} \sum_{\nu\mu} M_{\nu\mu} a_\nu^\dagger a_\mu^\dagger) \\ &= \{\frac{1}{2} \sum_{\nu\mu} M_{\nu\mu} (a_l a_\nu^\dagger a_\mu^\dagger - a_\nu^\dagger a_\mu^\dagger a_l)\} \exp(\frac{1}{2} \sum_{\nu\mu} M_{\nu\mu} a_\nu^\dagger a_\mu^\dagger) \\ &= \{\frac{1}{2} \sum_{\nu\mu} M_{\nu\mu} \delta_{l\nu} a_\mu^\dagger\} \exp(\frac{1}{2} \sum_{\nu\mu} M_{\nu\mu} a_\nu^\dagger a_\mu^\dagger) \\ &= \{\frac{1}{2} \sum_{\mu} M_{l\mu} a_\mu^\dagger\} \exp(\frac{1}{2} \sum_{\nu\mu} M_{\nu\mu} a_\nu^\dagger a_\mu^\dagger) \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

Dans ce cas là :

$$\alpha |\Psi_{HFB}\rangle = U^\dagger (M a^\dagger |\Psi_{HFB}\rangle + M^\dagger a^\dagger |\Psi_{HFB}\rangle) = 0 \quad (\text{A.14})$$

Donc $|\Psi_{HFB}\rangle$ est un vrai vide de quasi-particules.

Annexe B

Propriétés des solutions de Hartree-Fock : symétrie

Dans l'espace des coordonnées, on définit les états propres $|\lambda\rangle$ de l'hamiltonien \hat{h}_{HF} par leurs projections sur la base formée de N vecteurs orthonormés $\{|i\rangle\}$, dans ce cas là on obtient N vecteurs (états) des équations de Hartree-Fock parmi lesquels il y a seulement un nombre $A \leq N$ d'états qui sont occupés dans l'état $|\Phi_{HF}\rangle$ [21].

Cette base choisie va faire apparaître de nouvelles symétries, différentes, non seulement pour \hat{h}_{HF} , mais aussi pour les états $|\lambda\rangle$ et $|\Phi_{HF}\rangle$, que ne possède pas notre système ainsi que ses états propres $|\Psi\rangle$. Cette différence est dû au fait que les symétries de \hat{h}_{HF} dépendent de la nature des orbitales occupées.

On choisit le fait que les orbitales possèdent une symétrie axiale suivant l'axe \vec{z} , on obtient par projection :

$$|\lambda\rangle = \sum_j c_j^\lambda |jm_\lambda\tau_\lambda\rangle \quad (\text{B.1})$$

\hat{h}_{HF} commutent avec \hat{J}_z . A cet effet il existe un système de solutions pour les équations de Hartree-Fock qui est constitué des orbitales $|\lambda\rangle$, satisfaisant à la symétrie axiale appelée symétrie self-consistante à condition d'exister initialement, et que l'on retrouvera à la fin du calcul, il vient que :

$$\hat{J}_z |\Phi_{HF}\rangle = M |\Phi_{HF}\rangle = \left(\sum_{\lambda \in \Phi} m_\lambda \right) |\Phi_{HF}\rangle \quad (\text{B.2})$$

A présent, on veut connaître d'avantage de ces symétries, car en plus de la simplification des calculs qu'elles apportent, elles permettent aussi de vérifier la validité des résultats

qui repose sur les hypothèses de départ.

La première étape consiste à démontrer le théorème suivant :

Soit $\hat{\Omega}$ un opérateur, si $\hat{\Omega}$ commute avec l'hamiltonien total \hat{H} du système et laisse invariant l'ensemble des états occupés, alors $\hat{\Omega}$ commute avec l'hamiltonien de Hartree-Fock \hat{h}_{HF} .

$\hat{\Omega}$ laisse invariant l'ensembles des états occupés, c'est à dire que $\hat{\Omega}$ appliqué à n'importe quel état $|\lambda\rangle$, ce dernier va s'écrire comme une combinaison linéaire de sous-états occupés :

$$\hat{\Omega}|\lambda\rangle = \sum_{\lambda'} \Omega_{\lambda\lambda'} |\lambda'\rangle \quad (\text{B.3})$$

et l'action de $\hat{\Omega}$ sur $|\Phi_{HF}\rangle$ est donnée par :

$$\hat{\Omega}|\Phi_{HF}\rangle = \omega |\Phi_{HF}\rangle \quad (\text{B.4})$$

Il est claire que $|\Phi_{HF}\rangle$ est un état propre de $\hat{\Omega}$ avec la valeur propre ω .

En effet, soit \hat{H} l'hamiltonien total du système :

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = \sum_i t_i + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} v_{ij} \quad (\text{B.5})$$

Par hypothèse $\hat{\Omega} = \sum_i \omega_i$ un opérateur qui commute avec \hat{T} et \hat{V} :

$$[\hat{T}, \hat{\Omega}] = [\hat{V}, \hat{\Omega}] = 0 \quad (\text{B.6})$$

En supposant que $\hat{\Omega}$ laisse invariant l'ensemble formé par les états occupés on démontre que $\hat{\Omega}$ commute avec \hat{h}_{HF} .

Soit maintenant \hat{h}_{HF} l'hamiltonien de Hartree-Fock :

$$\hat{h}_{HF} = \hat{t} + \hat{v} \quad (\text{B.7})$$

$$\hat{v} = \sum_{\lambda} \langle i\lambda | v | j\lambda \rangle.$$

$\hat{\Omega}$ commute avec \hat{T} donc il commute forcément avec \hat{t} .

Puisque $\hat{\Omega}$ commute avec \hat{V} , alors :

$$\langle i\lambda | v\omega | k\mu \rangle = \langle i\lambda | \omega v | k\mu \rangle \quad (\text{B.8})$$

v et ω commutent.

En introduisant la relation de fermeture sur $\langle i\lambda|v\omega|k\mu\rangle$:

$$\sum_{j\lambda'} |j\lambda'\rangle \langle j\lambda'| = 1 \quad (\text{B.9})$$

$\langle i\lambda|v\omega|k\mu\rangle$ s'écrit :

$$\langle i\lambda|v\omega|k\mu\rangle = \sum_{j\lambda'} \langle i\lambda|v|j\lambda'\rangle \langle j\lambda'|\omega|k\mu\rangle = \sum_j \langle i\lambda|v|j\mu\rangle \omega_{jk} + \sum_{\lambda'} \langle i\lambda|v|k\lambda'\rangle \omega_{\lambda'\mu} \quad (\text{B.10})$$

on obtient :

$$\sum_{\lambda} \langle i\lambda|v\omega|k\mu\rangle = \sum_{j\lambda} \langle i\lambda|v|j\lambda\rangle \omega_{jk} + \sum_{\lambda\lambda'} \langle i\lambda|v|k\lambda'\rangle \omega_{\lambda'\lambda} = \sum_j \hat{v}_{ij} \omega_{jk} + \sum_{\lambda\lambda'} \langle i\lambda|v|k\lambda'\rangle \omega_{\lambda'\lambda} \quad (\text{B.11})$$

$\langle i\lambda|\omega v|k\mu\rangle$ s'écrit :

$$\langle i\lambda|\omega v|k\mu\rangle = \sum_{l\lambda'} \langle i\lambda|v|l\lambda'\rangle \langle l\lambda'|\omega|k\mu\rangle = \sum_l \omega_{il} \langle l\lambda|v|k\mu\rangle + \sum_{\mu'} \omega_{\lambda\mu'} \langle i\mu'|v|k\mu\rangle \quad (\text{B.12})$$

on obtient :

$$\sum_{\lambda} \langle i\lambda|\omega v|k\mu\rangle = \sum_{l\lambda} \omega_{il} \langle l\lambda|v|k\mu\rangle + \sum_{\mu\mu'} \omega_{\mu\mu'} \langle i\mu'|v|k\mu\rangle = \sum_l \omega_{il} \hat{v}_{lk} + \sum_{\mu\mu'} \omega_{\mu\mu'} \langle i\mu'|v|k\mu\rangle \quad (\text{B.13})$$

