



N° d'ordre :10 / 2004-M/PH

UNIVERSITE DES SCIENCES ET DE LA TECHNOLOGIE
HOUARI BOUMEDIENNE
U S T H B / ALGER

FACULTE DE PHYSIQUE

MEMOIRE

Présenté pour l'obtention du diplôme de :

MAGISTER

EN : PHYSIQUE

Spécialité : Physique Théorique

Par : **SIAD Brahim**

SUJET

*Etude comparative de quelques méthodes de
restauration du nombre de particules dans l'étude
de l'appariement pour les systèmes finis.*

Soutenu publiquement le : 26/04/ 2004, devant le jury composé de :

H. DJELOUAH.....	Professeur (USTHB).....	Président
M. FELLAH.....	Professeur (USTHB).....	Directeur de thèse
N .H. ALLAL.....	Professeur (USTHB).....	Examinatrice
A. CHOUCHAOUI.....	Professeur (USTHB).....	Examinateur
M. MOULAY.....	Directeur de recherche (COMENA).....	Examinateur

Remerciements

Ce travail a été réalisé au sein du laboratoire de physique théorique de la faculté de physique de l'USTHB. Il a été suggéré et dirigé par Mr M.Fellah, Professeur à l'USTHB et directeur du laboratoire de physique théorique. Je tiens à le remercier et à lui rendre hommage pour la patience qu'il a montrée envers moi et ses encouragements qu'il n'a jamais cessé de me prodiguer tout au long de la réalisation de ce travail sans oublier les moyens qu'il a mis à ma disposition. Qu'il trouve ici l'expression de ma profonde gratitude et mes vifs remerciements.

Je remercie énormément Mr H. Djelouah, Professeur à l'USTHB, pour m'avoir fait l'honneur d'assurer la présidence du jury d'examen de cette thèse.

Je remercie également Melle N.H. Allal, Professeur à l'USTHB, non seulement pour avoir accepté de faire partie du jury, mais également pour son aide précieuse et pour les conseils et critiques constructifs que j'ai eu la chance de trouver auprès d'elle.

Je tiens à remercier aussi Mr A. Chouchaoui, Professeur à l'USTHB, pour avoir bien voulu s'intéresser à ce travail en acceptant de siéger au jury d'examen.

J'adresse mes remerciements à Mr M. Kechouane, directeur du centre de recherche nucléaire d'Alger(CRNA), et Mr M. Moulay, directeur de recherche et chef de la division de physique nucléaire (DPN) pour m'avoir accueilli au sein du CRNA et de la DPN respectivement. Je remercie Mr M. Moulay de nouveau pour avoir accepté de faire partie du jury.

Je ne saurais oublier les gens auprès desquels j'ai trouvé tout le soutien nécessaire pour pouvoir mener ce travail à bien. Je cite notamment Mr M.R. Oudih, Maître assistant à l'USTHB, pour lequel j'exprime ma profonde gratitude pour son aide précieuse et pour les conseils que j'ai pu trouver auprès de lui. Je remercie aussi Melle N. Benhamouda, Maître assistante à l'USTHB pour son aide et ses encouragements.

Je tiens à remercier tous mes amis pour leur soutien moral et leurs encouragements durant la réalisation de ce travail.

Je remercie finalement toute personne ayant participé de près ou de loin dans la réalisation de ce travail.

إهداء

أحمد الله الذي منحني القدرة لإتمام هذا العمل الذي أهديته:

- إلى والديَّ الكريمين.
- إلى إخوتي و أخواتي.
- إلى جميع أصدقائي.

Dédicaces

Je dédie ce travail :

- A mes chers parents.
 - A mes frères et sœurs.
 - A tous mes amis.
-

Table des matières

1	Introduction	1
1.1	Théorie BCS	2
1.1.1	Hamiltonien du système	2
1.1.2	Transformation de Bogoliubov-Valatin	4
1.1.3	Equations du gap	5
1.1.4	Etat BCS	9
2	La méthode de Lipkin-Nogami	11
2.1	Introduction	11
2.2	Principe de la méthode	12
2.3	Equations du gap	15
2.4	Détermination des coefficients λ_1 et λ_2	18
2.4.1	Condition sur λ_1	18
2.4.2	Condition sur λ_2	18
2.5	Energie de l'état fondamental	23
3	L'approximation des phases aléatoires	24
3.1	Introduction	24
3.2	Méthode des équations du mouvement	25
3.3	Approximation des phases aléatoires (particule-trou)	27
3.3.1	Le fondamental $ RPA\rangle$ et les opérateurs $O_\nu^\dagger, O_\nu$	27
3.3.2	Equations de la RPA	27
3.3.3	Propriétés des solutions de la RPA	29
3.3.4	Représentation bosons et énergie de la RPA	30
3.4	Approximation des phases aléatoires pour quasi-particules	32
3.4.1	Les équations de la QRPA	32
3.4.2	Résolution des équations de la QRPA	35

4	La méthode de projection FSBCS	37
4.1	Introduction	37
4.2	Construction des fonctions d'ondes projetées	38
4.2.1	Opérateur de projection sous forme intégrale	38
4.2.2	Opérateur de projection sous forme discrète	39
4.2.3	Condition de normalisation	45
4.2.4	Technique d'extraction de la partie réelle	45
4.3	Energie du système	48
4.4	Equations du gap	51
5	Résultats numériques et discussion	55
5.1	Modèles utilisés	56
5.1.1	Modèle symétrique à deux niveaux	56
5.1.2	Modèle de Richardson	58
5.2	Probabilités d'occupation	60
5.3	Demi-largeur du gap	62
5.4	Energie de corrélations d'appariement et énergie de l'état fondamental	66
	Conclusion	77
A	Hamiltonien nucléaire en représentation quasi-particules	80
B	Calcul des commutateurs $[A_\nu, [H, A_\mu^\dagger]]$ et $[A_\nu, [H, A_\mu]]$	82

Chapitre 1

Introduction

L'étude de la structure nucléaire était et demeure un problème majeur pour les physiciens. La difficulté de définir rigoureusement l'interaction nucléon-nucléon et les problèmes liés à l'étude des systèmes à plusieurs fermions en interaction ont rendu quasi impossible l'élaboration d'une théorie complète et cohérente permettant de décrire d'une façon rigoureuse le noyau atomique et ses différentes propriétés. Le recours à des méthodes approximatives, appelées communément modèles nucléaires, est devenu par conséquent indispensable.

Le modèle à particules indépendantes [1] est l'une de ces approches adoptées pour décrire approximativement les nucléons dans le noyau. Partant de l'hypothèse d'une faible corrélation entre les nucléons, on considère le noyau comme un ensemble de particules se mouvant indépendamment les unes des autres et ressentant l'effet d'un champ moyen créé par le reste des particules. Ce champ moyen peut être déterminé soit d'une manière self-consistante, comme dans la méthode d'Hartree-Fock [1, 2] ou bien à l'aide d'un potentiel phénoménologique du type de Nilsson [3] ou de Woods-Saxon [4].

Partant de cette approximation, l'hamiltonien nucléaire peut s'écrire sous forme d'une somme de deux termes : le premier contient l'énergie cinétique des nucléons augmentée d'une énergie potentielle décrivant l'interaction moyenne qu'un nucléon éprouve de la part des autres nucléons du noyau, et le deuxième terme correspond aux interactions résiduelles entre les nucléons. Parmi ces dernières, les plus importantes sont les corrélations d'appariement. Ces corrélations jouent un rôle capital dans la description de la spectroscopie nucléaire, les transitions électromagnétiques, le moment d'inertie, etc...

La notion d'énergie d'appariement est apparue dès les premiers calculs de l'énergie

de liaison des noyaux. En effet, il y a une différence caractéristique entre les spectres des noyaux pair-pairs et pair-impairs. On observe expérimentalement un gap important dans les noyaux pair-pairs entre l'état fondamental et les premiers états excités ce qui n'est pas le cas pour les noyaux impairs. Ce gap a été attribué à l'effet d'appariement de l'interaction nucléaire résiduelle. Afin de tenir compte de cet effet, Bohr, Mottelson et Pines [5] ont suggéré l'hypothèse de la superfluidité des noyaux en introduisant ce nouveau type d'interaction. En se basant sur l'analogie apparente entre les nucléons dans les noyaux et les métaux se trouvant à l'état supra-conducteur, où les électrons qui interagissent avec le milieu cristallin ont tendance à former des paires occupant des états ayant des impulsions et des projections de spin opposées, Belyaev [6] a adapté la théorie de la supra-conductivité de Bardeen, Cooper et Schrieffer (BCS) [7] à la physique nucléaire. Depuis, la théorie BCS est devenue la méthode standard pour inclure les effets d'appariement dans le champ moyen.

Cependant, il est bien connu que les théories du champ moyen brisent certaines symétries auxquelles obéit l'hamiltonien des systèmes ayant un nombre fini de particules. Du fait qu'une partie de l'hamiltonien a été négligée, l'hamiltonien de particules indépendantes (ou de quasi-particules indépendantes dans le cas BCS) ne conserve plus les symétries de l'hamiltonien originel. Dans le cas de la théorie BCS, une des symétries brisées est celle de la conservation du nombre de particules. Cette brisure est à l'origine d'un certain nombre de conséquences fâcheuses sur l'étude des différentes grandeurs physiques. Un nombre important de méthodes a été élaboré pour tenir compte de ces effets et restaurer cette symétrie brisée par la théorie BCS.

Avant d'aborder ce problème, il est utile de rappeler brièvement la théorie BCS afin de mettre ses défauts en exergue.

1.1 Théorie BCS

1.1.1 Hamiltonien du système

Dans le formalisme de la seconde quantification l'hamiltonien du système s'écrit :

$$H = \sum_{\nu} \varepsilon_{\nu} a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu} + \frac{1}{4} \sum_{\nu\mu\lambda\rho} \langle \nu\mu | V | \lambda\rho \rangle a_{\nu}^{\dagger} a_{\mu}^{\dagger} a_{\rho} a_{\lambda} \quad (1.1)$$

où : les ε_ν sont les énergies propres du champ moyen, et $a_\nu^\dagger$ et a_ν sont les opérateurs de création et d'annihilation d'une particule dans l'état $|\nu\rangle$ qui satisfont aux relations d'anticommutation des fermions :

$$\begin{aligned} \{a_\nu^\dagger, a_\mu^\dagger\} &= \{a_\nu, a_\mu\} = 0 \\ \text{et : } \{a_\nu, a_\mu^\dagger\} &= \delta_{\nu\mu} \end{aligned} \quad (1.2)$$

Les quantités $\langle \nu\mu | V | \lambda\rho \rangle$ sont les éléments de matrice antisymétrisés de l'interaction résiduelle V que l'on suppose invariante par rotation et par renversement du sens du temps. Cette dernière s'avérera très importante par la suite car ce sont les états qui se déduisent l'un de l'autre par renversement du sens du temps qui s'apparient. Cette propriété se traduit par :

$$\begin{aligned} \langle \nu\mu | V | \lambda\rho \rangle &= S_\nu S_\mu S_\lambda S_\rho \langle -\lambda - \rho | V | -\nu - \mu \rangle \\ &= \langle \tilde{\lambda}\tilde{\rho} | V | \tilde{\nu}\tilde{\mu} \rangle \end{aligned} \quad (1.3)$$

où $|\tilde{\nu}\rangle = S_\nu |-\nu\rangle$ est le renversé par rapport au sens du temps de l'état $|\nu\rangle$ et S_ν est un facteur de phase défini pour un noyau sphérique par $S_\nu = (-)^{j_\nu - m_\nu}$; j_ν et m_ν étant le moment angulaire et sa projection, de l'état $|\nu\rangle$ et de l'état $|\nu\rangle$. Ce facteur de phase vérifie en outre la propriété :

$$S_\nu^2 = 1 \quad \text{et} \quad S_{\tilde{\nu}} = -S_\nu \quad (1.4)$$

On suppose également que le modèle à particules indépendantes est invariant par renversement du sens du temps, ce qui signifie :

$$\varepsilon_{\tilde{\nu}} = \varepsilon_\nu \quad (1.5)$$

Pour rendre compte de l'effet d'appariement, Belayev [6] a introduit comme interaction résiduelle, la force d'appariement de l'interaction nucléon-nucléon. Cette force est effective pour des paires de nucléons occupant des états $(|\nu\rangle, |\tilde{\nu}\rangle)$. Cette force est définie par ses éléments de matrice :

$$\langle \nu\mu | V | \lambda\rho \rangle = -4G\delta_{\nu\tilde{\mu}}\delta_{\lambda\tilde{\rho}} \quad (1.6)$$

où G est une constante positive appelée intensité de la force d'appariement.

Un système composé de particules toutes appariées est donc décrit par l'hamiltonien :

$$H = \sum_{\nu>0} \varepsilon_{\nu} \left(a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu} + a_{\bar{\nu}}^{\dagger} a_{\bar{\nu}} \right) - G \sum_{\nu, \mu>0} a_{\nu}^{\dagger} a_{\bar{\nu}}^{\dagger} a_{\bar{\mu}} a_{\mu} \quad (1.7)$$

Il s'agit à présent de résoudre le problème aux valeurs propres de cet hamiltonien. Compte tenu que ce dernier décrit un noyau à n_0 nucléons, ces fonctions doivent être aussi fonctions propres de l'opérateur nombre de particules :

$$N = \sum_{\nu>0} \left(a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu} + a_{\bar{\nu}}^{\dagger} a_{\bar{\nu}} \right) \quad (1.8)$$

Ce problème n'admet pas de solution exacte dans le cas le plus général. Il a été résolu approximativement par Bardeen, Cooper et Schrieffer [7] dans le cadre de la théorie de la supraconductibilité.

Dans cette théorie, les fonctions BCS sont fonctions propres de l'hamiltonien, mais le nombre de particules n'est conservé qu'en moyenne :

$$\langle BCS | N | BCS \rangle = n_0 \quad (1.9)$$

La prise en compte de cette contrainte se fait habituellement en introduisant un multiplicateur de Lagrange λ et en minimisant la valeur moyenne de l'hamiltonien auxiliaire :

$$H' = H - \lambda N \quad (1.10)$$

λ représente ainsi le potentiel chimique.

1.1.2 Transformation de Bogoliubov-Valatin

Afin de minimiser la valeur moyenne de H' , Bogoliubov [8] et Valatin [9] ont défini de nouveaux opérateurs $\alpha_{\nu}^{\dagger}$ et α_{ν} qui sont combinaisons linéaires des opérateurs de création et d'annihilation $a_{\nu}^{\dagger}$ et a_{ν} des vraies particules :

$$\begin{cases} \alpha_{\nu} = u_{\nu} a_{\nu} - v_{\nu} a_{\bar{\nu}}^{\dagger} \\ \alpha_{\nu}^{\dagger} = u_{\nu} a_{\nu}^{\dagger} - v_{\nu} a_{\bar{\nu}} \end{cases} \quad (1.11)$$

L'opérateur $\alpha_{\nu}^{\dagger}$ crée ce qui est appelé une quasi-particule. Celle-ci est une parti-

cule avec une amplitude de probabilité u_ν et un trou avec une amplitude de probabilité v_ν . Les paramètres u_ν et v_ν sont des nombres positifs et satisfont aux conditions :

$$u_{\bar{\nu}} = u_\nu \quad \text{et} \quad v_{\bar{\nu}} = v_\nu \quad \forall \nu \quad (1.12)$$

ce qui signifie que l'état $|\bar{\nu}\rangle$ est occupé ou inoccupé avec la même probabilité que l'état $|\nu\rangle$.

Les opérateurs $\alpha_\nu^\dagger$ et α_ν étant des opérateurs de création et d'annihilation de fermions, ils doivent obéir aux relations d'anticommutation habituelles des fermions :

$$\begin{aligned} \{\alpha_\nu, \alpha_\nu^\dagger\} &= \delta_{\nu\mu} \\ &= (u_\nu^2 + v_\nu^2) \delta_{\nu\mu} \end{aligned} \quad (1.13)$$

ce qui entraîne :

$$u_\nu^2 + v_\nu^2 = 1 \quad , \quad \forall \nu \quad (1.14)$$

Cette propriété signifie que la transformation (1.11) est unitaire. La transformation inverse de (1.11) s'écrit :

$$\begin{cases} a_\nu = u_\nu \alpha_\nu + v_\nu \alpha_{\bar{\nu}}^\dagger \\ a_\nu^\dagger = u_\nu \alpha_\nu^\dagger + v_\nu \alpha_{\bar{\nu}} \end{cases} \quad (1.15)$$

On peut donc définir une nouvelle représentation appelée "représentation quasi-particules" dont le vide sera noté $|BCS\rangle$ et sera défini par l'équation :

$$\alpha_\nu |BCS\rangle = 0 \quad , \quad \forall \nu \quad (1.16)$$

Cet état peut être obtenu à partir du vrai vide de particule $|0\rangle$ en annihilant toutes les quasi-particules dans ce dernier.

1.1.3 Equations du gap

Les paramètres u_ν et v_ν sont choisis de manière à minimiser la valeur moyenne de l'hamiltonien H' calculée sur l'état $|BCS\rangle$. On exprime alors H' en représentation quasi-particules. A l'aide de la transformation inverse de Bogoliubov-Valatin et en

utilisant le théorème de Wick, l'hamiltonien H' se met sous la forme :

$$H' = E_0 + H_{11} + H_{20} + H_{résid} \quad (1.17)$$

où E_0 représente le terme constant :

$$E_0 = 2 \sum_{\nu>0} \left(\varepsilon_\nu - \lambda - \frac{G}{2} v_\nu^2 \right) v_\nu^2 - G \left(\sum_{\nu>0} u_\nu v_\nu \right)^2 \quad (1.18)$$

et :

$$H_{11} = \sum_{\nu>0} \left[\left(\varepsilon_\nu - \lambda - G v_\nu^2 \right) (u_\nu^2 - v_\nu^2) + 2G u_\nu v_\nu \left(\sum_{\mu>0} u_\mu v_\mu \right) \right] \left(\alpha_\nu^\dagger \alpha_\nu + \alpha_{\bar{\nu}}^\dagger \alpha_{\bar{\nu}} \right) \quad (1.19)$$

$$H_{20} = \sum_{\nu>0} \left[2 \left(\varepsilon_\nu - \lambda - G v_\nu^2 \right) u_\nu v_\nu - G (u_\nu^2 - v_\nu^2) \left(\sum_{\mu>0} u_\mu v_\mu \right) \right] \left(\alpha_\nu^\dagger \alpha_{\bar{\nu}}^\dagger + \alpha_{\bar{\nu}} \alpha_\nu \right) \quad (1.20)$$

$$H_{résid} = -G \sum_{\nu, \mu>0} : a_\nu^\dagger a_{\bar{\nu}}^\dagger a_{\bar{\mu}} a_\mu : \quad (1.21)$$

où $: a_\nu^\dagger a_{\bar{\nu}}^\dagger a_{\bar{\mu}} a_\mu :$ représente le produit normal.