En utilisant l'égalité des deux dernières sommes dans les relations (B.11) et (B.13), pour $\mu = \lambda$ (l'ensemble des orbitales occupées reste invariant sous l'action de $\hat{\Omega}$).

on obtient :

$$\sum_j \hat{v}_{ij} \omega_{jk} = \sum_l \omega_{il} \hat{v}_{lk} \implies \hat{v}\omega = \omega\hat{v} \quad (\text{B.14})$$

On parvient enfin à écrire que :

$$[\hat{h}_{HF}, \hat{\Omega}] = 0 \quad (\text{B.15})$$

B.1 Quelques cas concernant la symétrie et la conservation des observables

La symétrie axiale selon \vec{z}

Etant donné que l'espace est considéré isotrope, cela fait que l'hamiltonien total du système \hat{H} commute avec l'opérateur \hat{J}_z , dans ce cas là si les états occupés sont états propres de \hat{J}_z alors \hat{J}_z les laissent invariant ce qui implique que :

$$[\hat{h}_{HF}, \hat{J}_z] = 0 \quad (\text{B.16})$$

\hat{J}_z commute avec \hat{h} .

La symétrie axiale selon \vec{y}

On suppose que la symétrie axiale selon \vec{z} soit réalisée. Il vient que, à tout état occupé donné par (B.1) il correspond un autre état occupé, créé par la transformation suivante :

$$|-\lambda\rangle = \hat{\mathcal{R}}_y(\pi) |\lambda\rangle = \sum_j c_j^\lambda \exp[i\pi(j - m_\lambda)] |j - m_\lambda \tau_\lambda\rangle \quad (\text{B.17})$$

$\hat{\mathcal{R}}_y(\pi)$: est la rotation d'un angle π autour de l'axe \vec{y} .

Puisque les deux états sont occupés, cette transformation laisse invariante les orbites occupées :

$$\hat{\mathcal{R}}_y(\pi) |-\lambda\rangle = (-1)^{2j} |\lambda\rangle = -|\lambda\rangle \quad (\text{B.18})$$

Puisque \hat{J}_z commute avec \hat{H} , alors $\hat{\mathcal{R}}_y(\pi)$ commute aussi avec \hat{H} .

Il en résulte que $\hat{\mathcal{R}}_y(\pi)$ commute aussi avec \hat{h}_{HF} , ainsi on trouve un résultat très important qui fait que la solution de l'équation de Hartree-Fock pour des noyaux pair-pair possède la symétrie suivante :

$$\hat{\mathcal{R}}_y(\pi) |\Phi_{HF}\rangle = |\Phi_{HF}\rangle \quad (\text{B.19})$$

aussi bien que :

$$\hat{\mathcal{R}}_y(\pi) |\Phi_{HF}\rangle = -|\Phi_{HF}\rangle \quad (\text{B.20})$$

La symétrie de l'isospin

L'indépendance de charge laisse supposer que les états occupés restent invariant sous l'action de l'opérateur τ_z ce qui fait que h commute avec l'opérateur de l'isospin \hat{T}_z tout en couplant les états de même isospin :

$$\hat{T}_z = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^A (\tau_z)_i \quad (\text{B.21})$$

Dans ce cas là, $|\Phi_{HF}\rangle$ est fonction propre de \hat{T}_z .

Conservation de la parité

La conservation de la parité est construite d'après le postulat suivant :

Les états possèdent une parité bien définie. Dans ce cas, l'opérateur parité laisse invariant l'ensemble des états occupés ce qui fait que l'hamiltonien \hat{h} conserve aussi la parité totale en couplant les états de même parité.

Annexe C

Paramètres de l'interaction de Skyrme et d'appariement

Les différents paramètres de la fonctionnelle de Skyrme sont résultat de la transformation suivante [30] :

$$\begin{pmatrix} t_1 \\ t_1 x_1 \\ t_2 \\ t_2 x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{4}{3} & \frac{8}{3} & -\frac{2}{3} & -\frac{4}{3} \\ -\frac{2}{3} & -\frac{4}{3} & \frac{4}{3} & \frac{8}{3} \\ 4 & -\frac{8}{3} & 2 & -\frac{4}{3} \\ -2 & \frac{4}{3} & -4 & \frac{8}{3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b'_1 \\ b'_2 \end{pmatrix} \quad (\text{C.1})$$

et de :

$$\begin{aligned} t_0 &= \frac{4}{3}b_0 - \frac{2}{3}b'_0 \\ t_0 x_0 &= -\frac{2}{3}b_0 + \frac{4}{3}b'_0 \\ t_3 &= \frac{16}{3}b_3 - \frac{8}{3}b'_3 \\ t_3 x_3 &= -\frac{8}{3}b_3 + \frac{16}{3}b'_3 \\ t_4 &= 2b_4 = 2b'_4 \end{aligned}$$

on obtien enfin les paramètres de la fonctionnelle de Skyrme :

$$\begin{aligned} b_0 &= t_0 \left(1 + \frac{1}{2}x_0\right) \\ b'_0 &= t_0 \left(\frac{1}{2} + x_0\right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
b_1 &= \frac{1}{4}[t_1(1 + \frac{1}{2}x_1) + t_2(1 + \frac{1}{2}x_2)] \\
b'_1 &= \frac{1}{4}[t_1(\frac{1}{2} + x_1) - t_2(\frac{1}{2} + x_2)] \\
b_2 &= \frac{1}{8}[3t_1(1 + \frac{1}{2}x_1) - t_2(1 + \frac{1}{2}x_2)] \\
b'_2 &= \frac{1}{8}[3t_1(\frac{1}{2} + x_1) + t_2(\frac{1}{2} + x_2)] \\
b_3 &= \frac{1}{4}t_3(1 + \frac{1}{2}x_3) \\
b'_3 &= \frac{1}{4}t_3(\frac{1}{2} + x_3) \\
b_4 &= \frac{1}{2}W_0 = b'_4
\end{aligned}$$

Les paramètres sont ajustés expérimentalement selon le type de propriétés nucléaires :

Paramètres de l'interaction de Skyrme [12, 13, 58] :

Force	SkP	SLy4	Sly6	SkM*
$t_0(MeV fm^3)$	-2931.6960000	-2488.91	-2479.50	-2645.00
$t_1(MeV fm^5)$	320.6182000	486.82	462.18	410.00
$t_2(MeV fm^5)$	-337.4091000	-546.39	-448.61	-135.00
$t_3(MeV fm^{3+3\alpha})$	18708.9600000	13777.0	13673.0	15595.0
x_0	0.2921515	0.834	0.825	0.090
x_1	0.6531765	-0.344	-0.465	0.000
x_2	-0.5373230	-1.000	-1.000	0.000
x_3	0.1810269	1.354	1.355	0.000
α	$\frac{1}{6}$	$\frac{1}{6}$	$\frac{1}{6}$	$\frac{1}{6}$
W_0	100.0	123.0	122.0	130.0

Les paramètres de l'interaction d'appariement sont :

$\rho_0 = 0.16 fm^{-3}$: Densité de saturation.

$\gamma = 1.0$: Paramètre de contrôle de la force d'appariement.

$V_0 = -201.500000$: Potentiel phénoménologiquement ajusté.

$\eta = 0.5$: Coefficient spécifiant l'interaction.