La valeur moyenne de H' s'écrit alors sous la forme.

$$\langle BCS | H' | BCS \rangle = E_0 = 2 \sum_{\nu>0} \left(\varepsilon_\nu - \lambda - \frac{G}{2} v_\nu^2 \right) v_\nu^2 - \frac{\Delta^2}{G} \quad (1.22)$$

où l'on a posé :

$$\Delta = \sum_{\nu>0} u_\nu v_\nu, \quad (1.23)$$

qui mesure la demi-largeur du gap.

On choisit les paramètres u_ν et v_ν de manière à minimiser E_0 tout en assurant la condition de conservation en moyenne du nombre de particules (1.9) ; on a donc :

$$\frac{\partial E_0}{\partial u_\nu} = \frac{\partial E_0}{\partial v_\nu} = 0 \quad \forall \nu \quad (1.24)$$

On obtient :

$$2u_\nu v_\nu (\varepsilon_\nu - \lambda - G v_\nu^2) = \Delta (u_\nu^2 - v_\nu^2) \quad (1.25)$$

En tenant compte de la condition (1.14), on peut poser : $v_\nu = \cos \theta_\nu$ et $u_\nu = \sin \theta_\nu$

l'équation (1.25) devient alors :

$$(\varepsilon_\nu - \lambda - Gv_\nu^2) \sin 2\theta_\nu = \Delta \cos 2\theta_\nu \quad (1.26)$$

ou bien :

$$tg 2\theta_\nu = \frac{\Delta}{\varepsilon_\nu - \lambda - Gv_\nu^2} \quad (1.27)$$

Sachant que :

$$\sin^2 \theta_\nu = \frac{1}{2} \left\{ 1 - \frac{1}{\sqrt{1 + tg^2 2\theta_\nu}} \right\} \quad \text{et} \quad \cos^2 \theta_\nu = \frac{1}{2} \left\{ 1 + \frac{1}{\sqrt{1 + tg^2 2\theta_\nu}} \right\} \quad (1.28)$$

On obtient pour les paramètres u_ν et v_ν les expressions suivantes :

$$\left. \begin{matrix} u_\nu^2 \\ v_\nu^2 \end{matrix} \right\} = \frac{1}{2} \left\{ 1 \pm \frac{\varepsilon_\nu - \lambda - Gv_\nu^2}{\sqrt{(\varepsilon_\nu - \lambda - Gv_\nu^2)^2 + \Delta^2}} \right\} \quad (1.29)$$

Soit en posant $\varepsilon'_\nu = \varepsilon_\nu - Gv_\nu^2$:

$$\left. \begin{matrix} u_\nu^2 \\ v_\nu^2 \end{matrix} \right\} = \frac{1}{2} \left\{ 1 \pm \frac{\varepsilon'_\nu - \lambda}{\sqrt{(\varepsilon'_\nu - \lambda)^2 + \Delta^2}} \right\} \quad (1.30)$$

La condition de conservation du nombre de particules s'écrit :

$$n_0 = \langle BCS | N | BCS \rangle = 2 \sum_\nu v_\nu^2 \quad (1.31)$$

$$= \sum_\nu \left\{ 1 - \frac{\varepsilon'_\nu - \lambda}{\sqrt{(\varepsilon'_\nu - \lambda)^2 + \Delta^2}} \right\} \quad (1.32)$$

Les équations (1.23) et (1.29) sont appelées *équations du gap*.

L'énergie du système s'écrit alors :

$$E_{BCS} = 2 \sum_{\nu > 0} \left(\varepsilon_\nu - \frac{G}{2} v_\nu^2 \right) v_\nu^2 - \frac{\Delta^2}{G} \quad (1.33)$$

On remarque en outre que les coefficients u_ν et v_ν donnés par l'équation (1.30) annulent le terme H_{20} défini par (1.20).

En utilisant ces mêmes coefficients le terme H_{11} se met sous la forme :

$$H_{11} = \sum_{\nu>0} E_{\nu} \left(\alpha_{\nu}^{\dagger} \alpha_{\nu} + \alpha_{\nu}^{\dagger} \alpha_{\bar{\nu}} \right) \quad (1.34)$$

où l'on a posé :

$$E_{\nu} = \sqrt{(\varepsilon'_{\nu} - \lambda)^2 + \Delta^2} \quad (1.35)$$

E_{ν} est appelée énergie de quasi-particule.

L'approximation des quasi-particules indépendantes qui néglige le terme $H_{résid}$, bien qu'elle soit élégante et facilite considérablement le problème, est à l'origine du défaut bien connu de la théorie BCS. En effet, les corrélations entre quasi-particules qui sont contenues dans le terme résiduel, ont été totalement négligées. Une façon de remédier à ce problème consiste à prendre en compte une partie de ces corrélations dans le cadre de l'approximation des phases aléatoires (QRPA) comme on verra dans le chapitre 3.

Une anomalie de la théorie BCS est l'existence d'une valeur critique de la constante d'appariement en dessous de laquelle les équations du gap n'admettent que la solution triviale. En effet, si G est inférieure à une certaine valeur critique G_c les équations du gap donnent la solution triviale :

$$\begin{aligned} u_{\nu}^2 &= 1 \quad , \quad v_{\nu}^2 = 0 \quad \text{si} \quad \varepsilon_{\nu} > \lambda \\ u_{\nu}^2 &= 0 \quad , \quad v_{\nu}^2 = 1 \quad \text{si} \quad \varepsilon_{\nu} \leq \lambda \end{aligned} \quad (1.36)$$

Ces équations correspondent au cas $\Delta = 0$; dans ce cas les équations (1.30) deviennent :

$$\left. \begin{matrix} u_{\nu}^2 \\ v_{\nu}^2 \end{matrix} \right\} = \frac{1}{2} \left\{ 1 \pm \frac{\varepsilon_{\nu} - \lambda}{|\varepsilon_{\nu} - \lambda|} \right\} \quad (1.37)$$

Dans cette région ($G \leq G_c$) l'approximation BCS coïncide avec le modèle à particules indépendantes, et l'énergie du système s'écrit alors :

$$E_{BCS}(\Delta = 0) = 2 \sum'_{\nu} \varepsilon_{\nu} - G \frac{n_0}{2} \quad (1.38)$$

où $\sum'_{\nu}$ signifie que la sommation porte seulement sur les états occupés.

1.1.4 Etat BCS

L'état BCS est défini comme étant le vide des quasi-particules, il peut être obtenu à partir du vide des particules en annihilant toutes les quasi-particules, soit :

$$|\psi\rangle \simeq \prod_{\nu>0} \alpha_\nu \alpha_{\bar{\nu}} |0\rangle \quad (1.39)$$

ou encore :

$$|\psi\rangle \simeq \prod_{\nu>0} \left(u_\nu v_\nu + v_\nu^2 a_\nu^\dagger a_{\bar{\nu}}^\dagger \right) |0\rangle \quad (1.40)$$

En tenant compte du fait que l'état $|\psi\rangle$ doit être normalisé, ce dernier peut s'écrire :

$$|\psi\rangle = \prod_{\nu>0} \left(u_\nu + v_\nu a_\nu^\dagger a_{\bar{\nu}}^\dagger \right) |0\rangle \quad (1.41)$$

On voit bien dans cette expression que les particules sont regroupées par paires. D'autre part, on constate que l'état $|BCS\rangle$ n'est pas état propre de l'opérateur nombre de particules N car cet état ne contient pas un nombre défini de particules. Pour mettre en évidence cette propriété, on écrit $|\psi\rangle$ sous la forme :

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \left(\prod_{\nu>0} u_\nu \right) \prod_{\nu>0} \left(1 + \frac{v_\nu}{u_\nu} a_\nu^\dagger a_{\bar{\nu}}^\dagger \right) |0\rangle \\ &= \left(\prod_{\nu>0} u_\nu \right) \left[|0\rangle + \sum_{\nu>0} \frac{v_\nu}{u_\nu} a_\nu^\dagger a_{\bar{\nu}}^\dagger |0\rangle + \frac{1}{2} \sum_{\nu,\mu>0} \frac{v_\nu v_\mu}{u_\nu u_\mu} a_\nu^\dagger a_{\bar{\nu}}^\dagger a_\mu^\dagger a_{\bar{\mu}}^\dagger |0\rangle + \dots \right] \end{aligned} \quad (1.42)$$

$$= \left(\prod_{\nu>0} u_\nu \right) \sum_{P=0}^{\Omega} |\psi_P\rangle \quad (1.43)$$

où :

$$|\psi_P\rangle = \left(\prod_{\nu>0} u_\nu \right) \frac{1}{P!} \left[\sum_{\nu>0} \frac{v_\nu}{u_\nu} a_\nu^\dagger a_{\bar{\nu}}^\dagger \right]^P |0\rangle \quad (1.44)$$

et Ω est la dégénérescence totale des paires.

L'expression (1.44) montre que l'état $|BCS\rangle$ est une superposition d'états correspondant à différents nombres de paires de particules. Les fluctuations dues au nombre de particules n'ont pas une grande influence en physique du solide où le nombre de particules est grand (de l'ordre de 10^{23}), par contre, en physique nucléaire où N est de l'ordre de quelques centaines au maximum, ces fluctuations peuvent avoir des conséquences fâcheuses notamment dans le calcul des différentes gran-

deurs physiques telles que l'énergie [37], le moment d'inertie [35], les transitions électromagnétiques [33], les transitions β [34] ainsi que le moment quadrupolaire électrique [10].

Ce problème s'est posé depuis longtemps, il a été l'objet d'un grand nombre de travaux et continue jusqu'à présent à susciter un grand intérêt pour les physiciens (voir les références citées dans [1, 31, 47]). Nous nous proposons dans ce travail d'étudier trois approches différentes permettant chacune de corriger les effets suscités.

Au chapitre 2 sera présentée la méthode de Lipkin-Nogami qui est une méthode de projection approximative. Cette méthode permet, à l'aide d'une condition supplémentaire, d'obtenir une expression approximative de l'énergie de l'état projeté sans faire appel à une projection explicite. Ceci permet d'éviter des calculs longs et compliqués.

Le chapitre 3 est consacré à l'approximation des phases aléatoires (QRPA). Cette approximation offre une alternative aux méthodes de projection. Elle permet d'aller au delà de la théorie BCS en prenant en compte une partie des corrélations entre les quasi-particules.

La méthode de projection exacte discrète, dite FSBCS, sera présentée au chapitre 4, cette méthode est très puissante dans la mesure où elle permet une élimination complète des fluctuations du nombre de particules dans l'état BCS.

Enfin, nous appliquerons ces différentes approches à deux modèles schématiques dans le chapitre 5 : le modèle symétrique à deux niveaux [47] et le modèle de Richardson [55]. Ces deux modèles sont très utilisés dans la littérature, le modèle à deux niveaux est souvent utilisé comme un test des différentes approximations développées. Son importance réside également dans le fait qu'il simule un cas réaliste très répandu : le noyau sphérique [47]. Le modèle de Richardson simule quant à lui les noyaux déformés. Nous examinerons dans le cadre de ces deux modèles l'amélioration, à la théorie BCS, apportée par chaque méthode pour l'étude de l'appariement, et plus particulièrement, sur l'énergie de l'état fondamental et l'énergie de corrélation.

Chapitre 2

La méthode de Lipkin-Nogami

2.1 Introduction

La méthode de Lipkin-Nogami est une méthode simple pour éliminer approximativement les fluctuations du nombre de particules et plus particulièrement, leurs effets sur l'énergie du fondamental. Le problème de la brisure de symétrie du nombre de particules et les tentatives d'y remédier sont aussi vieux que la théorie BCS. En effet, Lipkin [12] proposa en 1960 d'interpréter les fonctions d'ondes non corrélées comme étant des solutions propres d'un hamiltonien modifié $\mathcal{H}$, obtenu à partir de l'hamiltonien original par la soustraction d'un terme correspondant à la symétrie en question. Dans le cas de la symétrie de conservation du nombre de particules dans la théorie BCS, Lipkin définit $\mathcal{H}$ par : $\mathcal{H} = H - f(N)$, où $f(N)$ est un polynôme en N : opérateur nombre de particules. Dans le cas où $f(N)$ se réduit à un monôme de degré un on retrouve la théorie BCS usuelle. Il a été ensuite question de la validité de la négligence du terme à l'ordre deux. Nogami [13] développa ensuite une approche en considérant explicitement le terme du second ordre, cette méthode a donné lieu à une série de travaux [14–16, 19].

L'approximation Lipkin-Nogami reste encore de nos jours une méthode très utilisée [20, 42, 46, 47], ceci est dû à sa relative simplicité et aussi au fait qu'elle soit du type "projection avant variation". Elle a été également appliquée, entre autres, à l'étude des noyaux superdéformés ayant des hauts spins [21], et l'étude de l'appariement avec une force de type Skyrme [22].

2.2 Principe de la méthode

On sait que pour tout opérateur Q qui commute avec l'opérateur nombre de particules N :

$$[Q, N] = 0 \quad (2.1)$$

il est possible de trouver un système complet d'états $\{|m\rangle\}$ qui soient simultanément états propres de Q et de N . Ce système d'états sera supposé orthonormal ; soit :

$$\langle m' | m \rangle = \delta_{mm'} \quad (2.2)$$

Soit $|\Psi\rangle$ une approximation de l'état $|n\rangle$, brisant la symétrie du nombre de particules, mais en le conservant toutefois en moyenne :

$$\langle \Psi | N | \Psi \rangle = n \quad (2.3)$$

L'état $|\Psi\rangle$ admet le développement sur la base des états $\{|m\rangle\}$:

$$|\Psi\rangle = \sum_m C_{nm} |m\rangle \quad (2.4)$$

On considère maintenant la valeur moyenne de l'opérateur Q , commutant avec N , lorsque le système est dans l'état $|n\rangle$. Cette valeur peut être développée comme suit :

$$\langle n | Q | n \rangle = q(n) = q_0 + q_1 n + q_2 n^2 + \dots \quad (2.5)$$

Considérons d'autre part l'opérateur $\tilde{Q}$ défini par :

$$\tilde{Q} = Q - q_1 N - q_2 N^2 - \dots \quad (2.6)$$

dont la valeur moyenne sur l'état $|\Psi\rangle$ est :

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \tilde{Q} | \Psi \rangle &= \sum_m C_{nm}^* \langle m | \{Q - q_1 N - q_2 N^2 \dots\} C_{nm} | m \rangle \\ &= \sum_m |C_{nm}|^2 \{ \langle m | Q | m \rangle - q_1 \langle m | N | m \rangle - q_2 \langle m | N^2 | m \rangle - \dots \} \end{aligned} \quad (2.7)$$

Remplaçons $\langle m | Q | m \rangle$ par le développement (2.5), il vient :

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \tilde{Q} | \Psi \rangle &= \sum_m |C_{nm}|^2 \{q_0 + q_1 m + q_2 m^2 + \dots - (q_1 m + q_2 m^2 + \dots)\} \\ &= \sum_m |C_{nm}|^2 q_0 \\ &= q_0 \end{aligned} \quad (2.8)$$

ce qui conduit à :

$$\langle n | Q | n \rangle = \langle \Psi | \tilde{Q} | \Psi \rangle + q_1 n + q_2 n^2 + \dots \quad (2.9)$$

D'après cette équation, on remarque que la valeur moyenne de l'opérateur Q calculée sur l'état propre de N est exprimée en fonction de la valeur moyenne de l'opérateur $\tilde{Q}$ calculée sur l'état $|\Psi\rangle$. Ainsi, la valeur moyenne de l'opérateur Q sur l'état conservant le nombre de particules peut être obtenue sans faire appel à une projection explicite. Ceci constitue le principe de base de la méthode Lipkin-Nogami.

Cette dernière est considérée plutôt comme une méthode approximative dans la mesure où les développements en séries (2.5) et (2.6) de $\langle n | Q | n \rangle$ et de $\tilde{Q}$ en termes de n et N , respectivement, sont tronqués. Dans la méthode de Lipkin-Nogami l'ordre de troncature est égal à deux.

L'équation (2.9) s'écrit alors :

$$\langle n | Q | n \rangle = \langle \Psi | \tilde{Q} | \Psi \rangle + q_1 n + q_2 n^2 \quad (2.10)$$

Il faut cependant des conditions qui permettent la détermination des coefficients q_1 et q_2 . On remarque pour cela que les opérateurs du type $Qf(N)$, où $f(N)$ est une fonction de l'opérateur N , admettent des développements similaires à celui de Q pondérés par $f(N)$ [20, 24].

En effet :

$$\langle \Psi | \tilde{Q} f(N) | \Psi \rangle = \sum_m |C_{nm}|^2 \langle m | \tilde{Q} | m \rangle f(m) \quad (2.11)$$

étant donné que :

$$\langle n | f(N) | n \rangle = f(n)$$

et comme :

$$\begin{aligned}
 \langle m | \tilde{Q} | m \rangle &= \langle m | Q | m \rangle - q_1 m - q_2 m^2 \\
 &= q_0 + q_1 m + q_2 m^2 - q_1 m - q_2 m^2 \\
 &= q_0
 \end{aligned} \tag{2.12}$$

on obtient :

$$\langle \Psi | \tilde{Q} f(N) | \Psi \rangle = q_0 \sum_m |C_{nm}|^2 f(m) \tag{2.13}$$

D'autre part, en remarquant que :

$$\begin{aligned}
 \langle \Psi | f(N) | \Psi \rangle &= \sum_m |C_{nm}|^2 \langle m | f(N) | m \rangle \\
 &= \sum_m |C_{nm}|^2 f(m)
 \end{aligned} \tag{2.14}$$

puis en combinant (2.13) et (2.14), on obtient :

$$\langle \Psi | \tilde{Q} f(N) | \Psi \rangle = q_0 \langle \Psi | f(N) | \Psi \rangle \tag{2.15}$$

or, d'après (2.8) :

$$q_0 = \langle \Psi | \tilde{Q} | \Psi \rangle$$

l'équation (2.15) s'écrit alors :

$$\langle \Psi | \tilde{Q} f(N) | \Psi \rangle = \langle \Psi | \tilde{Q} | \Psi \rangle \langle \Psi | f(N) | \Psi \rangle \tag{2.16}$$

Partant de cette propriété, Nogami et al. [16] ont proposé d'utiliser des fonctions du type : $f(N) = N^i$, $i = 1, 2, \dots$ pour évaluer les coefficients $q_1, q_2, \dots$

En utilisant les fonctions précédentes, on obtient les équations [20, 24] :

$$\langle \Psi | \tilde{Q} (N - \langle N \rangle) | \Psi \rangle = \langle \Psi | \tilde{Q} (N^2 - \langle N^2 \rangle) | \Psi \rangle = \dots = 0 \tag{2.17}$$

2.3 Equations du gap

Les calculs précédents ont été effectués pour tout opérateur Q commutant avec l'opérateur nombre de particules N .

On se restreint maintenant au cas où Q est l'hamiltonien nucléaire ; ($Q \equiv H$) ; par conséquent $\tilde{Q}$ est l'hamiltonien auxiliaire $\mathbb{H} = H - \lambda_1 N - \lambda_2 N^2$; les paramètres q_1, q_2 sont notés par λ_1, λ_2 . Dans ce cas l'état approximant l'état $|n\rangle$ est l'état BCS : $|\Psi\rangle \equiv |BCS\rangle$.

D'après la propriété (2.10), lorsque le système est dans l'état $|n\rangle$, son énergie est :

$$E_n = \langle n | H | n \rangle = \langle \Psi | \mathbb{H} | \Psi \rangle + \lambda_1 n + \lambda_2 n^2 \quad (2.18)$$

Les équations du gap s'obtiennent en minimisant E_n par rapport aux paramètres variationnels u_ν et v_ν .

L'équation aux variations s'écrit :

$$\delta (E_n) = \delta (\langle \Psi | \mathbb{H} | \Psi \rangle) = 0 \quad (2.19)$$

en outre :

$$\langle \Psi | \mathbb{H} | \Psi \rangle = \langle \Psi | H | \Psi \rangle - \lambda_1 \langle \Psi | N | \Psi \rangle - \lambda_2 \langle \Psi | N^2 | \Psi \rangle \quad (2.20)$$

Les valeurs moyennes de H, N, N^2 sur l'état BCS étant données par :

$$\begin{aligned} \langle N \rangle &= 2 \sum_{\nu > 0} v_\nu^2 \\ \langle N^2 \rangle &= 4 \left(\sum_{\nu > 0} v_\nu^2 \right)^2 + 4 \sum_{\nu > 0} v_\nu^2 u_\nu^2 \\ \langle H \rangle &= 2 \sum_{\nu > 0} \left(\varepsilon_\nu - \frac{G}{2} v_\nu^2 \right) v_\nu^2 - G \left(\sum_{\nu > 0} u_\nu v_\nu \right)^2 \end{aligned}$$

En écrivant que $\delta (E_n) = 0$, on obtient les équations :

$$\frac{\partial}{\partial v_\nu} (E_n) = 0 \quad : \quad \forall \nu \quad (2.21)$$

avec la condition :

$$v_\nu^2 + u_\nu^2 = 1 \quad : \quad \forall \nu$$

Comme :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial v_\nu} (\langle \mathbb{H} \rangle) &= 4 (\varepsilon_\nu - \lambda_1 - G v_\nu^2) v_\nu - G \left(\sum_{\nu>0} u_\nu v_\nu \right) \left(u_\nu - \frac{v_\nu^2}{u_\nu} \right) \\
&\quad - 4\lambda_2 \left(4 \left(\sum_{\nu>0} v_\nu^2 \right) v_\nu + 2u_\nu^2 v_\nu - 2v_\nu^3 \right) \\
&= 4 (\varepsilon_\nu - \lambda_1 - G v_\nu^2) v_\nu - 2\Delta \left(\frac{u_\nu^2 - v_\nu^2}{u_\nu} \right) \\
&\quad - 4\lambda_2 (2n_1 v_\nu + 2 (u_\nu^2 - v_\nu^2) v_\nu)
\end{aligned} \tag{2.22}$$

avec les notations : $\Delta = \sum_{\nu>0} u_\nu v_\nu$ et $n_1 = 2 \sum_{\nu>0} v_\nu^2$

L'équation (2.22) s'écrit également sous la forme :

$$4 (\varepsilon_\nu - \lambda_1 - G v_\nu^2) v_\nu - 2\Delta \left(\frac{u_\nu^2 - v_\nu^2}{u_\nu} \right) - 4\lambda_2 (2n_1 v_\nu + 2 (u_\nu^2 - v_\nu^2) v_\nu) = 0 \tag{2.23}$$

soit :

$$2 \{ \varepsilon_\nu - \lambda_1 - G v_\nu^2 - 2\lambda_2 (n_1 + (u_\nu^2 - v_\nu^2)) \} u_\nu v_\nu = \Delta (u_\nu^2 - v_\nu^2)$$

ou encore :

$$2 \{ \varepsilon_\nu - \lambda_1 + (4\lambda_2 - G) v_\nu^2 - 2\lambda_2 (n_1 + 1) \} u_\nu v_\nu = \Delta (u_\nu^2 - v_\nu^2)$$

En posant :

$$\lambda = \lambda_1 + 2\lambda_2 (n_1 + 1) \tag{2.24}$$

on aboutit aux équations :

$$2 \{ \varepsilon_\nu - \lambda + (4\lambda_2 - G) v_\nu^2 \} u_\nu v_\nu = \Delta (u_\nu^2 - v_\nu^2), \forall \nu \tag{2.25}$$

A partir de la relation, : $v_\nu^2 + u_\nu^2 = 1$, on peut aussi poser :

$$u_\nu = \sin \theta_\nu \text{ et } v_\nu = \cos \theta_\nu \tag{2.26}$$

les équations (2.25) deviennent :

$$\{\varepsilon_\nu - \lambda + (4\lambda_{2-}G) v_\nu^2\} \sin 2\theta_\nu = \Delta \cos 2\theta_\nu \quad (2.27)$$

ou encore :

$$tg 2\theta_\nu = \frac{\Delta}{A} \quad (2.28)$$

avec :

$$A = \{\varepsilon_\nu - \lambda + (4\lambda_{2-}G) v_\nu^2\} \quad (2.29)$$

Et comme :

$$\cos^2 \theta = \frac{1}{2} \left\{ 1 + \frac{1}{\sqrt{1 + tg^2 2\theta}} \right\} \quad \text{et} \quad \sin^2 \theta = \frac{1}{2} \left\{ 1 - \frac{1}{\sqrt{1 + tg^2 2\theta}} \right\}$$

on obtient pour les paramètres u_ν^2 et v_ν^2 les expressions suivantes :

$$\left. \begin{matrix} u_\nu^2 \\ v_\nu^2 \end{matrix} \right\} = \frac{1}{2} \left\{ 1 \pm \frac{\varepsilon_\nu - \lambda + (4\lambda_{2-}G) v_\nu^2}{\sqrt{(\varepsilon_\nu - \lambda + (4\lambda_{2-}G) v_\nu^2)^2 + \Delta^2}} \right\} \quad (2.30)$$

ou en posant :

$$\tilde{\varepsilon}_\nu = \varepsilon_\nu + (4\lambda_{2-}G) v_\nu^2 \quad (2.31)$$

$$\left. \begin{matrix} u_\nu^2 \\ v_\nu^2 \end{matrix} \right\} = \frac{1}{2} \left\{ 1 \pm \frac{\tilde{\varepsilon}_\nu - \lambda}{\sqrt{(\tilde{\varepsilon}_\nu - \lambda)^2 + \Delta^2}} \right\} \quad (2.32)$$

On voit bien que les expressions de u_ν^2 et v_ν^2 ont une forme similaires à celles de la théorie BCS. La différence réside dans les expressions des quantités : $\tilde{\varepsilon}_\nu = \varepsilon_\nu - Gv_\nu^2$ qui sont remplacées par les expressions (2.31) et également λ qui est remplacée par l'expression (2.24). Les équations BCS peuvent être obtenues à partir de ces équations en posant $\lambda_2 = 0$.

2.4 Détermination des coefficients λ_1 et λ_2

On revient maintenant aux équations permettant de déterminer λ_1 et λ_2 . Comme on a vu précédemment, λ_1 et λ_2 sont déterminés à partir des conditions (2.17) :

$$\langle \Psi | \mathbb{H} (N - \langle N \rangle) | \Psi \rangle = \langle \Psi | \mathbb{H} (N^2 - \langle N^2 \rangle) | \Psi \rangle = 0$$

2.4.1 Condition sur λ_1

La condition sur λ_1 s'écrit :

$$\langle \Psi | \mathbb{H} (N - \langle N \rangle) | \Psi \rangle = 0$$

ou encore :

$$\langle \Psi | \mathbb{H} N | \Psi \rangle = \langle \Psi | \mathbb{H} | \Psi \rangle \langle \Psi | N | \Psi \rangle \quad (2.33)$$

en remplaçant $\mathbb{H}$ par son expression, il vient :

$$\langle (H - \lambda_1 N - \lambda_2 N^2) N \rangle = \langle (H - \lambda_1 N - \lambda_2 N^2) \rangle \langle N \rangle \quad (2.34)$$

où les valeurs moyennes sont calculées sur le vide $|\Psi\rangle$ de BCS :

$$\langle HN \rangle - \lambda_1 \langle N^2 \rangle - \lambda_2 \langle N^3 \rangle = \langle H \rangle \langle N \rangle - \lambda_1 \langle N \rangle^2 - \lambda_2 \langle N \rangle \langle N^2 \rangle \quad (2.35)$$

et sachant que : $\Delta N = N - \langle N \rangle$ et $\Delta N^2 = N^2 - \langle N \rangle^2$, l'équation (2.35) s'écrit alors :

$$\langle H \Delta N \rangle - \lambda_1 \langle (\Delta N)^2 \rangle - \lambda_2 \langle N^2 (\Delta N) \rangle = 0 \quad (2.36)$$

on aboutit finalement à l'expression de λ_1 :

$$\lambda_1 = \frac{\langle H \Delta N \rangle}{\langle (\Delta N)^2 \rangle} - \lambda_2 \frac{\langle N^2 (\Delta N) \rangle}{\langle (\Delta N)^2 \rangle} \quad (2.37)$$

2.4.2 Condition sur λ_2

La condition sur λ_2 s'écrit :

$$\langle \Psi | \mathbb{H} (N^2 - \langle N^2 \rangle) | \Psi \rangle = 0$$

ou bien :

$$\langle \Psi | \mathbb{H} N^2 | \Psi \rangle = \langle \Psi | \mathbb{H} | \Psi \rangle \langle \Psi | N^2 | \Psi \rangle \quad (2.38)$$

En remplaçant $\mathbb{H}$ par son expression, il vient :

$$\begin{aligned} \langle (H - \lambda_1 N - \lambda_2 N^2) N^2 \rangle &= \langle (H - \lambda_1 N - \lambda_2 N^2) \rangle \langle N^2 \rangle \\ \langle H N^2 \rangle - \lambda_1 \langle N^3 \rangle - \lambda_2 \langle N^4 \rangle &= \langle H \rangle \langle N^2 \rangle - \lambda_1 \langle N \rangle \langle N^2 \rangle - \lambda_2 \langle N^2 \rangle^2 \end{aligned} \quad (2.39)$$

l'équation (2.39) s'écrit autrement :

$$\langle H (N^2 - \langle N^2 \rangle) \rangle - \lambda_1 \langle N^2 (\Delta N) \rangle - \lambda_2 (\langle N^4 \rangle - \langle N^2 \rangle^2) = 0 \quad (2.40)$$

On aboutit à une expression de λ_2 en fonction de λ_1 :

$$\lambda_2 = \frac{\langle H (N^2 - \langle N^2 \rangle) \rangle}{\langle N^4 \rangle - \langle N^2 \rangle^2} - \lambda_1 \frac{\langle N^2 (\Delta N) \rangle}{\langle N^4 \rangle - \langle N^2 \rangle^2} \quad (2.41)$$

et en substituant λ_1 par sa valeur calculée dans (2.37) il vient :

$$\lambda_2 = \frac{\langle H (N^2 - \langle N^2 \rangle) \rangle - \langle H (\Delta N) \rangle \frac{\langle N^2 (\Delta N) \rangle}{\langle (\Delta N)^2 \rangle}}{\langle N^4 \rangle - \langle N^2 \rangle^2 - \frac{\langle N^2 (\Delta N) \rangle}{\langle (\Delta N)^2 \rangle}} \quad (2.42)$$

et comme

$$\langle N^2 (\Delta N) \rangle = \langle N^3 \rangle - \langle N \rangle \langle N^2 \rangle = \langle (\Delta N)^3 \rangle + 2 \langle N \rangle \langle (\Delta N)^2 \rangle$$

on obtient :

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

D'autre part, on a :

$$\langle H (N^2 - \langle N^2 \rangle) \rangle - 2 \langle N \rangle \langle H (\Delta N) \rangle = \langle H [(\Delta N)^2 - \langle (\Delta N)^2 \rangle] \rangle$$

et également :

$$\langle N^4 \rangle - \langle N^2 \rangle^2 - \langle N \rangle^2 \langle (\Delta N)^2 \rangle - 4 \langle N \rangle \langle (\Delta N)^3 \rangle = \langle (\Delta N)^4 \rangle - \langle (\Delta N)^2 \rangle^2$$

on aboutit finalement à l'expression de λ_2 [19, 42] :

$$\lambda_2 = \frac{\langle H [(\Delta N)^2 - \langle (\Delta N)^2 \rangle] \rangle - \langle H (\Delta N) \rangle \frac{\langle (\Delta N)^3 \rangle}{\langle (\Delta N)^2 \rangle}}{\langle (\Delta N)^4 \rangle - \langle (\Delta N)^2 \rangle^2 - \frac{(\langle (\Delta N)^3 \rangle)^2}{\langle (\Delta N)^2 \rangle}} \quad (2.43)$$

Le calcul de λ_1 et λ_2 nécessite celui des valeurs moyennes : $\langle (\Delta N)^3 \rangle$, $\langle (\Delta N)^4 \rangle$, $\langle H (\Delta N) \rangle$, et $\langle H (\Delta N)^2 \rangle$.

Comme :

$$\begin{aligned} \langle (\Delta N)^2 \rangle &= \langle N^2 \rangle - \langle N \rangle^2 \\ \text{et : } \langle N^2 \rangle &= (\langle \Psi | N) (N | \Psi) \end{aligned}$$

où N s'écrit en représentation quasi-particules :

$$N = 2 \sum_{\nu > 0} v_\nu^2 + 2 \sum_{\nu > 0} u_\nu v_\nu \alpha_\nu^\dagger \alpha_\nu$$

il vient successivement :

$$\begin{aligned} \langle N^2 \rangle &= \left(\langle \Psi | \left[2 \sum_{\nu > 0} v_\nu^2 + 2 \sum_{\nu > 0} u_\nu v_\nu \alpha_\nu^\dagger \alpha_\nu \right] \right) \times \\ &\quad \left(\left[2 \sum_{\mu > 0} v_\mu^2 + 2 \sum_{\mu > 0} u_\mu v_\mu \alpha_\mu^\dagger \alpha_\mu \right] | \Psi \rangle \right) \\ &= 4 \left(\sum_{\nu > 0} v_\nu^2 \right)^2 + 4 \sum_{\nu, \mu > 0} u_\nu v_\nu u_\mu v_\mu \delta_{\nu\mu} \\ &= 4 \left(\sum_{\nu > 0} v_\nu^2 \right)^2 + 4 \sum_{\nu > 0} u_\nu^2 v_\nu^2 \end{aligned} \quad (2.44)$$

on obtient ainsi :

$$\langle (\Delta N)^2 \rangle = 4 \sum_{\nu > 0} u_\nu^2 v_\nu^2 \quad (2.45)$$

De même on a :

$$\langle H \Delta N \rangle = \{ \langle \Psi | (N - \langle N \rangle) \} (H | \Psi \rangle) \quad (2.46)$$

et comme [42] :

$$H | \Psi \rangle = \left(\langle H \rangle + \left\{ 2 \sum_{\nu>0} \varepsilon_\nu u_\nu v_\nu - 2G \sum_{\nu>0} u_\nu v_\nu^3 - \Delta \sum_{\nu>0} (u_\nu^2 - v_\nu^2) \right\} \alpha_\nu^\dagger \alpha_\nu^\dagger \right) | \Psi \rangle \quad (2.47)$$

on aura :

$$\langle H \Delta N \rangle = 4 \sum_{\nu>0} \varepsilon_\nu u_\nu^2 v_\nu^2 - G \sum_{\nu>0} u_\nu v_\nu^3 - 2\Delta \sum_{\nu>0} u_\nu v_\nu (u_\nu^2 - v_\nu^2) \quad (2.48)$$

De la même façon :

$$\begin{aligned} \langle (\Delta N)^3 \rangle &= \langle N^3 \rangle - 3 \langle N \rangle \langle N^2 \rangle + 2 \langle N \rangle^3 \\ &= 8 \sum_{\nu>0} u_\nu^2 v_\nu^2 (u_\nu^2 - v_\nu^2) \end{aligned} \quad (2.49)$$

$$\langle (\Delta N)^4 \rangle = 3 \langle (\Delta N)^2 \rangle^2 + 4 \langle (\Delta N)^2 \rangle - 6 \sum_{\nu>0} (2u_\nu v_\nu)^4 \quad (2.50)$$

et également [42] :

$$\begin{aligned} \langle H [(\Delta N)^2 - \langle (\Delta N)^2 \rangle] \rangle &= -8 \sum_{\nu>0} \varepsilon_\nu u_\nu^2 v_\nu^2 (v_\nu^2 - u_\nu^2) + 8G \sum_{\nu>0} u_\nu^2 v_\nu^4 (v_\nu^2 - 2u_\nu^2) \\ &\quad + 2G \left(\sum_{\nu>0} u_\nu v_\nu \right) \sum_{\nu>0} u_\nu v_\nu (8v_\nu^2 u_\nu^2 - 1) \\ &\quad - 2G \left(\sum_{\nu>0} u_\nu v_\nu (v_\nu^2 - u_\nu^2) \right)^2 \end{aligned} \quad (2.51)$$

on obtient finalement, tout calcul fait [19, 42, 47] :

$$\lambda_2 = \frac{G}{4} \frac{\left\{ \left(\sum_{\nu>0} u_\nu^3 v_\nu \right) \left(\sum_{\nu>0} u_\nu v_\nu^3 \right) - \sum_{\nu>0} u_\nu^4 v_\nu^4 \right\}}{\left\{ \left(\sum_{\nu>0} u_\nu^2 v_\nu^2 \right)^2 - \sum_{\nu>0} u_\nu^4 v_\nu^4 \right\}} \quad (2.52)$$