Annexe D

Calcul des différents termes de la fonctionnelle de Skyrme

Dans cette partie les termes de la fonctionnelle de Skyrme seront établis explicitement.

L'espace des états est invariant par renversement du sens du temps [32]. L'opérateur correspondant s'écrit :

$$\hat{T} = -i\sigma_y K_0 \quad (\text{D.1})$$

K_0 est l'opérateur conjugaison complexe.

La fonction d'onde à particule indépendante est donnée par :

$$\begin{aligned} \Phi_i(\vec{r}, \sigma, \tau) &= \langle \vec{r} \sigma \tau | \hat{T} | i \rangle \\ &= \langle \vec{r} \sigma \tau | -i\sigma_y K_0 | i \rangle \end{aligned} \quad (\text{D.2})$$

en introduisant la relation de fermeture :

$$\int \vec{dr}' \sum_{\sigma' \tau'} |\vec{r}' \sigma' \tau'\rangle \langle \vec{r}' \sigma' \tau'| = 1 \quad (\text{D.3})$$

on a :

$$\Phi_i(\vec{r}, \sigma, \tau) = -i \langle \vec{r} \sigma \tau | \sigma_y \sum_{\vec{r}' \sigma' \tau'} |\vec{r}' \sigma' \tau'\rangle \langle \vec{r}' \sigma' \tau'| K_0 | i \rangle \quad (\text{D.4})$$

et sachant que :

$$\langle \vec{r}' \sigma' \tau' | i \rangle = \Phi_i^*(\vec{r}', \sigma', \tau') \quad (\text{D.5})$$

on aura donc :

$$\Phi_{\vec{i}}(\vec{r}, \sigma, \tau) = -i \sum_{i\sigma'\tau'} \langle \vec{r} \sigma \tau | \sigma_y | \vec{r}' \sigma' \tau' \rangle \Phi_{\vec{i}}^*(\vec{r}', \sigma', \tau') \quad (\text{D.6})$$

la sommation se restreint à la partie concernant l'échange de spin ce qui conduit à :

$$\Phi_{\vec{i}}(\vec{r}, \sigma, \tau) = -i \sum_{i\sigma'\tau'} \langle \vec{r} \sigma \tau | \sigma_y | \vec{r}' \sigma' \tau' \rangle \Phi_{\vec{i}}^*(\vec{r}', \sigma', \tau') \quad (\text{D.7})$$

on trouve :

$$\Phi_{\vec{i}}(\vec{r}, \sigma, \tau) = -2\sigma \Phi_{\vec{i}}^*(\vec{r}, -\sigma, \tau) \quad (\text{D.8})$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \sum_{ij} V_{ij} &= \langle ij | V_{12} | ij \rangle_{antisym} \\ &= \frac{1}{4} \sum_{ij} \langle ij | (1 - \hat{P}) V_{12} (1 - \hat{P}) | ij \rangle \\ &= \frac{1}{4} \sum_{ij} \langle ij | (1 - \hat{P})^2 V_{12} | ij \rangle \\ &= \frac{1}{4} \sum_{ij} \langle ij | (1 - 2\hat{P} + 1) V_{12} | ij \rangle \\ &= \frac{1}{2} \sum_{ij} \langle ij | (1 - \hat{P}) V_{12} | ij \rangle \end{aligned} \quad (\text{D.9})$$

$$\frac{1}{2} \sum_{ij} V_{ij} = \frac{1}{2} \sum_{ij} \langle ij | V_{12} (1 - \hat{P}_{\sigma} \delta_{\tau\tau'}) | ij \rangle \quad (\text{D.10})$$

Calcul du terme en t_0 [69] :

$$\begin{aligned} \int \mathcal{H}_0(\vec{r}) d\vec{r} &= \frac{1}{2} \sum_{ij} \langle ij | t_0 (1 + x_0 \hat{P}_{\sigma}) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) (1 - \hat{P}_{\sigma} \delta_{\tau\tau'}) | ij \rangle \\ &= \frac{t_0}{2} \sum_{ij} \langle ij | (1 + \frac{x_0}{2}) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) - (\frac{1}{2} + x_0) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \delta_{\tau\tau'} \\ &\quad + \frac{x_0}{2} \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) (\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2) - \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) (\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2) \delta_{\tau\tau'} | ij \rangle \end{aligned} \quad (\text{D.11})$$

Le premier terme de l'expression donne :

$$\frac{t_0}{2} \sum_{ij} \langle ij | (1 + \frac{x_0}{2}) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) | ij \rangle = \frac{t_0}{2} (1 + \frac{x_0}{2}) \sum_{ij\sigma\sigma'\tau\tau'} \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \quad (\text{D.12})$$

$$\begin{aligned} & \Phi_i^*(\vec{r}_1\sigma\tau)\Phi_j^*(\vec{r}_2\sigma'\tau')\Phi_i(\vec{r}_1\sigma\tau)\Phi_j(\vec{r}_2\sigma'\tau') \\ &= \frac{t_0}{2} (1 + \frac{x_0}{2}) \int d\vec{r} \sum_{i\sigma\tau} |\Phi_i(\vec{r}_1\sigma\tau)|^2 \sum_{j\sigma'\tau'} |\Phi_j(\vec{r}_2\sigma'\tau')|^2 \\ &= \frac{t_0}{2} (1 + \frac{x_0}{2}) \int d\vec{r} \rho^2(\vec{r}) \end{aligned} \quad (\text{D.13})$$

Le deuxième terme donne :

$$-\frac{t_0}{2} \sum_{ij} \langle ij | (\frac{1}{2} + x_0) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \delta_{\tau\tau'} | ij \rangle = -\frac{t_0}{2} (\frac{1}{2} + x_0) \sum_{ij\sigma\sigma'\tau\tau'} \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \delta_{\tau\tau'} \quad (\text{D.14})$$

$$\begin{aligned} & \Phi_i^*(\vec{r}_1\sigma\tau)\Phi_j^*(\vec{r}_2\sigma'\tau')\Phi_i(\vec{r}_1\sigma\tau)\Phi_j(\vec{r}_2\sigma'\tau') \\ &= -\frac{t_0}{2} (\frac{1}{2} + x_0) \int d\vec{r} \sum_{\tau} \sum_{i\sigma} |\Phi_i(\vec{r}_1\sigma\tau)|^2 \sum_{j\sigma'} |\Phi_j(\vec{r}_2\sigma'\tau')|^2 \\ &= -\frac{t_0}{2} (\frac{1}{2} + x_0) \int d\vec{r} \sum_{\tau} \rho_{\tau}^2(\vec{r}) \end{aligned}$$

on choisit de traiter les neutrons et les protons séparément, il vient que :

$$-\frac{t_0}{2} \sum_{ij} \langle ij | (\frac{1}{2} + x_0) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \delta_{\tau\tau'} | ij \rangle = -\frac{t_0}{2} (\frac{1}{2} + x_0) \int d\vec{r} \{ \rho_n^2(\vec{r}) + \rho_p^2(\vec{r}) \} \quad (\text{D.15})$$