Après avoir calculé les précédentes valeurs moyennes, il est possible d'évaluer le paramètre λ_1 . En effet, d'après (2.37) on a :

$$\lambda_1 = \frac{\langle H \Delta N \rangle}{\langle (\Delta N)^2 \rangle} - \lambda_2 \frac{\langle N^2 (\Delta N) \rangle}{\langle (\Delta N)^2 \rangle}$$

ou encore :

$$\lambda_1 = \frac{\langle H \Delta N \rangle}{\langle (\Delta N)^2 \rangle} - \lambda_2 \frac{\langle (\Delta N)^3 \rangle + 2 \langle N \rangle \langle (\Delta N)^2 \rangle}{\langle (\Delta N)^2 \rangle} \quad (2.53)$$

En remplaçant les différentes valeurs moyennes par celles calculées précédemment, on obtient :

$$\begin{aligned} \lambda_1 = & \frac{4 \sum_{\nu>0} \varepsilon_\nu u_\nu^2 v_\nu^2 - G \sum_{\nu>0} u_\nu v_\nu^3 - 2 \Delta \sum_{\nu>0} u_\nu v_\nu (u_\nu^2 - v_\nu^2)}{4 \sum_{\nu>0} u_\nu^2 v_\nu^2} \\ & - \lambda_2 \frac{8 \sum_{\nu>0} u_\nu^2 v_\nu^2 (u_\nu^2 - v_\nu^2) + 16 \left(\sum_{\nu>0} v_\nu^2 \right) \sum_{\nu>0} u_\nu^2 v_\nu^2}{4 \sum_{\nu>0} u_\nu^2 v_\nu^2} \end{aligned} \quad (2.54)$$

et après quelques simplifications :

$$\lambda_1 = \varepsilon_\nu - G v_\nu^2 - \Delta \frac{(u_\nu^2 - v_\nu^2)}{2 u_\nu v_\nu} - 2 \lambda_2 \left((u_\nu^2 - v_\nu^2) + 2 \left(\sum_{\nu>0} v_\nu^2 \right) \right) \quad (2.55)$$

En utilisant la contrainte : $\langle N \rangle = n$, on trouve :

$$\lambda_1 = \varepsilon_\nu - G v_\nu^2 - \Delta \frac{(u_\nu^2 - v_\nu^2)}{2 u_\nu v_\nu} - 2 \lambda_2 ((u_\nu^2 - v_\nu^2) + n)$$

soit finalement :

$$2 (\varepsilon_\nu - \lambda_1 - (4 \lambda_2 - G) v_\nu^2 - 2 \lambda_2 (n + 1)) u_\nu v_\nu = \Delta (u_\nu^2 - v_\nu^2) \quad (2.56)$$

On s'aperçoit que la condition sur λ_1 est équivalente à l'équation variationnelle (2.19), (2.25), ce qui confirme que λ_1 est un multiplicateur de Lagrange. Par contre, λ_2 n'est pas un multiplicateur de Lagrange, et ne peut par conséquent, être déterminé à partir d'une équation variationnelle.

2.5 Energie de l'état fondamental

D'après l'équation (2.18), l'énergie de l'état fondamental s'écrit :

$$E_n^{LN} = \langle n | H | n \rangle = \langle \Psi | \mathbb{H} | \Psi \rangle + \lambda_1 n + \lambda_2 n^2$$

en remplaçant $\mathbb{H}$ par son expression, on obtient :

$$E_n^{LN} = \langle \Psi | H | \Psi \rangle - \lambda_2 \langle (\Delta N)^2 \rangle \quad (2.57)$$

$$= \sum_{\nu>0} (\varepsilon_\nu - G v_\nu^2) v_\nu^2 - \frac{\Delta^2}{G} - 4\lambda_2 \sum_{\nu>0} u_\nu^2 v_\nu^2 \quad (2.58)$$

On remarque que l'approximation Lipkin-Nogami introduit la correction $-\lambda_2 \langle (\Delta N)^2 \rangle$ par rapport à l'énergie BCS.

Chapitre 3

L'approximation des phases aléatoires

3.1 Introduction

En plus des méthodes de projection, l'approximation des phases aléatoires pour quasi-particules QRPA offre un autre moyen pour la restauration approximative de la symétrie de conservation du nombre de particules, brisée dans la théorie BCS. En effet, la QRPA permet la prise en compte d'une partie de l'interaction résiduelle entre quasi-particules. Cette partie a été totalement négligée dans la théorie BCS ce qui semble être à l'origine de la défaillance de cette dernière.

Cette approximation a été initialement proposée en physique des plasmas par Böhm et Pines [25], et adaptée à la physique nucléaire par Baranger [26] et Sawicki [27]. Permettant d'une façon relativement simple d'obtenir le spectre de l'hamiltonien nucléaire, la QRPA demeure l'une des théories microscopiques les plus utilisées en physique nucléaire, et notamment dans l'étude de la structure nucléaire. Notons que la QRPA peut être obtenue par différentes manières comme par exemple la théorie d'Hartree-Fock dépendante du temps TDHF [29] ou la méthode des fonctions de Green [28]. On présentera dans ce chapitre la QRPA par la méthode des équations du mouvement qui reste la méthode la plus utilisée [1, 2, 26, 30].

3.2 Méthode des équations du mouvement

Considérons un hamiltonien ayant un spectre discret et dont l'état fondamental est représenté par $|0\rangle$ et les états excités par $|\nu\rangle$. Notons par $Q_\nu^\dagger$ et Q_ν les opérateurs d'excitation et leurs adjoints respectivement, définis par :

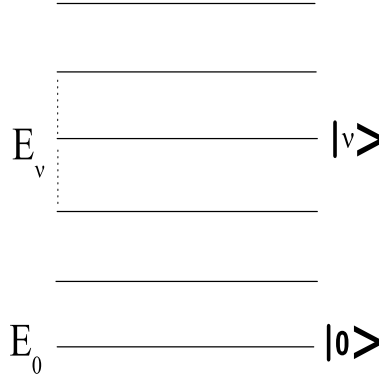


Fig. 3-1 : Spectre discret de l'hamiltonien nucléaire

$$Q_\nu^\dagger |0\rangle = |\nu\rangle \quad \text{et} \quad Q_\nu |0\rangle = 0 \quad \forall \nu \quad (3.1)$$

Les opérateurs $Q_\nu^\dagger$ appliqués à l'état fondamental exact du système $|0\rangle$ génèrent tous les états excités exacts $|\nu\rangle$. L'état $|0\rangle$ correspond donc au vide des opérateurs Q_ν . L'équation aux valeurs propres s'écrit :

$$H |\nu\rangle = E_\nu |\nu\rangle \quad , \quad \forall \nu \quad (3.2)$$

L'état fondamental exact du système $|0\rangle$ ainsi que les états excités $|\nu\rangle$ peuvent être développés sur la base d'Hartree-Fock comme suit :

$$\begin{aligned} |0\rangle &= C_0 |HF\rangle + \sum_{ph} C_{ph} a_p^\dagger a_h |HF\rangle + \sum_{ph,p'h'} C_{ph,p'h'} a_p^\dagger a_h a_{p'}^\dagger a_{h'} |HF\rangle + \dots \\ |\nu\rangle &= C_0^\nu |HF\rangle + \sum_{ph} C_{ph}^\nu a_p^\dagger a_h |HF\rangle + \sum_{ph,p'h'} C_{ph,p'h'}^\nu a_p^\dagger a_h a_{p'}^\dagger a_{h'} |HF\rangle + \dots \end{aligned} \quad (3.3)$$

où l'état $|HF\rangle$ est le vide d'Hartree-Fock dans lequel, tous les états qui se trouvent en dessous du niveau de Fermi ε_F sont occupés et sont appelés états trous et tous ceux qui se trouvent au dessus de ε_F sont vides et sont appelés états particules.

La résolution de l'équation aux valeurs propres (3.2) en utilisant un état fondamental de la forme (3.3) n'est pas facile du tout. Pour cela, on sera obligé de passer par des approximations.

L'équation(3.2) peut s'écrire sous la forme :

$$HQ_\nu^\dagger |0\rangle = E_\nu Q_\nu^\dagger |0\rangle \quad (3.4)$$

En retranchant le terme $Q_\nu^\dagger H |0\rangle = Q_\nu^\dagger E_0 |0\rangle$, il vient :

$$[H, Q_\nu^\dagger] |0\rangle = HQ_\nu^\dagger |0\rangle - Q_\nu^\dagger H |0\rangle = (E_\nu - E_0) |0\rangle \quad (3.5)$$

et en multipliant à gauche par une variation δQ_ν et en soustrayant la quantité $[H, Q_\nu^\dagger] \delta Q_\nu |0\rangle = Q_\nu^\dagger \delta Q_\nu |0\rangle = 0$, on déduit :

$$\delta Q_\nu [H, Q_\nu^\dagger] |0\rangle - [H, Q_\nu^\dagger] \delta Q_\nu |0\rangle = \omega_\nu [\delta Q_\nu, Q_\nu^\dagger] |0\rangle \quad (3.6)$$

où : $\omega_\nu = E_\nu - E_0$ est l'énergie d'excitation de l'état $|\nu\rangle$. Le terme à gauche de l'équation (3.6) est un double commutateur, d'où :

$$[\delta Q_\nu, [H, Q_\nu^\dagger]] |0\rangle = \omega_\nu [\delta Q_\nu, Q_\nu^\dagger] |0\rangle \quad (3.7)$$

en multipliant à gauche par $\langle 0|$, on obtient :

$$\langle 0| [\delta Q_\nu, [H, Q_\nu^\dagger]] |0\rangle = \omega_\nu \langle 0| [\delta Q_\nu, Q_\nu^\dagger] |0\rangle \quad (3.8)$$

Cette équation est évidemment équivalente à l'équation aux valeurs propres initiale. Malheureusement, on ne peut la résoudre exactement car on ne connaît ni la forme du vide $|0\rangle$, ni celle des opérateurs d'excitation $Q_\nu^\dagger$. En pratique, elle est résolue d'une manière approchée. Pour ce faire, on remplace les opérateurs $Q_\nu^\dagger$, Q_ν par des opérateurs approchés $O_\nu^\dagger$, O_ν et on évalue les commutateurs sur un vide approché. Selon le choix de ces opérateurs et du vide, il est possible de déduire plusieurs approches pour l'étude des systèmes à N corps. On verra que la méthode des équations du mouvement permet d'obtenir la RPA.

3.3 Approximation des phases aléatoires (particule-trou)

3.3.1 Le fondamental $|RPA\rangle$ et les opérateurs $O_\nu^\dagger$, O_ν

Considérons l'opérateur d'excitation $O_\nu^\dagger$ et son hermitique adjoint O_ν :

$$\begin{cases} O_\nu^\dagger = \sum_{ph} \left(X_{ph}^\nu a_p^\dagger a_h - Y_{ph}^\nu a_h^\dagger a_p \right) \\ O_\nu = \sum_{ph} \left(X_{ph}^{*,\nu} a_h^\dagger a_p - Y_{ph}^{*,\nu} a_p^\dagger a_h \right) \end{cases} \quad (3.9)$$

dépendant des amplitudes complexes (X^ν, Y^ν) .

Par ailleurs, on définit le fondamental de la RPA par :

$$O_\nu^\dagger |RPA\rangle = |\nu\rangle \quad \text{et} \quad O_\nu |RPA\rangle = 0$$

c'est-à-dire que l'état $|RPA\rangle$ est le vide des opérateurs O_ν . L'action de $O_\nu^\dagger$ sur ce vide est d'une part créer une excitation particule-trou à travers le terme $a_p^\dagger a_h$ avec le poids X_{ph}^ν , et d'autre part détruire une paire trou-particule à travers le terme $a_h^\dagger a_p$ avec le poids Y_{ph}^ν . Afin que ceci soit possible, il faut donc que le vide $|RPA\rangle$ contienne des particules à la fois en dessous et au-dessus de la mer de Fermi, c'est-à-dire qu'il contienne des corrélations. Par conséquent, les états $|\nu\rangle$ correspondent à des sommes corrélées d'excitations particule-trou et trou-particule qui sont caractérisées par les amplitudes complexes (X^ν, Y^ν) et par leurs énergies E_ν . Ces quantités sont déterminées par les équations de la RPA qui vont être établies ci-dessous.

3.3.2 Equations de la RPA

Considérons une variation de O_ν caractérisée par des variations δX_{ph}^ν et δY_{ph}^ν des complexes X_{ph} et Y_{ph} :

$$\delta O_\nu = \sum_{ph} \left(\delta X_{ph}^{*,\nu} a_h^\dagger a_p - \delta Y_{ph}^{*,\nu} a_p^\dagger a_h \right) \quad (3.10)$$

et remplaçons les opérateurs $Q_\nu^\dagger$, δQ_ν et le vide $|0\rangle$ exacts dans l'équation du mouvement (3.8) par les opérateurs et le vide $O_\nu^\dagger$, δO_ν , $|RPA\rangle$, approchés. Il vient :

$$\begin{cases} \sum_{ph} \delta X_{ph}^{*,\nu} \left(\langle RPA | [a_h^\dagger a_p, [H, O_\nu^\dagger]] | RPA \rangle - \omega_\nu \langle RPA | [a_h^\dagger a_p, O_\nu^\dagger] | RPA \rangle \right) = 0 \\ \sum_{ph} \delta Y_{ph}^{*,\nu} \left(\langle RPA | [a_p^\dagger a_h, [H, O_\nu^\dagger]] | RPA \rangle - \omega_\nu \langle RPA | [a_p^\dagger a_h, O_\nu^\dagger] | RPA \rangle \right) = 0 \end{cases} \quad (3.11)$$

les variations $\delta X_{ph}^{*,\nu}$, $\delta Y_{ph}^{*,\nu}$ étant non nulles, on aboutit aux équations :

$$\begin{cases} \langle RPA | [a_h^\dagger a_p, [H, O_\nu^\dagger]] | RPA \rangle = \omega_\nu \langle RPA | [a_h^\dagger a_p, O_\nu^\dagger] | RPA \rangle \\ \langle RPA | [a_p^\dagger a_h, [H, O_\nu^\dagger]] | RPA \rangle = \omega_\nu \langle RPA | [a_p^\dagger a_h, O_\nu^\dagger] | RPA \rangle \end{cases} \quad (3.12)$$

La résolution de ces équations nécessite le calcul préalable des valeurs moyennes des commutateurs comme :

$$\begin{aligned} \langle RPA | [A_{ph}, O_\nu^\dagger] | RPA \rangle &= \sum_{p'h'} \left\{ X_{p'h'}^\nu \langle RPA | [A_{ph}, A_{p'h'}^\dagger] | RPA \rangle \right. \\ &\quad \left. - Y_{p'h'}^\nu \langle RPA | [A_{ph}, A_{p'h'}] | RPA \rangle \right\} \end{aligned} \quad (3.13)$$

où : $A_{ph}^\dagger = a_p^\dagger a_h$ et $A_{ph} = a_h^\dagger a_p$ sont les opérateurs de création et de destruction de paires particule-trou.

Le calcul de ces valeurs moyennes n'est guère évident car on ne connaît pas pour le moment l'état $|RPA\rangle$. Pour cela, on se contente généralement de l'approximation dite "approximation des quasi-bosons", dans laquelle les opérateurs de création et d'annihilation de paires $A_{ph}^\dagger$ et A_{ph} sont traités comme des opérateurs de bosons, ce qui permet d'écrire [1, 2, 11] :

$$\begin{aligned} [A_{ph}^\dagger, A_{p'h'}] &\simeq \langle HF | [A_{ph}^\dagger, A_{p'h'}] | HF \rangle \\ &= \delta_{pp'} \delta_{hh'} \end{aligned} \quad (3.14)$$

Il faut souligner que le principe de Pauli n'est pas satisfait dans cette approximation. Ceci est évident puisque des termes provenant des relations de commutations des opérateurs de création et d'annihilation de paires ont été négligés. Cette approxi-

mation (QBA) constitue le point faible de la RPA du moment qu'elle est à l'origine de ce qui appelé communément "point d'effondrement de la RPA " (*collapse of RPA*).