Le troisième terme donne, en tenant compte de la relation suivante :

$$\sum_{i\sigma\sigma'} \Phi_i^*(\vec{r}, \sigma) \langle \sigma | \vec{\sigma} | \sigma \rangle \Phi_i(\vec{r}, \sigma) = \frac{1}{2} \rho_{\tau}(\vec{r}) \sum_{i\sigma\sigma'} \langle \sigma | \vec{\sigma} | \sigma \rangle = \frac{1}{2} \rho_{\tau}(\vec{r}) \text{tr}(\vec{\sigma}) = 0 \quad (\text{D.16})$$

il vient que :

$$\frac{t_0}{2} \sum_{ij} \langle ij | \frac{x_0}{2} \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) (\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2) | ij \rangle = \frac{t_0 x_0}{4} \sum_{ij\sigma\sigma'\tau\tau'} \langle ij\sigma\sigma'\tau\tau' | \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) (\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2) | ij\sigma\sigma'\tau\tau' \rangle = 0 \quad (\text{D.17})$$

de la même façon pour le quatrième terme qui donne :

$$-\frac{t_0}{2} \sum_{ij} \langle ij | \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) (\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2) \delta_{\tau\tau'} | ij \rangle \quad (\text{D.18})$$

$$= -\frac{t_0}{2} \sum_{ij\sigma\sigma'\tau\tau'} \langle ij\sigma\sigma'\tau\tau' | \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) (\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2) \delta_{\tau\tau'} | ij\sigma\sigma'\tau\tau' \rangle = 0 \quad (\text{D.19})$$

en rassemblant les termes, on a :

$$\int \mathcal{H}_0(\vec{r}) d\vec{r} = \frac{t_0}{4} \int d\vec{r} [(1 + \frac{x_0}{2}) \rho^2(\vec{r}) - (\frac{1}{2} + x_0) \{\rho_n^2(\vec{r}) + \rho_p^2(\vec{r})\}] \quad (\text{D.20})$$

et enfin :

$$\mathcal{H}_0(\vec{r}) = \frac{t_0}{4} [(1 + \frac{x_0}{2}) \rho^2(\vec{r}) - (\frac{1}{2} + x_0) \{\rho_n^2(\vec{r}) + \rho_p^2(\vec{r})\}] \quad (\text{D.21})$$

Calcul du terme en t_1 :

$$\int \mathcal{H}_1(\vec{r}) d\vec{r} = \frac{1}{2} \sum_{ij} \langle ij | \frac{t_1}{2} (1 + x_1 \hat{P}_\sigma) \{ \vec{K}_{12}^2 + \overleftarrow{K}_{12}^2 \} \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) (1 - \hat{P}_\sigma \delta_{\tau,\tau'}) | ij \rangle \quad (\text{D.22})$$

$$= -\frac{1}{16} t_1 \sum_{ij} \langle ij | (\vec{\nabla}_1^2 + \vec{\nabla}_2^2 + \overleftarrow{\nabla}_1^2 + \overleftarrow{\nabla}_2^2 - 2\vec{\nabla}_1 \vec{\nabla}_2 - 2\overleftarrow{\nabla}_1 \overleftarrow{\nabla}_2) [(1 + \frac{x_1}{2}) - (\frac{1}{2} + x_1) \delta_{\tau\tau'} + \frac{x_1}{2} (\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2) - (\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2) \delta_{\tau\tau'}] \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) | ij \rangle \quad (\text{D.23})$$

$$\begin{aligned} -\frac{1}{16} t_1 \sum_{ij} \langle ij | (1 + \frac{x_1}{2}) \vec{\nabla}_1^2 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) | ij \rangle &= -\frac{1}{16} t_1 (1 + \frac{x_1}{2}) \int d\vec{r} \Phi_i^*(\vec{r}_1 \sigma \tau) \vec{\nabla}_1^2 \Phi_i(\vec{r}_1 \sigma \tau) \rho(\vec{r}) \\ &= -\frac{1}{16} t_1 (1 + \frac{x_1}{2}) \int d\vec{r} \rho(\vec{r}) \{ \frac{1}{2} \vec{\nabla}_1^2 \rho(\vec{r}) - t(\vec{r}) \} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} -\frac{1}{16} t_1 \sum_{ij} \langle ij | (1 + \frac{x_1}{2}) \vec{\nabla}_2^2 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) | ij \rangle &= -\frac{1}{16} t_1 (1 + \frac{x_1}{2}) \int d\vec{r} \Phi_i^*(\vec{r}_1 \sigma \tau) \vec{\nabla}_2^2 \Phi_i(\vec{r}_1 \sigma \tau) \rho(\vec{r}) \\ &= -\frac{1}{16} t_1 (1 + \frac{x_1}{2}) \int d\vec{r} \rho(\vec{r}) \{ \frac{1}{2} \vec{\nabla}_2^2 \rho(\vec{r}) - t(\vec{r}) \} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
-\frac{1}{16}t_1 \sum_{ij} \langle ij | (1 + \frac{x_1}{2}) \overleftarrow{\nabla}_1^2 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) | ij \rangle &= -\frac{1}{16}t_1(1 + \frac{x_1}{2}) \int \vec{dr} \Phi_i^*(\vec{r}_1 \sigma \tau) \overleftarrow{\nabla}_1^2 \Phi_i(\vec{r}_1 \sigma \tau) \rho(\vec{r}) \\
&= -\frac{1}{16}t_1(1 + \frac{x_1}{2}) \int \vec{dr} \rho(\vec{r}) \{ \frac{1}{2} \overleftarrow{\nabla}_1^2 \rho(\vec{r}) - t(\vec{r}) \}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
-\frac{1}{16}t_1 \sum_{ij} \langle ij | (1 + \frac{x_1}{2}) \overleftarrow{\nabla}_2^2 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) | ij \rangle &= -\frac{1}{16}t_1(1 + \frac{x_1}{2}) \int \vec{dr} \Phi_i^*(\vec{r}_1 \sigma \tau) \overleftarrow{\nabla}_2^2 \Phi_i(\vec{r}_1 \sigma \tau) \rho(\vec{r}) \\
&= -\frac{1}{16}t_1(1 + \frac{x_1}{2}) \int \vec{dr} \rho(\vec{r}) \{ \frac{1}{2} \overleftarrow{\nabla}_2^2 \rho(\vec{r}) - t(\vec{r}) \}
\end{aligned}$$

$$-\frac{1}{16}t_1 \sum_{ij} \langle ij | (1 + \frac{x_1}{2}) (-2 \overrightarrow{\nabla}_1 \overrightarrow{\nabla}_2) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) | ij \rangle = \frac{1}{8}t_1(1 + \frac{x_1}{2}) \int \vec{dr} (\overrightarrow{\nabla} \rho(\vec{r}))^2$$

$$-\frac{1}{16}t_1 \sum_{ij} \langle ij | (1 + \frac{x_1}{2}) (-2 \overleftarrow{\nabla}_1 \overleftarrow{\nabla}_2) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) | ij \rangle = \frac{1}{8}t_1(1 + \frac{x_1}{2}) \int \vec{dr} (\overleftarrow{\nabla} \rho(\vec{r}))^2$$

$$\frac{1}{16}t_1 \sum_{ij} \langle ij | (\frac{1}{2} + x_1) \delta_{\tau\tau'} \overrightarrow{\nabla}_1^2 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) | ij \rangle = \frac{1}{16}t_1(\frac{1}{2} + x_1) \int \vec{dr} \sum_{\tau} \{ \frac{1}{2} \overrightarrow{\nabla}_1^2 \rho_{\tau}(\vec{r}) - t_{\tau}(\vec{r}) \}$$

$$\frac{1}{16}t_1 \sum_{ij} \langle ij | (\frac{1}{2} + x_1) \delta_{\tau\tau'} \overleftarrow{\nabla}_2^2 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) | ij \rangle = \frac{1}{16}t_1(\frac{1}{2} + x_1) \int \vec{dr} \sum_{\tau} \{ \frac{1}{2} \overleftarrow{\nabla}_2^2 \rho_{\tau}(\vec{r}) - t_{\tau}(\vec{r}) \}$$

$$\frac{1}{16}t_1 \sum_{ij} \langle ij | (\frac{1}{2} + x_1) \delta_{\tau\tau'} \overleftarrow{\nabla}_1^2 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) | ij \rangle = \frac{1}{16}t_1(\frac{1}{2} + x_1) \int \vec{dr} \sum_{\tau} \{ \frac{1}{2} \overleftarrow{\nabla}_1^2 \rho_{\tau}(\vec{r}) - t_{\tau}(\vec{r}) \}$$

$$\frac{1}{16}t_1 \sum_{ij} \langle ij | (\frac{1}{2} + x_1) \delta_{\tau\tau'} \overrightarrow{\nabla}_2^2 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) | ij \rangle = \frac{1}{16}t_1(\frac{1}{2} + x_1) \int \vec{dr} \sum_{\tau} \{ \frac{1}{2} \overrightarrow{\nabla}_2^2 \rho_{\tau}(\vec{r}) - t_{\tau}(\vec{r}) \}$$

$$\frac{1}{16}t_1 \sum_{ij} \langle ij | (\frac{1}{2} + x_1) \delta_{\tau\tau'} (-2 \overrightarrow{\nabla}_1 \overrightarrow{\nabla}_2) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) | ij \rangle = -\frac{1}{8}t_1(\frac{1}{2} + x_1) \int \vec{dr} \{ (\overrightarrow{\nabla} \rho_n(\vec{r}))^2 + (\overrightarrow{\nabla} \rho_p(\vec{r}))^2 \}$$

$$\frac{1}{16}t_1 \sum_{ij} \langle ij | (\frac{1}{2} + x_1) \delta_{\tau\tau'} (-2 \overleftarrow{\nabla}_1 \overleftarrow{\nabla}_2) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) | ij \rangle = -\frac{1}{8}t_1(\frac{1}{2} + x_1) \int \vec{dr} \{ (\overleftarrow{\nabla} \rho_n(\vec{r}))^2 + (\overleftarrow{\nabla} \rho_p(\vec{r}))^2 \}$$

$$-\frac{1}{16}t_1 \sum_{ij} \langle ij | \frac{x_1}{2} (\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2) \overrightarrow{\nabla}_1^2 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) | ij \rangle = 0$$

$$-\frac{1}{16}t_1 \sum_{ij} \langle ij | \frac{x_1}{2} (\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2) \overleftarrow{\nabla}_2^2 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) | ij \rangle = 0$$

$$-\frac{1}{16}t_1 \sum_{ij} \langle ij | \frac{x_1}{2} (\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2) \overleftarrow{\nabla}_1^2 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) | ij \rangle = 0$$

$$-\frac{1}{16}t_1 \sum_{ij} \langle ij | \frac{x_1}{2} (\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2) \overrightarrow{\nabla}_2^2 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) | ij \rangle = 0$$

En utilisant la relation suivante [18, 69] :

$$\begin{aligned}
\vec{\nabla}_1 \vec{\nabla}_2 (\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2) &= \frac{1}{3} (\vec{\nabla}_1 \vec{\sigma}_1) (\vec{\nabla}_2 \vec{\sigma}_2) + \frac{1}{2} (\vec{\nabla}_1 \times \vec{\sigma}_1) (\vec{\nabla}_2 \times \vec{\sigma}_2) + \sqrt{5} [(\vec{\nabla}_1 \times \vec{\sigma}_1)^{(2)} (\vec{\nabla}_2 \times \vec{\sigma}_2)^{(2)}]^0 \\
&\quad \text{(D.24)} \\
-\frac{1}{16} t_1 \sum_{ij} \langle ij | \frac{x_1}{2} (-2 \vec{\nabla}_1 \vec{\nabla}_2) (\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) | ij \rangle &= \frac{1}{32} t_1 x_1 \int \vec{dr} \vec{J}^2 \\
-\frac{1}{16} t_1 \sum_{ij} \langle ij | \frac{x_1}{2} (-2 \overleftarrow{\nabla}_1 \overleftarrow{\nabla}_2) (\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) | ij \rangle &= \frac{1}{32} t_1 x_1 \int \vec{dr} \vec{J}^2 \\
-\frac{1}{16} t_1 \sum_{ij} \langle ij | \frac{1}{2} (\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2) \delta_{\tau\tau'} \overleftarrow{\nabla}_1^2 (\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2) \delta_{\tau\tau'} \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) | ij \rangle &= 0 \\
-\frac{1}{16} t_1 \sum_{ij} \langle ij | \frac{1}{2} \overleftarrow{\nabla}_2^2 (\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2) \delta_{\tau\tau'} \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) | ij \rangle &= 0 \\
-\frac{1}{16} t_1 \sum_{ij} \langle ij | \frac{1}{2} \overleftarrow{\nabla}_1^2 (\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2) \delta_{\tau\tau'} \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) | ij \rangle &= 0 \\
-\frac{1}{16} t_1 \sum_{ij} \langle ij | \frac{1}{2} \overleftarrow{\nabla}_2^2 (\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2) \delta_{\tau\tau'} \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) | ij \rangle &= 0 \\
-\frac{1}{16} t_1 \sum_{ij} \langle ij | (2 \vec{\nabla}_1 \vec{\nabla}_2) (\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2) \delta_{\tau\tau'} \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) | ij \rangle &= -\frac{1}{8} t_1 \int \vec{dr} \sum_{\tau} \vec{J}_{\tau}^2 \\
&= -\frac{1}{8} t_1 \int \vec{dr} \{ \vec{J}_n^2 + \vec{J}_p^2 \} \\
-\frac{1}{16} t_1 \sum_{ij} \langle ij | (2 \overleftarrow{\nabla}_1 \overleftarrow{\nabla}_2) (\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2) \delta_{\tau\tau'} \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) | ij \rangle &= -\frac{1}{8} t_1 \int \vec{dr} \sum_{\tau} \vec{J}_{\tau}^2 \\
&= -\frac{1}{8} t_1 \int \vec{dr} \{ \vec{J}_n^2 + \vec{J}_p^2 \}
\end{aligned}$$

les autre termes facteurs de $(\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2)$ et de $(\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2) \delta_{\tau\tau'}$ auront une contribution nulle.

En rassemblant les termes, on trouve :

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_1(\vec{r}) &= \frac{1}{16}t_1 \left(1 + \frac{x_1}{2}\right) \left[4t(\vec{r})\rho(\vec{r}) - 3\rho(\vec{r})\overleftarrow{\nabla}^2\rho(\vec{r})\right] \\
&\quad - \frac{1}{16}t_1 \left(\frac{1}{2} + x_1\right) \{4t_n(\vec{r})\rho_n(\vec{r}) + 4t_p(\vec{r})\rho_p(\vec{r}) \\
&\quad - 3\rho_n(\vec{r})\overleftarrow{\nabla}^2\rho_n(\vec{r}) - 3\rho_p(\vec{r})\overleftarrow{\nabla}^2\rho_p(\vec{r})\} \\
&\quad + \frac{1}{16}t_1 \left[-x_1\vec{J}^2 + \vec{J}_n^2 + \vec{J}_p^2\right]
\end{aligned} \tag{D.25}$$