En utilisant les nouvelles relations de commutation(3.14), le système d'équations (3.12) devient :

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_j \left\{ X_j^\nu \langle HF | \left[A_i, \left[H, A_j^\dagger \right] \right] | HF \rangle - Y_j^\nu \langle HF | \left[A_i, \left[H, A_j \right] \right] | HF \rangle \right\} \\ \quad = \omega_\nu \sum_j \left\{ X_j^\nu \langle HF | \left[A_i, A_j^\dagger \right] | HF \rangle - Y_j^\nu \langle HF | \left[A_i, A_j \right] | HF \rangle \right\} \\ \\ \sum_j \left\{ X_j^\nu \langle HF | \left[A_i^\dagger, \left[H, A_j^\dagger \right] \right] | HF \rangle - Y_j^\nu \langle HF | \left[A_i^\dagger, \left[H, A_j \right] \right] | HF \rangle \right\} \\ \quad = \omega_\nu \sum_j \left\{ X_j^\nu \langle HF | \left[A_i^\dagger, A_j^\dagger \right] | HF \rangle - Y_j^\nu \langle HF | \left[A_i^\dagger, A_j \right] | HF \rangle \right\} \end{array} \right. \quad (3.15)$$

où l'on a noté, pour alléger l'écriture : $i \equiv (ph)$ et $j \equiv (p'h')$ soit :

$$A_i^\dagger = a_p^\dagger a_h \quad \text{et} \quad A_i = a_h^\dagger a_p$$

En notation matricielle les équations de la RPA s'écrivent :

$$\begin{pmatrix} \mathcal{A} & \mathcal{B} \\ \mathcal{B}^* & \mathcal{A}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X^\nu \\ Y^\nu \end{pmatrix} = \omega_\nu \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X^\nu \\ Y^\nu \end{pmatrix} \quad (3.16)$$

équations pour lesquelles les matrices $\mathcal{A}$ et $\mathcal{B}$ ont pour éléments :

$$\left\{ \begin{array}{l} (\mathcal{A})_{ij} = \langle HF | \left[A_i, \left[H, A_j^\dagger \right] \right] | HF \rangle \\ (\mathcal{A}^*)_{ij} = \langle HF | \left[A_i^\dagger, \left[H, A_j \right] \right] | HF \rangle \\ (\mathcal{B})_{ij} = - \langle HF | \left[A_i, \left[H, A_j \right] \right] | HF \rangle \\ (\mathcal{B}^*)_{ij} = - \langle HF | \left[A_i^\dagger, \left[H, A_j^\dagger \right] \right] | HF \rangle \end{array} \right. \quad (3.17)$$

3.3.3 Propriétés des solutions de la RPA

L'équation de la RPA et son complexe conjugué peuvent s'écrire sous la forme condensée suivante [1] :

$$\delta\chi = \eta\chi\Omega \quad (3.18)$$

avec :

$$\delta = \begin{pmatrix} \mathcal{A} & \mathcal{B} \\ \mathcal{B}^* & \mathcal{A}^* \end{pmatrix} \quad (3.19)$$

δ est appelée matrice de stabilité.

et :

$$\chi = \begin{pmatrix} X & Y^* \\ Y & X^* \end{pmatrix}, \quad \eta = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \Omega = \begin{pmatrix} \omega_\nu & 0 \\ 0 & -\omega_\nu \end{pmatrix} \quad (3.20)$$

Etant donné que les états excités doivent être mutuellement orthogonaux, on peut écrire :

$$\begin{aligned} \langle \nu | \nu' \rangle &= \delta_{\nu\nu'} \\ &= \langle RPA | [Q_\nu, Q_{\nu'}^\dagger] | RPA \rangle \\ &\simeq \langle HF | [Q_\nu, Q_{\nu'}^\dagger] | HF \rangle \\ &= \sum_{ph} \left(X_{ph}^\nu X_{ph}^{\nu',*} - Y_{ph}^\nu Y_{ph}^{\nu',*} \right) \end{aligned} \quad (3.21)$$

En utilisant les notations matricielles précédentes, la condition d'orthogonalité s'écrit :

$$\chi^\dagger \eta \chi = \eta \quad (3.22)$$

3.3.4 Représentation bosons et énergie de la RPA

L'approximation des quasi-bosons (3.14) qui a été utilisée pour l'obtention des équations de la RPA correspond à l'ordre un de la méthode de développement en bosons [1]. Cette méthode consiste à remplacer les opérateurs fermioniques par un développement en série d'opérateurs bosoniques :

$$(A_\mu^\dagger)_F = (B_\mu^\dagger)_B + \sum_{\nu\rho\sigma} \Gamma_{\rho\sigma}^{\mu\nu} (B_\nu^\dagger B_\rho^\dagger B_\sigma)_B + \dots \quad (3.23)$$

Dans le cadre de la QBA, les opérateurs de création et d'annihilation de paires $A_{ph}^\dagger$, A_{ph} sont remplacés par le développement (3.23) à l'ordre un et tous les ordres

supérieurs sont négligés, soit :

$$A_{ph}^\dagger \longrightarrow B_{ph}^\dagger \quad , \quad A_{ph} \longrightarrow B_{ph} \quad (3.24)$$

où les opérateurs $B_{ph}^\dagger, B_{ph}$ obéissent aux relations de commutations habituelles des bosons :

$$[B_{ph}, B_{p'h'}] = [B_{ph}^\dagger, B_{p'h'}^\dagger] = 0 \quad , \quad [B_{ph}, B_{p'h'}^\dagger] = \delta_{pp'} \delta_{hh'} \quad (3.25)$$

Dans cette nouvelle représentation, l'hamiltonien H est approximé par un hamiltonien H_B . Ce dernier ne contient que les termes quadratiques en B et $B^\dagger$:

$$H_B = E_{HF} + \sum_{php'h'} \mathcal{A}_{php'h'} B_{ph}^\dagger B_{p'h'} + \frac{1}{2} \sum_{php'h'} \left(\mathcal{B}_{php'h'} B_{ph}^\dagger B_{p'h'}^\dagger + h.c \right) \quad (3.26)$$

où h.c représente l'hermitique conjugué et les coefficients $\mathcal{A}_{php'h'}$ et $\mathcal{B}_{php'h'}$ sont déterminés par les conditions (3.17) :

$$\begin{aligned} \langle HF | [B_{ph}, [H_B, B_{p'h'}^\dagger]] | HF \rangle &= \langle HF | [A_{ph}, [H_B, A_{p'h'}^\dagger]] | HF \rangle = \mathcal{A}_{php'h'} \\ \langle HF | [B_{ph}, [H_B, B_{p'h'}]] | HF \rangle &= \langle HF | [A_{ph}, [H_B, A_{p'h'}]] | HF \rangle = -\mathcal{B}_{php'h'} \end{aligned} \quad (3.27)$$

L'expression de H_B peut s'écrire sous la forme suivante :

$$H_B = E_{HF} - \frac{1}{2} \sum_{ph} \mathcal{A}_{phph} + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} B^\dagger & B \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{A} & \mathcal{B} \\ \mathcal{B} & \mathcal{A} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B \\ B^\dagger \end{pmatrix} \quad (3.28)$$

où la constante E_{HF} correspond à la valeur moyenne de l'hamiltonien sur le vide $|HF\rangle$.

En utilisant la transformation inverse de (3.9) :

$$\begin{pmatrix} B \\ B^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X & Y^* \\ Y & X^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} O \\ O^\dagger \end{pmatrix} = \chi \begin{pmatrix} O \\ O^\dagger \end{pmatrix} \quad (3.29)$$

l'équation(3.28) devient :

$$H_B = E_{HF} - \frac{1}{2} Tr(\mathcal{A}) + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} O^\dagger & O \end{pmatrix} \chi^\dagger \delta \chi \begin{pmatrix} O \\ O^\dagger \end{pmatrix} \quad (3.30)$$

En tenant compte de l'équation de la RPA (3.18) et la relation d'orthogonalité (3.22), on obtient :

$$H_B = E_{HF} - \frac{1}{2}Tr(\mathcal{A}) + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} O^\dagger & O \end{pmatrix} \chi^\dagger \eta \chi \Omega \begin{pmatrix} O \\ O^\dagger \end{pmatrix} \quad (3.31)$$

$$= E_{HF} - \frac{1}{2}Tr(\mathcal{A}) + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} O^\dagger & O \end{pmatrix} \eta \Omega \begin{pmatrix} O \\ O^\dagger \end{pmatrix} \quad (3.32)$$

$$= E_{HF} - \frac{1}{2}Tr(\mathcal{A}) + \frac{1}{2} \sum_{\nu} \omega_{\nu} (O_{\nu}^\dagger O_{\nu} + O_{\nu} O_{\nu}^\dagger) \quad (3.33)$$

Comme $O_{\nu}^\dagger$ et O_{ν} sont des opérateurs bosoniques, on a :

$$O_{\nu} O_{\nu}^\dagger = 1 + O_{\nu}^\dagger O_{\nu} \quad (3.34)$$

L'hamiltonien H_B s'écrit alors :

$$H_B = E_{HF} - \frac{1}{2}Tr(\mathcal{A}) + \frac{1}{2} \sum_{\nu} \omega_{\nu} + \sum_{\nu} \omega_{\nu} O_{\nu}^\dagger O_{\nu} \quad (3.35)$$

On remarque que l'hamiltonien H_B est diagonal dans la nouvelle représentation et l'énergie du fondamental de la RPA est donnée par :

$$E_{RPA} = E_{HF} + \frac{1}{2} \left(\sum_{\nu} \omega_{\nu} - Tr(\mathcal{A}) \right) \quad (3.36)$$

Signalons que cette énergie peut avoir des valeurs en dessous de l'énergie exacte car la RPA n'est pas basée sur un principe variationnel.

3.4 Approximation des phases aléatoires pour quasi-particules

3.4.1 Les équations de la QRPA

Dans les noyaux, les effets d'appariement sont si importants qu'il n'est plus possible de les ignorer. On a vu dans l'introduction les limites des théories du champ moyen et de la théorie BCS, et qu'il est nécessaire d'aller au delà. L'approximation

des phases aléatoires pour quasi-particules comprend deux étapes :

1. D'abord, la définition d'un champ moyen pour quasi-particules pour rendre compte des effets d'appariement, ce qui est réalisé dans la théorie BCS qui suppose que les quasi-particules sont indépendantes.
2. Ensuite, l'inclusion de la partie à deux corps de l'interaction résiduelle entre quasi-particules.

En représentation quasi-particules, l'hamiltonien $H' = H - \lambda N$ a pour forme (voir *Annexe. A*) :

$$H' = E_0 + H^{11} + H^{31} + H^{40} + H^{22} \quad (3.37)$$

Dans la théorie BCS les excitations s'obtiennent par la création de paires de quasi-particules appariées :

$$|\nu\bar{\nu}\rangle = \alpha_\nu^\dagger \alpha_{\bar{\nu}}^\dagger |\Psi\rangle \quad (3.38)$$

par voie de conséquence, l'opérateur d'excitation de la RPA (3.9) est remplacé par :

$$O_\nu^\dagger = \sum_{\mu>0} \left(X_\mu^\nu \alpha_\mu^\dagger \alpha_{\bar{\mu}}^\dagger - Y_\mu^\nu \alpha_{\bar{\mu}} \alpha_\mu \right) \quad (3.39)$$

avec l'adoption de la notation suivante :

$$A_\nu^\dagger = \alpha_\mu^\dagger \alpha_{\bar{\mu}}^\dagger \quad \text{et} \quad A_\nu = \alpha_{\bar{\nu}} \alpha_\nu$$

l'opérateur $O_\nu^\dagger$ s'écrit :

$$O_\nu^\dagger = \sum_{\mu>0} \left(X_\mu^\nu A_\mu^\dagger - Y_\mu^\nu A_\mu \right) \quad (3.40)$$

En vue d'établir les équations de la QRPA, on suivra la démarche précédente. La variation δO_ν s'écrit :

$$\delta O_\nu = O_\nu^\dagger = \sum_{\mu>0} \left(\delta X_\mu^{*,\nu} A_\mu^\dagger - Y_\mu^{*,\nu} A_\mu \right) \quad (3.41)$$

en remplaçant $O_\nu^\dagger$ et δO_ν dans l'équation du mouvement (3.8) :

$$\langle 0 | [\delta O_\nu, [H, O_\nu^\dagger]] | 0 \rangle = \omega_\nu \langle 0 | [\delta O_\nu, O_\nu^\dagger] | 0 \rangle \quad (3.42)$$

où $|0\rangle$ désigne le vide $|QRPA\rangle$ qui correspond au vide des opérateurs O_ν :

$$O_\nu |0\rangle = O_\nu |QRPA\rangle = 0 \quad \text{et} \quad , \forall \nu \quad (3.43)$$

on obtient le système d'équations :

$$\begin{cases} \sum_\mu \delta X_\mu^{*,\nu} (\langle 0 | [A_\mu, [H, O_\nu^\dagger]] | 0 \rangle - \omega_\nu \langle 0 | [A_\mu, O_\nu^\dagger] | 0 \rangle) = 0 \\ \sum_\mu \delta Y_\mu^{*,\nu} (\langle 0 | [A_\mu^\dagger, [H, O_\nu^\dagger]] | 0 \rangle - \omega_\nu \langle 0 | [A_\mu^\dagger, O_\nu^\dagger] | 0 \rangle) = 0 \end{cases} \quad (3.44)$$

les variations $\delta X_\mu^{*,\nu}$ et $\delta Y_\mu^{*,\nu}$ étant non nulles, il vient :

$$\begin{cases} \langle 0 | [A_\mu, [H, O_\nu^\dagger]] | 0 \rangle = \omega_\nu \langle 0 | [A_\mu, O_\nu^\dagger] | 0 \rangle \\ \langle 0 | [A_\mu^\dagger, [H, O_\nu^\dagger]] | 0 \rangle = \omega_\nu \langle 0 | [A_\mu^\dagger, O_\nu^\dagger] | 0 \rangle \end{cases} \quad (3.45)$$

en remplaçant $O_\nu^\dagger$ par son expression (3.21) il vient alors :

$$\begin{cases} \sum_l \left\{ X_l^\nu \langle 0 | [A_\mu, [H, A_l^\dagger]] | 0 \rangle - Y_l^\nu \langle 0 | [A_\mu, [H, A_l]] | 0 \rangle \right\} \\ = \omega_\nu \sum_l \left\{ X_l^\nu \langle 0 | [A_\mu, A_l^\dagger] | 0 \rangle - Y_l^\nu \langle 0 | [A_\mu, A_l] | 0 \rangle \right\} \\ \sum_l \left\{ X_l^\nu \langle 0 | [A_\mu^\dagger, [H, A_l^\dagger]] | 0 \rangle - Y_l^\nu \langle 0 | [A_\mu^\dagger, [H, A_l]] | 0 \rangle \right\} \\ = \omega_\nu \sum_l \left\{ X_l^\nu \langle 0 | [A_\mu^\dagger, A_l^\dagger] | 0 \rangle - Y_l^\nu \langle HF | [A_\mu^\dagger, A_l] | 0 \rangle \right\} \end{cases} \quad (3.46)$$

Afin de calculer ces valeurs moyennes, on utilise l'approximation des quasi-bosons QBA qui consiste à remplacer les valeurs moyennes sur le vide $|QRPA\rangle$ par celles calculées sur l'état BCS $|\Psi\rangle$.

En utilisant cette approximation on a :

$$\begin{aligned} \langle \Psi | [A_\mu^\dagger, A_\nu^\dagger] | \Psi \rangle &= \langle \Psi | [A_\mu, A_\nu] | \Psi \rangle = 0 \\ \langle \Psi | [A_\mu^\dagger, A_\nu] | \Psi \rangle &= \langle \Psi | [A_\mu, A_\nu^\dagger] | \Psi \rangle = \delta_{\nu\mu} \end{aligned} \quad (3.47)$$

le système d'équations (3.27) se réduit alors à :

$$\begin{cases} \sum_l (X_l^\nu \mathcal{A}_{\mu l} + Y_l^\nu \mathcal{B}_{\mu l}) = \omega_\nu X_\mu^\nu \\ \sum_l (X_l^\nu \mathcal{B}_{\mu l}^* + Y_l^\nu \mathcal{A}_{\mu l}^*) = -\omega_\nu Y_\mu^\nu \end{cases} \quad (3.48)$$

où les éléments de matrices $\mathcal{A}_{\mu l}$, $\mathcal{B}_{\mu l}$, $\mathcal{B}_{\mu l}^*$, $\mathcal{A}_{\mu l}^*$ sont définis par :

$$\begin{cases} (\mathcal{A})_{\mu l} = \langle \Psi | [A_\mu, [H, A_l^\dagger]] | \Psi \rangle \\ (\mathcal{A}^*)_{\mu l} = \langle \Psi | [A_\mu^\dagger, [H, A_l]] | \Psi \rangle \\ (\mathcal{B})_{\mu l} = -\langle \Psi | [A_\mu, [H, A_l]] | \Psi \rangle \\ (\mathcal{B}^*)_{\mu l} = -\langle \Psi | [A_\mu^\dagger, [H, A_l^\dagger]] | \Psi \rangle \end{cases} \quad (3.49)$$

En écriture matricielle le système précédent s'écrit :

$$\begin{pmatrix} \mathcal{A} & \mathcal{B} \\ \mathcal{B}^* & \mathcal{A}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix} = \omega \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix} \quad (3.50)$$

Le calcul des éléments de matrices $\mathcal{A}$ et $\mathcal{B}$ (voir *Annexe B*) donne :

$$(\mathcal{A})_{\mu l} = 2 \left(E_\nu + 2\dot{H}_{22}^{\nu,\nu} \right) \delta_{\nu\mu} + H_{22}^{\nu,\mu} \quad (3.51)$$

$$(\mathcal{B})_{\mu l} = 2H_4^{\nu,\mu} - 2H_4^{\nu,\nu} \quad (3.52)$$

On remarque que ces éléments de matrices contiennent les termes H_{22} , et H_4 provenant du terme résiduel $H_{résid}$ (voir eq.1.21) négligé dans la théorie BCS.

Les éléments de matrices étant réels, le système d'équations de la QRPA a pour forme :

$$\begin{pmatrix} \mathcal{A} & \mathcal{B} \\ \mathcal{B} & \mathcal{A} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix} = \omega \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix} \quad (3.53)$$

3.4.2 Résolution des équations de la QRPA

La méthode de résolution que l'on décrira ci-dessous est commune à la RPA et la QRPA.

Le système d'équations de la QRPA s'écrit :

$$\begin{cases} \mathcal{A}X + \mathcal{B}Y = \omega X \\ \mathcal{B}Y + \mathcal{A}X = \omega Y \end{cases} \quad (3.54)$$

c'est un problème aux valeurs propres constitué de deux équations couplées, pour le résoudre, il faut d'abord les découpler.

La somme et la différence des équations (3.34) et (3.35) donne :

$$\begin{cases} (\mathcal{A} - \mathcal{B})(X - Y) = \omega(X + Y) \\ (\mathcal{A} + \mathcal{B})(X + Y) = \omega(X - Y) \end{cases} \quad (3.55)$$

en substituant $(X + Y)$ et $(X - Y)$ par leurs expressions, on aboutit à :

$$\begin{cases} (\mathcal{A} - \mathcal{B})(\mathcal{A} + \mathcal{B})(X + Y) = \omega^2(X + Y) \\ (\mathcal{A} + \mathcal{B})(\mathcal{A} - \mathcal{B})(X - Y) = \omega^2(X - Y) \end{cases} \quad (3.56)$$

en posant :

$$\begin{aligned} X - Y &= D \quad \text{et} \quad X + Y = S \\ \mathcal{A} - \mathcal{B} &= \mathcal{A}_1 \quad \text{et} \quad \mathcal{A} + \mathcal{B} = \mathcal{B}_1 \end{aligned} \quad (3.57)$$

On aboutit finalement au système découplé de calcul de valeurs propres suivant :

$$\begin{cases} \mathcal{A}_1 \mathcal{B}_1 S = \omega^2 S \\ \mathcal{B}_1 \mathcal{A}_1 D = \omega^2 D \end{cases} \quad (3.58)$$

qui est un système de valeurs propres réel symétrique généralisé car les matrices $\mathcal{A}$ et $\mathcal{B}$ sont réelles et symétriques, de même pour $\mathcal{A}_1$ et $\mathcal{B}_1$.

Chapitre 4

La méthode de projection FSBCS

4.1 Introduction

Comme il a été mentionné au premier chapitre, les fluctuations du nombre de particules de la théorie BCS, entraînent un certain nombre de conséquences fâcheuses sur l'évaluation des différentes grandeurs physiques. Un traitement au delà de la théorie BCS est par conséquent nécessaire..

De nombreuses méthodes de projection ont été proposées [1]. Ces méthodes peuvent être classées en deux catégories :

(1) Des méthodes exactes et donnant de bons résultats mais complexes tant sur le plan théorique que numérique [18].

(2) Le deuxième type présente une simplicité relative et ce, au dépend de la qualité des prévisions théoriques. Ces méthodes sont généralement des méthodes approximatives de projections (méthode de Lipkin-Nogami [19], méthode de Kamlah [17] etc...).

Il est donc nécessaire de développer une méthode simple sur le plan formalisme et performante numériquement.

La méthode de projection exacte SBCS [31] semble présenter ces deux aspects. Elle a été initialement appliquée, dans le cadre de la projection après variation (PBCS), au calcul des transitions électromagnétiques [32, 33], la désintégration β [34] et le moment d'inertie [35]. Le calcul du type projection avant variation (FBCS) a été réalisé récemment [36–39], et c'est cette approche qu'on abordera dans ce chapitre.

4.2 Construction des fonctions d'ondes projetées

4.2.1 Opérateur de projection sous forme intégrale

Considérons l'opérateur formel $\mathcal{P}$ qui permet de projeter sur la composante à P paires de particules [1] :

$$\mathcal{P} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i\varphi(N-2P)} d\varphi \quad (4.1)$$

où N est l'opérateur nombre de particules.

Appliquons cet opérateur à l'état $|BCS\rangle = |\Psi\rangle$. Ce dernier peut être écrit sous la forme suivante :

$$|\Psi\rangle = \sum_{l=0}^{\Omega} |\Phi_l\rangle \quad (4.2)$$

où Ω est la dégénérescence totale de paires du système et $|\Phi_l\rangle$ est la composante à l paires.

$$|\Phi_l\rangle = \left(\prod_{\nu>0} u_{\nu} \right) \frac{1}{l!} \left[\sum_{\nu>0} \frac{v_{\nu}}{u_{\nu}} A_{\nu}^{\dagger} \right]^l |0\rangle \quad (4.3)$$

$$= \left(\prod_{\nu>0} u_{\nu} \right) \frac{1}{l!} \sum_{\nu_1, \dots, \nu_l > 0} \frac{v_{\nu_1} \dots v_{\nu_l}}{u_{\nu_1} \dots u_{\nu_l}} A_{\nu_1}^{\dagger} \dots A_{\nu_l}^{\dagger} |0\rangle \quad (4.4)$$

où : $A_{\nu}^{\dagger} = a_{\nu}^{\dagger} a_{\bar{\nu}}^{\dagger}$. L'action de $\mathcal{P}$ sur $|\Psi\rangle$ étant :

$$\mathcal{P} |\Psi\rangle = \left(\prod_{\nu>0} u_{\nu} \right) \sum_l \frac{1}{l!} \sum_{\nu_1, \dots, \nu_l > 0} \frac{v_{\nu_1} \dots v_{\nu_l}}{u_{\nu_1} \dots u_{\nu_l}} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i\varphi(N-2P)} d\varphi A_{\nu_1}^{\dagger} \dots A_{\nu_l}^{\dagger} |0\rangle \quad (4.5)$$

et comme $A_{\nu_1}^{\dagger} \dots A_{\nu_l}^{\dagger} |0\rangle$ est un état à $2l$ particules, soit :

$$N A_{\nu_1}^{\dagger} \dots A_{\nu_l}^{\dagger} |0\rangle = 2l A_{\nu_1}^{\dagger} \dots A_{\nu_l}^{\dagger} |0\rangle \quad (4.6)$$

il vient également :

$$e^{i\varphi(N-2P)} A_{\nu_1}^{\dagger} \dots A_{\nu_l}^{\dagger} |0\rangle = e^{i\varphi(2l-2P)} A_{\nu_1}^{\dagger} \dots A_{\nu_l}^{\dagger} |0\rangle \quad (4.7)$$

D'autre part, sachant que :

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i\varphi(n-n')} d\varphi = \delta_{n,n'} \quad (4.8)$$

on obtient :

$$\mathcal{P} |\Psi\rangle = \left(\prod_{\nu>0} u_\nu \right) \sum_l \frac{1}{l!} \sum_{\nu_1, \dots, \nu_l > 0} \frac{v_{\nu_1} \dots v_{\nu_l}}{u_{\nu_1} \dots u_{\nu_l}} \left\{ \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i\varphi(2l-2P)} d\varphi \right\} A_{\nu_1}^\dagger \dots A_{\nu_l}^\dagger |0\rangle \quad (4.9)$$

soit finalement :

$$\mathcal{P} |\Psi\rangle = \left(\prod_{\nu>0} u_\nu \right) \frac{1}{p!} \sum_{\nu_1, \dots, \nu_p > 0} \frac{v_{\nu_1} \dots v_{\nu_p}}{u_{\nu_1} \dots u_{\nu_p}} A_{\nu_1}^\dagger \dots A_{\nu_p}^\dagger |0\rangle \equiv |\Phi_p\rangle \quad (4.10)$$

On voit bien que l'action de $\mathcal{P}$ est de projeter l'état BCS sa composante à P paires de particules. Malheureusement, dans la pratique, l'utilisation de cet opérateur de forme intégrale dans l'étude d'observables physiques, et notamment l'énergie, conduit à des calculs complexes. Ceci nous oblige à recourir à d'autres méthodes.

4.2.2 Opérateur de projection sous forme discrète

Les états projetés décrivant un système ayant P paires de particules sont engendrés à partir de la fonction d'ondes :

$$|\Psi(z)\rangle = \prod_{\nu>0} \left(u_\nu + z v_\nu a_\nu^\dagger a_\nu^\dagger \right) |0\rangle \quad (4.11)$$

Les coefficients de z^p dans cette fonction génératrice représente alors la fonction d'onde du système à P paires de particules. Cet état projeté peut être également représenté à l'aide de l'intégrale de Fowler-Darwin bien connue en mécanique statistique :

$$|\Psi_p\rangle = C \oint \frac{dz}{z^{p+1}} \prod_{\nu>0} \left(u_\nu + z v_\nu a_\nu^\dagger a_\nu^\dagger \right) |0\rangle \quad (4.12)$$

où l'intégrale est calculée le long d'un chemin contournant le point $z=0$ dans le plan complexe. Les éléments de matrices d'observables physiques calculés à l'aide de ces états projetés sont également exprimés sous forme intégrale. La méthode SBCS [31] quant à elle, propose de remplacer les intégrales de Fowler-Darwin par

des sommes discrètes beaucoup plus maniables du point de vue calcul numérique. En effet, partant de l'opérateur de projection $\mathcal{P}$ sous sa forme intégrale(4.1) :

$$\begin{aligned}\mathcal{P} &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i\varphi(N-2P)} d\varphi \\ &= \frac{1}{2\pi} \left[\int_0^{\pi} e^{i\varphi(N-2P)} d\varphi + \int_{\pi}^{2\pi} e^{i\varphi(N-2P)} d\varphi \right]\end{aligned}\quad (4.13)$$

Dans la seconde intégrale on pose : $\varphi = \Psi + \pi$, il vient :

$$\mathcal{P} = \frac{1}{2\pi} \left[\int_0^{\pi} e^{i\varphi(N-2P)} d\varphi + e^{i\pi(N-2P)} \int_0^{\pi} e^{i\Psi(N-2P)} d\Psi \right] \quad (4.14)$$

comme $(N - 2P)$ est pair : $e^{i\pi(N-2P)} = 1$, l'opérateur $\mathcal{P}$ devient alors :

$$\mathcal{P} = \frac{1}{\pi} \left[\int_0^{\pi} e^{i\varphi(N-2P)} d\varphi \right] \quad (4.15)$$

Partageons maintenant l'intervalle $[0, \pi]$ en $(2n + 2)$ intervalles équidistants, l'opérateur $\mathcal{P}$ sera alors :

$$\mathcal{P} = \frac{1}{\pi} \sum_{k=0}^{2n+1} \int_{\frac{k\pi}{2(n+1)}}^{\frac{(k+1)\pi}{2(n+1)}} e^{i\varphi(N-2P)} d\varphi \quad (4.16)$$

$$= \lim_{n \rightarrow +\infty} P_n \quad (4.17)$$

où :

$$P_n = \frac{1}{2(n+1)} \sum_{k=0}^{2n+1} e^{i \frac{k\pi}{2(n+1)} (N-2P)} \quad (4.18)$$

Réécrivons l'opérateur P_n en séparant la somme sur k :

$$P_n = \frac{1}{2(n+1)} \left[\sum_{k=0}^{n+1} e^{i \frac{k\pi}{n+1} (\frac{N}{2}-P)} + \sum_{k=n+2}^{2n+1} e^{i \frac{k\pi}{n+1} (\frac{N}{2}-P)} \right] \quad (4.19)$$

On pose dans la seconde somme : $k' = 2n + 2 - k$ et on isole les termes $k = 0$ et $k = n + 1$ dans la première somme, on obtient :

$$P_n = \frac{1}{2(n+1)} \left[1 + e^{i\pi(N/2-P)} + \sum_{k=1}^n e^{i\frac{k\pi}{n+1}(\frac{N}{2}-P)} + \sum_{k'=1}^n e^{-i\frac{k'\pi}{n+1}(\frac{N}{2}-P)} \right] \quad (4.20)$$

soit encore :

$$P_n = \frac{1}{2(n+1)} \left[\sum_{k=0}^{n+1} \zeta_k z_k^{(\frac{N}{2}-P)} + c.c \right] \quad (4.21)$$

où :

$$\zeta_k = \begin{cases} 1/2 & \text{si } k = 0 \text{ ou } k = n + 1 \\ 1 & \text{ailleurs} \end{cases} \quad (4.22)$$

et $c.c$ désigne le complexe conjugué.

P_n peut s'écrire également sous la forme :

$$P_n = \frac{1}{2(n+1)} \left[\sum_{k=0}^{n+1} \zeta_k z_k^{-P} e^{i\frac{k\pi}{2(n+1)}N} + c.c \right] \quad (4.23)$$

N est l'opérateur nombre de particules : $N = \sum_{\nu} n_{\nu} = \sum_{\nu} a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu}$

On a :

$$\begin{aligned} e^{i\frac{k\pi}{2(n+1)}N} &= e^{i\frac{k\pi}{2(n+1)}\sum_{\nu} n_{\nu}} \\ &= \prod_{\nu} e^{i\frac{k\pi}{2(n+1)}n_{\nu}} \\ &= \prod_{\nu} e^{i\varphi_k n_{\nu}} \end{aligned} \quad (4.24)$$

avec : $\varphi_k = \frac{k\pi}{2(n+1)}$ et $e^{i\varphi_k} = \sqrt{z_k}$

On développe par la suite le terme $e^{i\varphi_k n_\nu}$:

$$\begin{aligned}
 e^{i\varphi_k n_\nu} &= 1 + i\varphi_k n_\nu - \frac{1}{2}\varphi_k^2 n_\nu + \dots + \frac{i^n}{n!}\varphi_k^n n_\nu + \dots \\
 &= 1 - n_\nu + n_\nu \left[1 + i\varphi_k - \frac{1}{2}\varphi_k^2 + \dots + \frac{i^n}{n!}\varphi_k^n + \dots \right] \\
 &= 1 - n_\nu + n_\nu e^{i\varphi_k} \\
 &= 1 - n_\nu (\sqrt{z_k} - 1)
 \end{aligned} \tag{4.25}$$

d'où finalement :

$$P_n = \frac{1}{2(n+1)} \left\{ \sum_{k=1}^{n+1} \zeta_k z_k^{-P} \prod_v (1 + (\sqrt{z_k} - 1) n_v) + c.c \right\} \tag{4.26}$$

et la fonction d'onde projetée s'écrit :

$$|\psi_n\rangle = C_n P_n |\psi\rangle \tag{4.27}$$

$$= C_n \left\{ \sum_{k=1}^{n+1} \zeta_k z_k^{-P} \prod_v (1 + (\sqrt{z_k} - 1) n_v) + c.c \right\} |\psi\rangle \tag{4.28}$$

où C_n est une constante de normalisation.

D'autre part, comme :

$$|\psi\rangle = \prod_j (u_j + v_j a_j^\dagger a_j^\dagger) |0\rangle \tag{4.29}$$

$|\psi_n\rangle$ s'écrit :

$$\begin{aligned}
 |\psi_n\rangle &= C_n \left\{ \sum_{k=0}^{n+1} \zeta_k z_k^{-P} \prod_v (1 + (\sqrt{z_k} - 1) n_v) + c.c \right\} (u_\nu + v_\nu a_\nu^\dagger a_\nu^\dagger) \\
 &\quad \times \prod_{j \neq \nu} (u_j + v_j a_j^\dagger a_j^\dagger) |0\rangle
 \end{aligned} \tag{4.30}$$

$$\begin{aligned}
 &= C_n \left\{ \sum_{k=0}^{n+1} \zeta_k z_k^{-P} \prod_{v>0} [1 + (\sqrt{z_k} - 1) n_v] [1 + (\sqrt{z_k} - 1) n_{\bar{v}}] \right. \\
 &\quad \left. \times (u_\nu + v_\nu a_\nu^\dagger a_\nu^\dagger) \prod_{j \neq \nu} (u_j + v_j a_j^\dagger a_j^\dagger) + c.c \right\} |0\rangle
 \end{aligned} \tag{4.31}$$

on aboutit finalement tous calculs faits après normalisation à :

$$|\psi_n\rangle = C_n \left\{ \sum_{k=0}^{n+1} \zeta_k z_k^{-P} \prod_{v>0} \left(u_v + z_k v_v a_v^\dagger a_v^\dagger \right) + c.c \right\} |0\rangle \quad (4.32)$$

Il a été montré [31,40] que dès que l'inégalité $2(n+1) > \max(P, \Omega - P)$, où Ω est la dégénérescence totale des paires du système, est satisfaite, l'état $|\psi_n\rangle$ coïncide avec l'état à paires de particules. On verra, par la suite, qu'il n'est pas nécessaire de vérifier cette condition, car l'entier n correspond au degré d'extraction des composantes non physiques, et seules les composantes ayant un nombre de paires voisin de P contribuent effectivement à l'état $|BCS\rangle$.

Pour alléger l'écriture, on adopte la notation suivante :

$$|\psi(z_k)\rangle = \prod_{v>0} \left(u_v + z_k v_v a_v^\dagger a_v^\dagger \right) |0\rangle \quad (4.33)$$

$|\psi_n\rangle$ s'écrit alors :

$$|\psi_n\rangle = C_n \left\{ \sum_{k=0}^{n+1} \zeta_k z_k^{-P} |\psi(z_k)\rangle + c.c \right\} \quad (4.34)$$

Le calcul des différentes grandeurs physiques nécessite l'évaluation des valeurs moyennes des opérateurs correspondants sur l'état $|\psi_n\rangle$, et compte tenu du fait que la plupart de ces opérateurs commutent avec l'opérateur nombre de particules, nous allons examiner une propriété très importante de ces opérateurs.

Soit Θ un opérateur quelconque qui commute avec N :

$$N\Theta = \Theta N \quad (4.35)$$

Considérons la grandeur $\langle \psi_n | \Theta | \psi \rangle$, et compte tenu de l'expression de $|\psi\rangle$ (4.4) :

$$|\psi\rangle = \sum_{l=0}^{\Omega} |\Phi_l\rangle = \left(\prod_{v>0} u_v \right) \sum_l \frac{1}{l!} \sum_{\nu_1, \dots, \nu_l > 0} \frac{v_{\nu_1} \dots v_{\nu_l}}{u_{\nu_1} \dots u_{\nu_l}} A_{\nu_1}^\dagger \dots A_{\nu_l}^\dagger |0\rangle \quad (4.36)$$

la grandeur $\langle \psi_n | \Theta | \psi \rangle$ s'écrit :

$$\begin{aligned} \langle \psi_n | \Theta | \psi \rangle &= \left(\prod_{\nu > 0} u_\nu \right) \sum_{l=0}^{2\Omega} \left\{ \frac{1}{l!} \sum_{\nu_1, \dots, \nu_l > 0} \frac{v_{\nu_1} \dots v_{\nu_l}}{u_{\nu_1} \dots u_{\nu_l}} \langle \psi_n | \Theta A_{\nu_1}^\dagger \dots A_{\nu_l}^\dagger | 0 \rangle \right\} \\ &= \left(\prod_{\nu > 0} u_\nu \right) \frac{1}{p!} \sum_{\nu_1, \dots, \nu_p} \frac{v_{\nu_1} \dots v_{\nu_p}}{u_{\nu_1} \dots u_{\nu_p}} \langle \psi_n | \Theta A_{\nu_1}^\dagger \dots A_{\nu_p}^\dagger | 0 \rangle \end{aligned} \quad (4.37)$$

D'autre part, considérons la quantité $\langle \psi_n | \Theta | \psi(z_k) \rangle$. Si on développe $|\psi(z_k)\rangle$ de manière analogue au développement de $|\psi\rangle$ (4.4), on peut écrire :

$$\begin{aligned} |\psi(z_k)\rangle &= \prod_{\nu > 0} \left(u_\nu + z_k v_\nu a_\nu^\dagger a_\nu^\dagger \right) |0\rangle \\ &= \left(\prod_{\nu > 0} u_\nu \right) \prod_{\nu > 0} \left(1 + z_k \frac{v_\nu}{u_\nu} a_\nu^\dagger a_\nu^\dagger \right) |0\rangle \\ &= \left(\prod_{\nu > 0} u_\nu \right) \sum_{l=0}^{2\Omega} \frac{1}{l!} \left[\sum_{\nu > 0} z_k \frac{v_\nu}{u_\nu} A_\nu^\dagger \right]^l |0\rangle \\ &= \left(\prod_{\nu > 0} u_\nu \right) \sum_{l=0}^{2\Omega} \frac{1}{l!} z_k^l \sum_{\nu_1, \dots, \nu_l > 0} \frac{v_{\nu_1} \dots v_{\nu_l}}{u_{\nu_1} \dots u_{\nu_l}} A_{\nu_1}^\dagger \dots A_{\nu_l}^\dagger |0\rangle \end{aligned} \quad (4.38)$$

La quantité $\langle \psi_n | \Theta | \psi(z_k) \rangle$ s'écrit alors :

$$\begin{aligned} \langle \psi_n | \Theta | \psi(z_k) \rangle &= \left(\prod_{\nu > 0} u_\nu \right) \sum_l \frac{1}{l!} z_k^l \sum_{\nu_1, \dots, \nu_l > 0} \frac{v_{\nu_1} \dots v_{\nu_l}}{u_{\nu_1} \dots u_{\nu_l}} \langle \psi_n | \Theta A_{\nu_1}^\dagger \dots A_{\nu_l}^\dagger | 0 \rangle \\ &= \left(\prod_{\nu > 0} u_\nu \right) \frac{1}{p!} z_k^l \sum_{\nu_1, \dots, \nu_p > 0} \frac{v_{\nu_1} \dots v_{\nu_p}}{u_{\nu_1} \dots u_{\nu_p}} \langle \psi_n | \Theta A_{\nu_1}^\dagger \dots A_{\nu_p}^\dagger | 0 \rangle \\ &= z_k^p \langle \psi_n | \Theta | \psi \rangle \end{aligned} \quad (4.39)$$

On en déduit que :

$$\begin{aligned} \langle \psi_n | \Theta | \psi_n \rangle &= C_n \left\{ \sum_{k=0}^{n+1} \zeta_k z_k^{-P} \langle \psi_n | \Theta | \psi(z_k) \rangle + c.c \right\} \\ &= C_n \left\{ \sum_{k=0}^{n+1} \zeta_k \langle \psi_n | \Theta | \psi \rangle + c.c \right\} \\ &= C_n \left\{ \sum_{k=0}^{n+1} \zeta_k + c.c \right\} \langle \psi_n | \Theta | \psi \rangle \end{aligned}$$

on obtient finalement :

$$\langle \psi_n | \Theta | \psi_n \rangle = 2(n+1)C_n \langle \psi_n | \Theta | \psi \rangle \quad (4.40)$$

Cette propriété s'avérera par la suite très utile pour le calcul des valeurs moyennes des opérateurs.