Calcul du terme en t_2 :

$$\begin{aligned}
\int \mathcal{H}_2(\vec{r})d\vec{r} &= \frac{1}{2} \sum_{i,j} \langle ij | t_2 \left(1 + x_2\hat{P}_\sigma\right) \overleftarrow{K}_{12}\delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \overrightarrow{K}_{12} | ij \rangle \\
&= -\frac{t_2}{8} \sum_{i,j} \langle ij | (\overleftarrow{\nabla}_1\overrightarrow{\nabla}_1 + \overleftarrow{\nabla}_2\overrightarrow{\nabla}_2 - \overleftarrow{\nabla}_1\overrightarrow{\nabla}_2 - \overleftarrow{\nabla}_2\overrightarrow{\nabla}_1) \\
&\quad \left[\left(1 + \frac{x_2}{2}\right) - \left(\frac{1}{2} + x_2\right)\delta_{\tau\tau'} + \frac{x_2}{2}(\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2) - (\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2)\delta_{\tau\tau'}\right] \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) | ij \rangle \\
&\quad - \frac{t_2}{8} \sum_{i,j} \langle ij | (\overleftarrow{\nabla}_1\overrightarrow{\nabla}_1)\left(1 + \frac{x_2}{2}\right) | ij \rangle = \frac{t_2}{8}\left(1 + \frac{x_2}{2}\right) \int \overrightarrow{dr}t(\vec{r})\rho(\vec{r})
\end{aligned} \tag{D.26}$$

de même on trouve que :

$$-\frac{t_2}{8} \sum_{i,j} \langle ij | (\overleftarrow{\nabla}_2\overrightarrow{\nabla}_2)\left(1 + \frac{x_2}{2}\right) | ij \rangle = \frac{t_2}{8}\left(1 + \frac{x_2}{2}\right) \int \overrightarrow{dr}t(\vec{r})\rho(\vec{r}) \tag{D.27}$$

et :

$$\frac{t_2}{8} \sum_{i,j} \langle ij | (\overleftarrow{\nabla}_1\overrightarrow{\nabla}_2)\left(1 + \frac{x_2}{2}\right) | ij \rangle = \frac{t_2}{8}\left(1 + \frac{x_2}{2}\right) \int \overrightarrow{dr}[\rho(\vec{r})]^2 \tag{D.28}$$

ainsi que :

$$\frac{t_2}{8} \sum_{i,j} \langle ij | (\overleftarrow{\nabla}_2\overrightarrow{\nabla}_1)\left(1 + \frac{x_2}{2}\right) | ij \rangle = \frac{t_2}{8}\left(1 + \frac{x_2}{2}\right) \int \overrightarrow{dr}[\rho(\vec{r})]^2 \tag{D.29}$$

et par le même raisonnement on obtient :

$$\frac{t_2}{8} \sum_{i,j} \langle ij | (\overleftarrow{\nabla}_1\overrightarrow{\nabla}_1)\left(\frac{1}{2} + x_2\right)\delta_{\tau\tau'} | ij \rangle = -\frac{t_2}{8}\left(\frac{1}{2} + x_2\right) \int \overrightarrow{dr} \sum_{\tau} t_{\tau}(\vec{r})\rho_{\tau}(\vec{r}) \tag{D.30}$$

$$\frac{t_2}{8} \sum_{i,j} \langle ij | (\overleftarrow{\nabla}_2\overrightarrow{\nabla}_2)\left(\frac{1}{2} + x_2\right)\delta_{\tau\tau'} | ij \rangle = -\frac{t_2}{8}\left(\frac{1}{2} + x_2\right) \int \overrightarrow{dr} \sum_{\tau} t_{\tau}(\vec{r})\rho_{\tau}(\vec{r}) \tag{D.31}$$

$$-\frac{t_2}{8} \sum_{i,j} \langle ij | (\overleftarrow{\nabla}_1 \overrightarrow{\nabla}_2) (\frac{1}{2} + x_2) \delta_{\tau\tau'} | ij \rangle = -\frac{t_2}{8} (1 + \frac{x_2}{2}) \int \overrightarrow{dr} \sum_{\tau} [\rho_{\tau}(\overrightarrow{r})]^2 \quad (\text{D.32})$$

$$-\frac{t_2}{8} \sum_{i,j} \langle ij | (\overleftarrow{\nabla}_2 \overrightarrow{\nabla}_1) (\frac{1}{2} + x_2) \delta_{\tau\tau'} | ij \rangle = -\frac{t_2}{8} (1 + \frac{x_2}{2}) \int \overrightarrow{dr} \sum_{\tau} [\rho_{\tau}(\overrightarrow{r})]^2 \quad (\text{D.33})$$

$$\frac{t_2}{8} \sum_{i,j} \langle ij | \frac{x_2}{2} (\overleftarrow{\nabla}_1 \overrightarrow{\nabla}_2) (\overrightarrow{\sigma}_1 \cdot \overrightarrow{\sigma}_2) | ij \rangle = \frac{t_2 x_2}{16} \int \overrightarrow{dr} J^2(\overrightarrow{r}) \quad (\text{D.34})$$

$$\frac{t_2}{8} \sum_{i,j} \langle ij | \frac{x_2}{2} (\overleftarrow{\nabla}_2 \overrightarrow{\nabla}_1) (\overrightarrow{\sigma}_1 \cdot \overrightarrow{\sigma}_2) | ij \rangle = \frac{t_2 x_2}{16} \int \overrightarrow{dr} J^2(\overrightarrow{r}) \quad (\text{D.35})$$

et par le même raisonnement on obtient :

$$-\frac{t_2}{8} \sum_{i,j} \langle ij | (\overleftarrow{\nabla}_1 \overrightarrow{\nabla}_2) (\overrightarrow{\sigma}_1 \cdot \overrightarrow{\sigma}_2) \delta_{\tau\tau'} | ij \rangle = -\frac{t_2}{8} \int \overrightarrow{dr} \sum_{\tau} J_{\tau}^2(\overrightarrow{r}) \quad (\text{D.36})$$

$$-\frac{t_2}{8} \sum_{i,j} \langle ij | (\overleftarrow{\nabla}_2 \overrightarrow{\nabla}_1) (\overrightarrow{\sigma}_1 \cdot \overrightarrow{\sigma}_2) \delta_{\tau\tau'} | ij \rangle = -\frac{t_2}{8} \int \overrightarrow{dr} \sum_{\tau} J_{\tau}^2(\overrightarrow{r}) \quad (\text{D.37})$$

les autres termes facteurs de $(\overrightarrow{\sigma}_1 \cdot \overrightarrow{\sigma}_2)$ et de $(\overrightarrow{\sigma}_1 \cdot \overrightarrow{\sigma}_2) \delta_{\tau\tau'}$ auront une contribution nulle.

En rassemblant les termes, on trouve :

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_2(\overrightarrow{r}) &= \frac{t_2}{16} (2 + x_2) \left[2t(\overrightarrow{r}) \rho(\overrightarrow{r}) + \frac{1}{2} \rho(\overrightarrow{r}) \overrightarrow{\nabla}^2 \rho(\overrightarrow{r}) \right] \\ &+ \frac{t_2}{16} (1 + 2x_2) \{ 2t_n(\overrightarrow{r}) \rho_n(\overrightarrow{r}) + 2t_p(\overrightarrow{r}) \rho_p(\overrightarrow{r}) \\ &+ \frac{1}{2} \rho_n(\overrightarrow{r}) \overrightarrow{\nabla}^2 \rho_n(\overrightarrow{r}) + \frac{1}{2} \rho_p(\overrightarrow{r}) \overrightarrow{\nabla}^2 \rho_p(\overrightarrow{r}) \} \\ &- \frac{t_2}{16} [x_2 \overrightarrow{J}^2 + \overrightarrow{J}_n^2 + \overrightarrow{J}_p^2] \end{aligned} \quad (\text{D.38})$$