4.2.3 Condition de normalisation

Un exemple simple qui montre l'utilité de la propriété précédente des opérateurs commutant avec l'opérateur nombre de particules est celui de l'opérateur unité. En effet :

$$\langle \psi_n | \psi_n \rangle = 2(n+1)C_n \langle \psi_n | \psi \rangle = 1 \quad (4.41)$$

Il vient par conséquent :

$$2(n+1)C_n^2 \left\{ \sum_{k=0}^{n+1} \zeta_k z_k^{-P} \langle \psi | \psi(z_k) \rangle + c.c \right\} = 1 \quad (4.42)$$

En remplaçant $|\psi\rangle$ et $|\psi(z_k)\rangle$ par leurs expressions, on obtient :

$$\begin{aligned} \langle \psi | \psi(z_k) \rangle &= \left\langle 0 \left| \prod_{v>0} (u_v + v_v a_v a_v) \cdot \prod_{v>0} (u_v + z_k v_v a_v^\dagger a_v^\dagger) \right| 0 \right\rangle \\ &= \prod_{v>0} (u_v^2 + z_k v_v^2) \end{aligned} \quad (4.43)$$

La constante de normalisation a pour forme :

$$C_n^2 = \left(2(n+1) \left\{ \sum_{k=0}^{n+1} \zeta_k z_k^{-P} \prod_{v>0} (u_v^2 + z_k v_v^2) + c.c \right\} \right)^{-1} \quad (4.44)$$

4.2.4 Technique d'extraction de la partie réelle

A l'instar de la constante de normalisation C_n , les différentes quantités calculées par le biais de la méthode SBCS contiennent des termes réels qui s'écrivent comme la somme d'un nombre complexe et de son complexe conjugué. En vue d'expliciter la partie réelle de ces termes, on écrit les complexes z_k et $u_v^2 + z_k v_v^2$ sous la forme

exponentielle :

$$z_k = e^{i\varphi_k} = e^{2ix_k} \quad \text{avec :} \quad x_k = \frac{\varphi_k}{2} = \frac{k\pi}{2(n+1)} \quad (4.45)$$

et :

$$(u_\nu^2 + z_k v_\nu^2) = \rho_{\nu k} \exp i(\varphi_{\nu k} + x_k) \quad (4.46)$$

Il s'agit maintenant de calculer le module $\rho_{\nu k}$ ainsi que $\varphi_{\nu k}$ on a :

$$\begin{aligned} u_\nu^2 + z_k v_\nu^2 &= u_\nu^2 + e^{2ix_k} v_\nu^2 \\ &= u_\nu^2 + v_\nu^2 \cos 2x_k + i v_\nu^2 \sin 2x_k \end{aligned} \quad (4.47)$$

Le carré du module $\rho_{\nu k}$ est alors :

$$\begin{aligned} \rho_{\nu k}^2 &= |u_\nu^2 + z_k v_\nu^2| \\ &= u_\nu^4 + v_\nu^4 + 2u_\nu^2 v_\nu^2 \cos 2x_k \\ &= (u_\nu^2 + v_\nu^2)^2 + 2u_\nu^2 v_\nu^2 (\cos 2x_k - 1) \\ &= 1 - 4u_\nu^2 v_\nu^2 \sin^2 x_k \end{aligned} \quad (4.48)$$

en posant : $\gamma_\nu = 2u_\nu v_\nu$, on obtient :

$$\rho_{\nu k} = (1 - \gamma_\nu^2 \sin^2 x_k)^{\frac{1}{2}} \quad (4.49)$$

D'autre part, l'argument de $u_\nu^2 + z_k v_\nu^2$ est donné par :

$$\text{tg}(\varphi_{\nu k} + x_k) = \frac{v_\nu^2 \sin 2x_k}{u_\nu^2 + v_\nu^2 \cos 2x_k} \quad (4.50)$$

en posant :

$$T = \text{tg} x_k,$$

et sachant que : $\sin 2x_k = \frac{2T}{1+T^2}$ et $\cos 2x_k = \frac{1-T^2}{1+T^2}$, il vient :

$$\text{tg}(\varphi_{\nu k} + x_k) = \frac{2T v_\nu^2}{1 + T^2 (u_\nu^2 - v_\nu^2)} \quad (4.51)$$

de plus :

$$tg(\varphi_{\nu k} + x_k) = \frac{T + tg\varphi_{\nu k}}{1 - T tg\varphi_{\nu k}} \quad (4.52)$$

Soit en combinant (4.51) et (4.52) :

$$\begin{aligned} T(1 + T^2(u_\nu^2 - v_\nu^2)) + (1 + T^2(u_\nu^2 - v_\nu^2))tg\varphi_{\nu k} &= 2Tv_\nu^2 - 2T^2v_\nu^2tg\varphi_{\nu k} \\ [1 + T^2(u_\nu^2 - v_\nu^2) + 2Tv_\nu^2]tg\varphi_{\nu k} &= T[2v_\nu^2 - 1 - T^2(u_\nu^2 - v_\nu^2)] \end{aligned} \quad (4.53)$$

On a :

$$1 + T^2(u_\nu^2 - v_\nu^2) + 2Tv_\nu^2 = 1 + T^2 \quad (4.54)$$

ainsi que :

$$T[2v_\nu^2 - 1 - T^2(u_\nu^2 - v_\nu^2)] = -T(u_\nu^2 - v_\nu^2)(1 + T^2) \quad (4.55)$$

il vient :

$$tg\varphi_{jk} = -T(u_\nu^2 - v_\nu^2) \quad (4.56)$$

En posant : $\delta_\nu = u_\nu^2 - v_\nu^2$ et $\gamma_\nu = 2u_\nu v_\nu$, on obtient finalement :

$$\begin{aligned} \rho_{\nu k} &= (1 - \gamma_\nu^2 \sin^2 x_k)^{\frac{1}{2}} \\ tg\varphi_{\nu k} &= -T\delta_\nu = -\delta_\nu tgx_k \end{aligned} \quad (4.57)$$

La constante de normalisation C_n s'écrit :

$$C_n^2 = \left(2(n+1) \left\{ \sum_{k=0}^{n+1} \zeta_k z_k^{-P} \prod_{v>0} (u_\nu^2 + z_k v_\nu^2) + c.c \right\} \right)^{-1}$$

en remplaçant $u_\nu^2 + z_k v_\nu^2$ par sa forme exponentielle (4.46), il vient :

$$\begin{aligned} C_n^2 &= \frac{1}{2(n+1)} \left\{ \sum_{k=0}^{n+1} \zeta_k e^{-2iPx_k} \left(\prod_{j>0} \rho_{jk} \right) \exp \left(i \sum_{j>0} (\varphi_{jk} + x_k) \right) + c.c \right\}^{-1} \\ &= \frac{1}{2(n+1)} \left\{ \sum_{k=0}^{n+1} \zeta_k \left(\prod_{j>0} \rho_{jk} \right) e^{-2iPx_k} \cdot e^{i\Omega x_k} \cdot \exp \left(i \sum_{j>0} \varphi_{jk} \right) + c.c \right\}^{-1} \\ &= \frac{1}{2(n+1)} \left\{ \sum_{k=0}^{n+1} \zeta_k \left(\prod_{j>0} \rho_{jk} \right) \exp i \left((\Omega - 2P)x_k + \sum_{j>0} \varphi_{jk} \right) + c.c \right\}^{-1} \end{aligned} \quad (4.58)$$

On pose :

$$R_k = \left(\prod_{j>0} \rho_{jk} \right) \quad \text{et} \quad \Psi_k = (\Omega - 2P) x_k + \sum_{j>0} \varphi_{jk} \quad (4.59)$$

$$\begin{aligned} C_n^2 &= \frac{1}{2(n+1)} \left\{ \sum_{k=0}^{n+1} \zeta_k R_k e^{i\Psi_k} + c.c \right\}^{-1} \\ &= \frac{1}{2(n+1)} \left\{ \sum_{k=0}^{n+1} \zeta_k R_k \cos \Psi_k \right\}^{-1} \end{aligned} \quad (4.60)$$

4.3 Energie du système

L'énergie du système est la valeur moyenne de l'hamiltonien H sur l'état projeté $|\psi_n\rangle$

$$E_n = \langle \psi_n | H | \psi_n \rangle \quad (4.61)$$

pour calculer cette quantité, on utilise la propriété(4.40), on a alors :

$$E_n = \langle \psi_n | H | \psi_n \rangle = 2(n+1)C_n \langle \psi_n | H | \psi \rangle \quad (4.62)$$

comme :

$$|\psi_n\rangle = C_n \left\{ \sum_{k=0}^{n+1} \zeta_k z_k^{-P} |\psi(z_k)\rangle + c.c \right\}$$

il vient :

$$E_n = 2(n+1)C_n^2 \left\{ \sum_{k=0}^{n+1} \zeta_k z_k^{-P} \langle \psi(z_k) | H | \psi \rangle + c.c \right\} \quad (4.63)$$

On pose :

$$E(z_k) = \langle \psi(z_k) | H | \psi \rangle \quad (4.64)$$

$$E_n = 2(n+1)C_n^2 \left\{ \sum_{k=0}^{n+1} \zeta_k z_k^{-P} E(z_k) + c.c \right\} \quad (4.65)$$

On calcule maintenant la quantité $E(z_k) = \langle \psi(z_k) | H | \psi \rangle$

En représentation particules H s'écrit :

$$H = H_0 + H_P \quad (4.66)$$

où :

$$H_0 = \sum_{\nu>0} \varepsilon_\nu \left(a_\nu^\dagger a_\nu + a_{\bar{\nu}}^\dagger a_{\bar{\nu}} \right) = \sum_{\nu>0} \varepsilon_\nu (n_\nu + n_{\bar{\nu}})$$

et $H_P = -G \sum_{\nu, \mu>0} a_\nu^\dagger a_{\bar{\nu}}^\dagger a_{\bar{\mu}} a_\mu = -G \sum_{\nu, \mu>0} A_\nu^\dagger A_\mu$

Considérons dans un premier temps l'action de H sur $|\psi\rangle$. Etant donné que :

$$\begin{cases} n_\nu |\psi\rangle = a_\nu^\dagger a_\nu |\psi\rangle = v_\nu A_\nu^\dagger \prod_{j(\neq \nu)} (u_j + v_j A_j^\dagger) |0\rangle \\ n_{\bar{\nu}} |\psi\rangle = a_{\bar{\nu}}^\dagger a_{\bar{\nu}} |\psi\rangle = v_{\bar{\nu}} A_{\bar{\nu}}^\dagger \prod_{j(\neq \bar{\nu})} (u_j + v_j A_j^\dagger) |0\rangle \end{cases} \quad (4.67)$$

par conséquent :

$$H_0 = 2 \sum_{\nu>0} \varepsilon_\nu v_\nu A_\nu^\dagger \prod_{j(\neq \nu)} (u_j + v_j A_j^\dagger) |0\rangle \quad (4.68)$$

D'autre part, sachant que :

$$A_\nu^\dagger A_\nu |\psi\rangle = v_\nu A_\nu^\dagger \prod_{j(\neq \nu)} (u_j + v_j A_j^\dagger) |0\rangle \quad (4.69)$$

$$\text{et } A_\nu^\dagger A_\nu |\psi\rangle = u_\nu v_\mu \prod_{j(\neq \nu, \mu)} (u_j + v_j A_j^\dagger) |0\rangle \quad \text{pour } \nu \neq \mu \quad (4.70)$$

il vient également :

$$\begin{aligned} H_P &= \left(-G \sum_{\nu} A_\nu^\dagger A_\nu - G \sum_{\mu \neq \nu} A_\nu^\dagger A_\mu \right) |0\rangle \\ &= -G \left\{ \sum_{\nu} v_\nu A_\nu^\dagger \prod_{j(\neq \nu)} (u_j + v_j A_j^\dagger) |0\rangle \right. \\ &\quad \left. + \sum_{\mu \neq \nu} u_\nu v_\mu \prod_{j(\neq \nu, \mu)} (u_j + v_j A_j^\dagger) |0\rangle \right\} \end{aligned} \quad (4.71)$$

on en déduit que :

$$\begin{aligned} \langle \psi(z_k) | H_0 | \psi \rangle &= \left\langle 0 \left| \prod_{j>0} (u_j + z_k v_j A_j) \cdot 2 \sum_{\nu>0} \varepsilon_\nu v_\nu A_\nu^\dagger \prod_{j(\neq \nu)} (u_j + v_j A_j^\dagger) \right| 0 \right\rangle \\ &= 2 \sum_{\nu>0} \varepsilon_\nu v_\nu \prod_{j(\neq \nu)} (u_j^2 + z_k^2 v_j^2) \langle 0 | (u_\nu + z_k v_\nu A_\nu) A_\nu^\dagger | 0 \rangle \end{aligned}$$

soit finalement :

$$\langle \psi(z_k) | H_0 | \psi \rangle = 2 \sum_{\nu > 0} \varepsilon_\nu v_\nu^2 z_k \prod_{j(\neq \nu)} (u_j^2 + z_k v_j^2) \quad (4.72)$$

puis :

$$\begin{aligned} \langle \psi(z_k) | H_P | \psi \rangle &= -G \langle 0 | \prod_{j>0} (u_j + z_k v_j A_j) \cdot \left\{ \sum_{\nu>0} v_\nu A_\nu^\dagger \prod_{j(\neq \nu)} (u_j + v_j A_j^\dagger) \right. \\ &\quad \left. + \sum_{\mu \neq \nu} (u_j + v_j A_j^\dagger) \right\} | 0 \rangle \\ &= -G \left\{ \sum_{\nu} v_\nu \prod_{j(\neq \nu)} (u_j^2 + z_k v_j^2) \langle 0 | (u_\nu + z_k v_\nu A_\nu) A_\nu^\dagger | 0 \rangle \right. \\ &\quad \left. + \sum_{\nu \neq \mu} u_\nu v_\mu \prod_{j(\neq \nu, \mu)} (u_j^2 + z_k v_j^2) \langle 0 | (u_\nu + z_k v_\nu A_\nu) (u_\mu + z_k v_\mu A_\mu^\dagger) | 0 \rangle \right\} \\ &= -G \sum_{\nu > 0} z_k v_\nu^2 \prod_{j(\neq \nu)} (u_j^2 + z_k v_j^2) \\ &\quad + \sum_{\nu \neq \mu} z_k u_\nu u_\mu v_\nu v_\mu \prod_{j(\neq \nu, \mu)} (u_j^2 + z_k v_j^2) \end{aligned} \quad (4.73)$$

La deuxième somme peut s'écrire :

$$\begin{aligned} \sum_{\nu \neq \mu} z_k u_\nu u_\mu v_\nu v_\mu \prod_{j(\neq \nu, \mu)} (u_j^2 + z_k v_j^2) &= \sum_{\nu, \mu} z_k u_\nu u_\mu v_\nu v_\mu \prod_{j(\neq \nu, \mu)} (u_j^2 + z_k v_j^2) \\ &\quad - \sum_{\nu} z_k u_\nu^2 v_\nu^2 \prod_{j(\neq \nu, \mu)} (u_j^2 + z_k v_j^2) \end{aligned} \quad (4.74)$$

on aboutit finalement à l'expression de $\langle \psi(z_k) | H_P | \psi \rangle$:

$$\begin{aligned} \langle \psi(z_k) | H_P | \psi \rangle &= -G \left\{ \sum_{\nu} z_k v_\nu^4 \prod_{j(\neq \nu)} (u_j^2 + z_k v_j^2) \right. \\ &\quad \left. + \sum_{\nu, \mu} z_k u_\nu u_\mu v_\nu v_\mu \prod_{j(\neq \nu, \mu)} (u_j^2 + z_k v_j^2) \right\} \end{aligned} \quad (4.75)$$

L'expression de l'énergie E_n est donc :

$$E_n = 2(n+1)C_n^2 \left\{ \sum_{k=0}^{n+1} \zeta_k z_k^{-P} E(z_k) + c.c \right\} \quad (4.76)$$

avec :

$$\begin{aligned} E(z_k) &= \langle \psi(z_k) | H | \psi \rangle = \langle \psi(z_k) | H_P | \psi \rangle + \langle \psi(z_k) | H_0 | \psi \rangle \\ &= \sum_{\nu > 0} z_k (2\varepsilon_\nu - v_\nu^2) v_\nu^2 \prod_{j(\neq \nu)} (u_j^2 + z_k v_j^2) \\ &\quad - G \sum_{\nu, \mu} z_k u_\nu u_\mu v_\nu v_\mu \prod_{j(\neq \nu, \mu)} (u_j^2 + z_k v_j^2) \end{aligned} \quad (4.77)$$

En posant :

$$D_n^{\nu_1, \dots, \nu_r} = 2(n+1)C_n^2 \left\{ \sum_{k=0}^{n+1} \zeta_k z_k^{-P+1} \prod_{j(\neq \nu_1, \dots, \nu_r)} (u_j^2 + z_k v_j^2) + c.c \right\} \quad (4.78)$$

l'énergie E_n s'écrit sous la forme compacte suivante :

$$E_n = 2 \sum_{\nu > 0} \left(\varepsilon_\nu - \frac{G}{2} v_\nu^2 \right) v_\nu^2 D_n^\nu - G \sum_{\nu \neq \mu} u_\nu u_\mu v_\nu v_\mu D_n^{\nu\mu} \quad (4.79)$$

De plus, les coefficients $D_n^{\nu_1, \dots, \nu_r}$ s'écrivent après extraction de la partie réelle :

$$D_n^{\nu_1, \dots, \nu_r} = 2(n+1)C_n^2 \left\{ \sum_{k=0}^{n+1} \zeta_k R_k^{\nu_1, \dots, \nu_r} \cos(\Phi_k^{\nu_1, \dots, \nu} + (2-r)x_k) \right\} \quad (4.80)$$

avec les notations :

$$R_k^{\nu_1, \dots, \nu_r} = \prod_{j(\neq \nu_1, \dots, \nu_r)} (1 - 4u_j^2 v_j^2 \sin x_k)^{1/2} \quad (4.81)$$

$$\Phi_k^{\nu_1, \dots, \nu} = (\Omega - 2P) x_k + \sum_{j(\neq \nu_1, \dots, \nu_r)} \varphi_{jk} \quad (4.82)$$

4.4 Equations du gap

Dans un calcul du type PBCS, les paramètres u_ν et v_ν sont déterminés avant la projection, c'est-à-dire par les équations du gap de la théorie BCS, tandis que

dans la méthode FBCS, ces paramètres ne seront déterminés qu'après avoir projeté la fonction d'onde et obtenu la composante physique. Cela signifie que de nouvelles équations du gap sont à établir et à résoudre, et par voie de conséquence, les anciens v_ν^2 et u_ν^2 ne représenteront plus les probabilités d'occupation et d'inoccupation.