Calcul du terme en t_3 :

$$\begin{aligned} \int \mathcal{H}_3(\overrightarrow{r}) d\overrightarrow{r} &= \frac{1}{2} \sum_{ij} \langle ij | \frac{t_3}{6} (1 + x_3 \hat{P}_{\sigma}) [\rho(\overrightarrow{R})]^{\alpha} \delta(\overrightarrow{r}_1 - \overrightarrow{r}_2) (1 - \hat{P}_{\sigma} \delta_{\tau\tau'}) | ij \rangle \quad (\text{D.39}) \\ &= \frac{t_3}{12} \sum_{ij} \langle ij | (1 + \frac{x_3}{2}) [\rho(\overrightarrow{R})]^{\alpha} \delta(\overrightarrow{r}_1 - \overrightarrow{r}_2) - (\frac{1}{2} + x_3) [\rho(\overrightarrow{R})]^{\alpha} \delta(\overrightarrow{r}_1 - \overrightarrow{r}_2) \delta_{\tau\tau'} + \\ &\frac{x_3}{2} [\rho(\overrightarrow{R})]^{\alpha} \delta(\overrightarrow{r}_1 - \overrightarrow{r}_2) (\overrightarrow{\sigma}_1 \cdot \overrightarrow{\sigma}_2) - [\rho(\overrightarrow{R})]^{\alpha} \delta(\overrightarrow{r}_1 - \overrightarrow{r}_2) (\overrightarrow{\sigma}_1 \cdot \overrightarrow{\sigma}_2) \delta_{\tau\tau'} | ij \rangle \end{aligned}$$

$$\frac{t_3}{12} \sum_{ij} \langle ij | (1 + \frac{x_3}{2}) [\rho(\overrightarrow{R})]^{\alpha} \delta(\overrightarrow{r}_1 - \overrightarrow{r}_2) | ij \rangle = \frac{t_3}{12} (1 + \frac{x_3}{2}) \int \overrightarrow{dr} \rho^{\alpha+2}(\overrightarrow{r}) \quad (\text{D.40})$$

$$\frac{t_3}{12} \sum_{ij} \langle ij | -(\frac{1}{2} + x_3) [\rho(\vec{R})]^\alpha \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \delta_{\tau\tau'} | ij \rangle = -\frac{t_3}{12} (\frac{1}{2} + x_3) \int d\vec{r} \rho^\alpha(\vec{r}) \sum_{\tau} \rho_{\tau}(\vec{r}) \quad (\text{D.41})$$

$$\frac{t_3}{12} \sum_{ij} \langle ij | \frac{x_3}{2} [\rho(\vec{R})]^\alpha \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) (\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2) | ij \rangle = 0 \quad (\text{D.42})$$

$$\frac{t_3}{12} \sum_{ij} \langle ij | [\rho(\vec{R})]^\alpha \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) (\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2) \delta_{\tau\tau'} | ij \rangle = 0 \quad (\text{D.43})$$

En rassemblant les termes, on trouve :

$$\mathcal{H}_3(\vec{r}) = \frac{t_3}{12} \rho^\alpha(\vec{r}) [(1 + \frac{x_3}{2}) \rho^2(\vec{r}) - (\frac{1}{2} + x_3) \sum_{\tau} \rho_{\tau}^2(\vec{r})] \quad (\text{D.44})$$

$$= \frac{t_3}{12} \rho^\alpha(\vec{r}) [(1 + \frac{x_3}{2}) \rho^2(\vec{r}) - (\frac{1}{2} + x_3) (\rho_n^2(\vec{r}) + \rho_p^2(\vec{r}))] \quad (\text{D.45})$$

Calcul du terme de l'interaction spin-orbite :

$$\begin{aligned} \int \mathcal{H}_{so}(\vec{r}) d\vec{r} &= \frac{1}{2} \sum_{ij} \langle ij | iW_0(\vec{\sigma}_1 + \vec{\sigma}_2) \cdot [\vec{K} \times \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \vec{K}] (1 - \hat{P}_{\sigma} \delta_{\tau\tau'}) | ij \rangle \quad (\text{D.46}) \\ &= -\frac{W_0}{2} \int d\vec{r} \left(\rho(\vec{r}) \vec{\nabla} \cdot \vec{J} + \rho_n(\vec{r}) \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_n + \rho_p(\vec{r}) \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_p \right) \end{aligned}$$

$$\mathcal{H}_{so} = -\frac{W_0}{2} \left(\rho(\vec{r}) \vec{\nabla} \cdot \vec{J} + \rho_n(\vec{r}) \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_n + \rho_p(\vec{r}) \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_p \right) \quad (\text{D.47})$$

on parvient enfin à établir :

$$\mathcal{H}_{Sk}(\vec{r}) = \frac{t_0}{4} [(2 + x_0) \rho^2(\vec{r}) - (1 + 2x_0) (\rho_n^2(\vec{r}) + \rho_p^2(\vec{r}))] \quad (\text{D.48})$$

$$\begin{aligned} &+ \frac{t_1}{16} [(1 + \frac{x_1}{2}) (4t(\vec{r}) \rho(\vec{r}) - 3\rho(\vec{r}) \vec{\nabla}^2 \rho(\vec{r})) - (\frac{1}{2} + x_1) (4t_n(\vec{r}) \rho_n(\vec{r}) + 4t_p(\vec{r}) \rho_p(\vec{r})) \\ &- 3\rho_n(\vec{r}) \vec{\nabla}^2 \rho_n(\vec{r}) - 3\rho_p(\vec{r}) \vec{\nabla}^2 \rho_p(\vec{r})) - x_1 \vec{J}^2 + \vec{J}_n^2 + \vec{J}_p^2] \quad (\text{D.49}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &+ \frac{t_2}{16} [(2 + x_2) (2t(\vec{r}) \rho(\vec{r}) + \frac{1}{2} \rho(\vec{r}) \vec{\nabla}^2 \rho(\vec{r})) + (1 + 2x_2) (2t_n(\vec{r}) \rho_n(\vec{r}) + 2t_p(\vec{r}) \rho_p(\vec{r})) \\ &+ \frac{1}{2} \rho_n(\vec{r}) \vec{\nabla}^2 \rho_n(\vec{r}) + \frac{1}{2} \rho_p(\vec{r}) \vec{\nabla}^2 \rho_p(\vec{r})) - x_2 \vec{J}^2 + \vec{J}_n^2 + \vec{J}_p^2] \quad (\text{D.50}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &+ \frac{t_3}{12} \rho^\alpha(\vec{r}) [(1 + \frac{x_3}{2}) \rho^2(\vec{r}) - (\frac{1}{2} + x_3) (\rho_n^2(\vec{r}) + \rho_p^2(\vec{r}))] \\ &- \frac{W_0}{2} \left(\rho(\vec{r}) \vec{\nabla} \cdot \vec{J} + \rho_n(\vec{r}) \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_n + \rho_p(\vec{r}) \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_p \right) \end{aligned}$$

Bibliographie

- [1] W. D. Myers, W. J. Swiatecki, Nucl. Phys. **81** (1966) 1.
- [2] Meldner, H., 1967, *Proceedings of the International Symposium on Nuclides far off the Stability Line*, Lysekil, Sweden, August 1966, ed. by W. Forsling, C. J. Herrlander, and H. Ryde, Ark. Fys. **36**, 593.
- [3] S. G. Nilsson, J. R. Nix, A. Sobiczewski, Z. Szymanski, S. Wycech, C. Gustafson, and P. Moller, Nucl. Phys. **A 115** (1968) 545.
- [4] U. Mosel and W. Greiner, Z. Phys. **222** (1969) 261.
- [5] E. O. Fiset, and J. R. Nix, Nucl. Phys. **A 193** (1972) 647.
- [6] J. Randrup, S. E. Larsson, P. Moller, S. G. Nilsson, K. Pomorski, and A. Sobiczewski, Phys. Rev. **C 13** (1976) 229.
- [7] P. Moller and J. R. Nix, J. Phys. **G 20** (1994) 1681.
- [8] A. Sobiczewski, Phys. Part. Nuclei **25** (1994) 295.
- [9] K. Rutz, K., M. Bender, T. Bürvenich, T. Schilling, P. G. Reinhard, J. A. Maruhn, and W. Greiner, Phys. Rev. **C 56** (1997) 238.
- [10] S. Cwiok, J. Dobaczewski, P. H. Heenen, P. Magierski, and W. Nazarewicz, Nucl. Phys. **A 611** (1996) 211.
- [11] C. Simenel, B. Avez, *Approches Microscopiques de la Dynamique Nucléaire : Application aux réactions autour de la barrière*, Cours.
- [12] J. Meyer, Annales de Physique, **3** (2003) 1.
- [13] M. V. Stoitsov, J. Dobaczewski, W. Nazarewicz, P. Ring, Comp. Phys Com **167** (2005) 43.
- [14] H. Goutte, Habilitation à Diriger des Recherches, Université Lyon 1, 2008.
- [15] Ph. Quentin, Jour. Phys. **11** (1973) C4-101.
- [16] M. R. Oudih, Thèse de Doctorat, USTHB, 2003.

- [17] P. Ring and P. Schuk, *The Nuclear Many Body Problem*, Springer, Berlin ; 1980.
- [18] W Greiner, J. A. Maruhn, *Nuclear Models*, Springer, Berlin ; 1995.
- [19] M.V. Stoitsov, J. Dobaczewski, W. Nazarewicz, P. Borycki, *Int. J. Mass Spectrometry* **251**, 243 (2006).
- [20] H. Flocard, *Jour. Phys.* **11** (1973) C4-87.
- [21] M. Fellah, *Cours, Modèles Nucléaires*, Cours de la 1^{ière} année de post graduation, USTHB, 2010.
- [22] P. A. Martin et F. Rothen, *Problèmes à N-corps et champs quantiques*, Presse polytechniques et universitaire romandes, CH-1015 Lausanne ; 1990.
- [23] J. Bardeen, L.N. Cooper and J.R. Schrieffer, *Phys. Rev.* **C 108**, (1957) 1175.
- [24] M. Stoitsov, J. Dobaczewski, R. Kirchner, W. Nazarewicz, J. Terasaki, *Phys. Rev.* **C 76** (2007) 014308.
- [25] J. P. Blaizot et G. Ripka, *Quantum Theory of Finite Systems*, MIT Press, Cambridge, MA/London ; 1985.
- [26] M. Bender, P.-H. Heenen, P.-G. Reinhard, *Rev. Mod. Phys.* **75** (2003) 121.
- [27] E. Perlińska, S.G. Rohoziński, J. Dobaczewski, W. Nazarewicz, *Phys. Rev.* **C 69** (2004) 014316.
- [28] N. Tajima, *Phys. Rev.* **C 69** (2004) 034305.
- [29] J. Dobaczewski, H. Flocard, J. Treiner, *Nucl. Phys.* **A 422** (1984) 103.
- [30] K. Yoshida, *Thèse de Doctorat*, 2007.
- [31] M.V. Stoitsov, J. Dobaczewski, W. Nazarewicz, S. Pittel, D.J. Dean, *Phys. Rev.* **C 68** (2003) 054312.
- [32] M. Taibeche, *Mémoire de Magister*, USTHB, 2010.
- [33] A. Messiah, *Mécanique quantique*, Dunod, paris ; 1960.
- [34] A. Bohr, B. R. Mottelson, *Nuclear Structure*, Benjamin, New York ; 1969.
- [35] J. W. Holt, N. Kaiser, and W. Weise. *Phys. Rev.* **C 81** (2010) 024002.
- [36] J. Dechargé and D. Gogny, *Phys. Rev.* **C 21** (1980) 1568.
- [37] D. Vautherin, D. M. Brink. *Phys. Rev.* **C 7** (1972) 296.
- [38] K. Bennaceur, J. Dobaczewski, *Comput. Phys. Comm* **168** (2005) 96.
- [39] M. Abramowitz, I. A. Stegun, *Handbook of mathematical functions*, Dover, New York ; 1970.

- [40] V. E. Oberacker, A. Blazkiewicz, A. S. Umar, Romanian Reports in Physics, Vol. **59**, (2007) 559.
- [41] S. J. Krieger, Phys. Rev. **C 1** (1970) 76.
- [42] E. Terán, V. E. Oberacker, A. S. Umar, Phys. Rev. **C 67** (2003) 064314.
- [43] J. Dobaczewski, W. Nazarewicz, T.R. Werner, J.-F. Berger, C.R. Chinn, J. Dechargé, Phys. Rev. **C 53** (1996) 2809.
- [44] J.A. Sheikh, P. Ring, E. Lopes, R. Rossignoli, Phys. Rev. **C 66** (2002) 044318.
- [45] J. Dobaczewski, W. Nazarewicz, Phys. Rev. **C 47** (1993) 2418.
- [46] M. Anguiano, J.L. Egido, L.M. Robledo, Phys. Lett. **B 545** (2002) 62.
- [47] M. Fella, T. F. Hammann and D. E. Medjadi, Phys. Rev, **C 8** (1973) 1585.
- [48] M. Fella, T. F. Hammann, Nuovo Cimento, **30 A** (1975) 239.
- [49] A. Berbiche, Mémoire de Magister, USTHB 2011.
- [50] P.-G. Reinhard, W. Nazarewicz, M. Bender and J.A. Maruhn, Phys. Rev. **C 53** (1996) 2776.
- [51] H. J. Lipkin, Ann. Phys. **9** (1960) 272.
- [52] Y. Nogami and I. J. Zucker, Nucl. Phys. **60** (1964) 203.
- [53] A. Kamlah, Z. Phys. **216**, 52 (1968).
- [54] A. Valor, J. L. Egido, L. M. Robledo, Phys. Rev. **C 53** (1996) 172.
- [55] A. Valor, J. L. Egido, L. M. Robledo, Nucl. Phys. **A 671** (2000) 189.
- [56] J.A. Sheikh, P. Ring, E. Lopes, R. Rossignoli, Phys. Rev. **C 66** (2002) 044318.
- [57] H. Flocard, N. Onishi, Ann. Phys. **254** (1997) 275.
- [58] Y. Hamza, M.R. Oudih, 4^{ème} Conférence Nationale sur les Rayonnement et leurs Applications (CNRA'2011), USTHB, 25-27 Octobre (2011).
- [59] P. Moller, J. R. Nix and K.-L. Kratz, At. Data and Nucl. Data Tables **66** (1997) 131.
- [60] S. K. Patra, Cheng-Li Wu, C. R. Prahara, Raj K. Gupta, Nuc. Phys. **A 651** (1999) 117.
- [61] C. Samanta, P. Roy Chowdhury, D. N. Basu, Nucl. Phys. **A 789** (2007) 142.
- [62] H. Koura, T. Tachibana, M. Uno, M. Yamada, KUTY Mass Formula, 2005, Prog. Theor. Phys. **113** (2005) 305.

-
- [63] P. Roy Chowdhury, C. Samanta, D. N. Basu, *At. Data and Nucl. Data Tables* **94** (2008) 781.
- [64] V. E. Viola, G.T. Seaborg, *J. Inorg. Nucl. Chem.* **28** (1966) 741.
- [65] J. Dong, W. Zuo, W. Scheid, *Nucl. Phys.* **A 861** (2011) 1.
- [66] A. Sobiczewski, Z. Patyk, S. Cwiok, *Phys. Lett.* **B 224** (1989) 1.
- [67] M. R. Oudih, Y. Hamza, M. Fellah and N. H. Allal, 8th Conference on Nuclear and Particle Physics, Hurghada, Egypt, 20-24 Nov. 2011, (NUPPAC'11).
- [68] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu et F. Laloë, *Mécanique quantique*, volume I, Hermann ; 1973.
- [69] D. Vautherin and D. M. Brink, *Phys. Rev.* **C 5** (1972) 626.