Les nouvelles équations du gap s'obtiennent en minimisant la valeur moyenne de l'hamiltonien auxiliaire calculée sur l'état $|\psi_n\rangle$. En effet, soit :

$$\frac{\partial}{\partial v_\nu}(E_n) = \frac{\partial}{\partial u_\nu}(E_n) = 0 \quad , \quad \forall \nu \quad (4.83)$$

ou bien :

$$\frac{\partial}{\partial v_\nu}(E_n) = 0 \quad , \quad \forall \nu \quad (4.84)$$

avec la condition : $v_\nu^2 + u_\nu^2 = 1 \quad , \quad \forall \nu$.

En remplaçant E_n par son expression (4.79), l'équation (4.84) devient :

$$\begin{aligned} & 2(\varepsilon_\nu - Gv_\nu^2)v_\nu D_n^\nu + 2 \sum_{\mu > 0} (\varepsilon_\mu - \frac{G}{2}v_\mu^2)v_\mu^2 \frac{\partial D_n^\mu}{\partial v_\nu} \\ & - G \frac{u_\nu^2 - v_\nu^2}{u_\nu} \sum_{\mu > 0} u_\mu v_\mu D_n^{\nu\mu} - \frac{G}{2} \sum_{\mu, \gamma} u_\mu v_\mu u_\gamma v_\gamma \frac{\partial D_n^{\mu\gamma}}{\partial v_\nu} = 0 \end{aligned} \quad (4.85)$$

Le calcul des $\frac{\partial D_n^\mu}{\partial v_\nu}$ et $\frac{\partial D_n^{\mu\gamma}}{\partial v_\nu}$ donne :

$$\begin{aligned} \frac{\partial D_n^\mu}{\partial v_\nu} &= \frac{D_n^\mu}{C_n^2} \frac{\partial C_n^2}{\partial v_\nu} + 2(n+1)C_n^2 \left\{ 2v_\nu(1 - \delta_{\nu\mu}) \sum_{k=0}^{n+1} \zeta_k z_k^{-P+1} (z_k - 1) \right. \\ & \quad \left. \prod_{j(\neq \nu, \mu)} (u_j^2 + z_k v_j^2) + c.c \right\} \\ &= 2v_\nu (A_{n,1}^{\nu,\mu} - A_{n,0}^\nu D_n^\mu) \end{aligned} \quad (4.86)$$

avec :

$$A_{n,l}^{\nu_1, \dots, \nu_r} = \begin{cases} 2(n+1)C_n^2 \left\{ \sum_{k=0}^{n+1} \zeta_k z_k^{-P+l} (z_k - 1) \prod_{j(\neq \nu_1, \dots, \nu_r)} (u_j^2 + z_k v_j^2) + c.c \right\}, & l = 0, 1 \\ 0, & \text{si } \nu_i = \nu_j \text{ avec } i \neq j \end{cases} \quad (4.87)$$

on a ainsi :

$$\frac{\partial D_n^{\mu\gamma}}{\partial v_\nu} = 2v_\nu (A_{n,1}^{\nu\mu\gamma} - A_{n,0}^\nu D_n^{\mu\gamma}) \quad (4.88)$$

L'équation (4.85) devient alors :

$$\begin{aligned} & 2 \left\{ (\varepsilon_\nu - Gv_\nu^2) D_n^\nu + 2 \sum_{\mu>0} \left(\varepsilon_\mu - \frac{G}{2} v_\mu^2 \right) v_\mu^2 (A_{n,1}^{\nu,\mu} - A_{n,0}^\nu D_n^\mu) \right. \\ & \quad \left. - \frac{G}{2} \sum_{\mu \neq \gamma} u_\mu v_\mu u_\gamma v_\gamma (A_{n,1}^{\nu\mu\gamma} - A_{n,0}^\nu D_n^{\mu\gamma}) \right\} u_\nu v_\nu \\ & = G \left\{ u_\nu v_\nu D_n^\mu + \sum_{\mu(\neq \nu)} u_\mu v_\mu D_n^{\mu\gamma} \right\} (u_\nu^2 - v_\nu^2) \end{aligned} \quad (4.89)$$

Après des réarrangements judicieux cette équation s'écrit sous la forme :

$$2\varepsilon_n^\nu u_\nu v_\nu = \Delta_n^\nu (u_\nu^2 - v_\nu^2) \quad (4.90)$$

où l'on a posé :

$$\varepsilon_n^\nu = (\varepsilon_\nu - Gv_\nu^2) D_n^\nu + \Gamma_n^\nu \quad (4.91)$$

$$\Delta_n^\nu = G \left\{ u_\nu v_\nu D_n^\mu + \sum_{\mu(\neq \nu)} u_\mu v_\mu D_n^{\mu\gamma} \right\} \quad (4.92)$$

$$\begin{aligned} \Gamma_n^\nu &= \sum_{\mu>0} \left(\varepsilon_\mu - \frac{G}{2} v_\mu^2 \right) v_\mu^2 (A_{n,1}^{\nu,\mu} - A_{n,0}^\nu D_n^\mu) \\ &\quad - G \sum_{\mu \neq \gamma} u_\mu v_\mu u_\gamma v_\gamma (A_{n,1}^{\nu\mu\gamma} - A_{n,0}^\nu D_n^{\mu\gamma}) \end{aligned} \quad (4.93)$$

Avec ces notations, le système formé de l'équation(4.90) et la condition de normalisation $u_\nu^2 + v_\nu^2 = 1$, conduit à des solutions analogues à celles de la théorie BCS :

$$\begin{pmatrix} u_\nu^2 \\ v_\nu^2 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \left\{ 1 \pm \frac{\varepsilon_n^\nu}{\sqrt{(\varepsilon_n^\nu)^2 + (\Delta_n^\nu)^2}} \right\} \quad (4.94)$$

Il faut souligner que les paramètres u_ν^2 et v_ν^2 ne représentent plus les probabilités d'occupation et d'inoccupation, comme dans la théorie de BCS. Ces probabilités

sont plutôt données, par contre, par les expressions suivantes :

$$\begin{cases} V_{\nu,n}^2 = \langle \psi_n | a_\nu^\dagger a_\nu | \psi_n \rangle = v_\nu^2 D_n^\nu. \\ U_{\nu,n}^2 = \langle \psi_n | a_\nu a_\nu^\dagger | \psi_n \rangle = 1 - V_{\nu,n}^2. \end{cases} \quad (4.95)$$

Chapitre 5

Résultats numériques et discussion

L'importance des modèles schématiques exactement solubles dans l'étude des systèmes à plusieurs corps se confirme de plus en plus. La complexité de ces systèmes notamment ceux qui sont fortement corrélés, a rendu leur traitement très ardu, d'où apparaît l'utilité des modèles schématisant qualitativement le système et présentant des similitudes avec les cas réalistes. Outre l'existence de leur solution exacte, ces modèles offrent un moyen puissant pour tester les différentes approches développées pour l'étude de ces systèmes avant de passer à une quelconque application aux cas réalistes.

Dans cette perspective, et afin d'étudier la validité des approches décrites dans les chapitres précédents, nous les avons appliquées aux deux modèles les plus utilisés dans la littérature : le modèle symétrique à deux niveaux et le modèle à plusieurs niveaux de Richardson. Dans le cadre de ces deux modèles, nous avons comparé quelques grandeurs importantes dans l'étude de l'appariement comme les probabilités d'occupation et inoccupation, v_ν^2 et u_ν^2 , la demi largeur du gap Δ , l'énergie de corrélation d'appariement E_p et l'énergie du fondamental. Enfin, nous avons comparé les résultats de la méthode de projection FSBCS à quelques approches récemment proposées pour améliorer la QRPA comme la self-consistante QRPA [53] et une approche variationnelle basée sur un mapping de Marumori [48].

5.1 Modèles utilisés

5.1.1 Modèle symétrique à deux niveaux

Ce modèle a été introduit pour la première fois par J.Högaasen-Feldman [41]. Il a été ensuite très utilisé en physique nucléaire [19, 42–48, 52, 53]. L'intérêt porté à ce modèle est dû, en plus du fait qu'il soit exactement soluble, à la possibilité d'écrire les solutions sous forme analytique ; ce qui fait de ce modèle un bon test pour les calculs que nous avons réalisés. En outre, ce modèle simule le cas des noyaux sphériques où on ne considère que les deux dernières couches [47], ce qui permet d'établir des prévisions, du moins qualitatives sur ce type de noyaux.

Comme son nom l'indique, ce modèle est constitué de deux niveaux que l'on désigne par U et L le niveau supérieur et inférieur respectivement. Ces deux niveaux sont caractérisés par une même dégénérescence $\Omega_L = \Omega_U = \Omega$, et sont occupés par $N = 2\Omega$ particules. L'énergie des deux niveaux est $\varepsilon_U = +\varepsilon/2$ et $\varepsilon_L = -\varepsilon/2$ où ε est une valeur arbitraire qu'on a choisi égale $1MeV$ dans nos calculs.

La solution exacte de ce modèle a été donnée par Rho et Rasmussen [50]. Elle consiste à diagonaliser l'hamiltonien en utilisant le formalisme des quasi-spins [1]. Les éléments de matrices de H sont donnés par [42, 49] :

$$\begin{aligned}
 \langle J, M_L, M_U | H | J, M'_L, M'_U \rangle = & \{ \varepsilon (M_U - M_L) - G [(J + M_L) (J - M_L + 1) \\
 & + (J + M_U) (J - M_U + 1)] \} \delta_{M_L, M'_L} \\
 & - G \left[\sqrt{(J - M_L) (J + M_L + 1)} \right. \\
 & \times \sqrt{(J + M_U) (J - M_U + 1)} \left. \right] \delta_{M_L, M'_L - 1} \\
 & - G \left[\sqrt{(J + M_L) (J - M_L + 1)} \right. \\
 & \times \sqrt{(J - M_U) (J + M_U + 1)} \left. \right] \delta_{M_L, M'_L + 1}
 \end{aligned} \tag{5.1}$$

où : $J = \Omega/2$, $-J < M_i < J$ ($i = U, L$) et $\varepsilon = \varepsilon_U - \varepsilon_L$.

Parmi les valeurs propres de cette matrice, la plus basse correspond à l'énergie exacte du fondamental.

Dans ce modèle, les équations BCS prennent une forme simple. La demi largeur

du gap est donnée par :

$$\Delta = G\Omega \sqrt{1 - \left[\frac{\varepsilon}{G(2\Omega - 1)} \right]^2} \quad (5.2)$$

et les probabilités d'occupation et d'inoccupation ont la forme :

$$\begin{aligned} u_L^2 = v_U^2 &= \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\varepsilon}{G(2\Omega - 1)} \right) = u^2 \\ v_L^2 = u_U^2 &= \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\varepsilon}{G(2\Omega - 1)} \right) = v^2 \end{aligned} \quad (5.3)$$

Les énergies des quasi-particules sont données par :

$$E_L = E_U = G\Omega. \quad (5.4)$$

L'énergie du fondamental de la théorie BCS s'écrit :

$$E_{BCS} = \Omega\varepsilon (1 - 2v^2) - \frac{\Delta^2}{G} - G\Omega (u^2 + v^2) \quad (5.5)$$

On remarque que la demi-largeur du gap s'annule pour la valeur critique G_c donnée par :

$$G = G_c = \frac{\varepsilon}{(2\Omega - 1)} \quad (5.6)$$

alors que les probabilités d'occupation et d'inoccupation se réduisent à leurs valeurs triviales :

$$\begin{aligned} u_L^2 = v_U^2 &= u^2 = 0 \\ v_L^2 = u_U^2 &= v^2 = 1 \end{aligned} \quad (5.7)$$

Ce problème d'existence de la valeur critique ne se pose pas dans l'approximation de Lipkin-Nogami. Cela est dû à l'introduction du paramètre λ_2 . En effet, dans cette dernière, la demi-largeur du gap et les probabilités v_v^2 et u_v^2 s'écrivent :

$$\Delta_{LN} = G\Omega \sqrt{1 - \left[\frac{\varepsilon}{G(2\Omega - 1) + 4\lambda_2} \right]^2} \quad (5.8)$$

et :

$$\begin{aligned} u^2 &= \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\varepsilon}{G(2\Omega - 1) + 4\lambda_2} \right) \\ v^2 &= \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\varepsilon}{G(2\Omega - 1) + 4\lambda_2} \right) \end{aligned} \quad (5.9)$$

Le rôle de λ_2 est d'empêcher le rapport $\left[\frac{\varepsilon}{G(2\Omega - 1) + 4\lambda_2} \right]^2$ d'être égal à l'unité lorsque G devient inférieur à G_c . Par conséquent, Δ a une valeur finie non nulle quel que soit G .

L'énergie de l'état fondamental de l'approximation Lipkin-Nogami s'écrit :

$$E_{LN} = \Omega(u^2 - v^2) - \frac{\Delta_{LN}}{G} - G\Omega[1 - 2(uv)^2] - 8\lambda_2\Omega(uv)^2 \quad (5.10)$$

où λ_2 est donnée par

$$\lambda_2 = \frac{G(\Omega - 2(uv)^2)}{8(2\Omega - 1)(uv)^2} \quad (5.11)$$

D'autre part, dans le modèle symétrique à deux niveaux, les équations de la QRPA(3.51) prennent une forme simple. Les matrices A et B se réduisent à des matrices d'ordre 2, et leur éléments de matrices sont donnés par :

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_{11} = \mathcal{A}_{22} &= G\Omega - \frac{\Delta^2}{G\Omega^2} + \frac{\Delta^2}{2G\Omega} \\ \mathcal{A}_{12} = \mathcal{A}_{21} &= -\frac{\Delta^2}{2G\Omega} \\ \mathcal{B}_{11} = \mathcal{B}_{22} &= -\frac{\Delta^2}{2G\Omega^2} + \frac{\Delta^2}{2G\Omega} \\ \mathcal{B}_{12} = \mathcal{B}_{21} &= G\Omega - \frac{\Delta^2}{2G\Omega} \end{aligned} \quad (5.12)$$

il vient alors :

$$\omega = 2\Delta \sqrt{\left(1 - \frac{3}{4\Omega}\right) \left(1 - \frac{\Delta^2}{4G^2\Omega^3}\right)} \quad (5.13)$$

5.1.2 Modèle de Richardson

On considère dans ce modèle N=2P particules réparties sur Ω niveaux doublement dégénérés et équidistants; la distance entre 2 niveaux consécutifs étant de 1MeV(voir figure 5-1).

Le problème aux valeurs propres de l'hamiltonien avec appariement a été traité exactement par Richardson [54,55]. En se basant sur l'utilisation de fonctions d'ondes

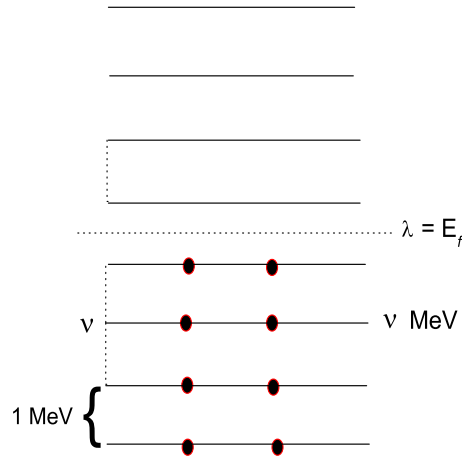


Fig. 5-1 : Les niveaux d'énergie schématisés par le modèle de Richardson.

de la forme suivante :

$$|\Psi\rangle = \prod_{\nu=1}^P B_{\nu}^{\dagger} |0\rangle$$

où $B_{\nu}^{\dagger}$ est un opérateur défini par :

$$B_{\nu}^{\dagger} = \sum_{\mu>0} \frac{1}{2\varepsilon_{\mu} - z_{\nu}} a_{\mu}^{\dagger} a_{\bar{\mu}}^{\dagger}$$

ce qui conduit à résoudre le système d'équations non linéaires suivant :

$$\sum_{\nu} \frac{1}{2\varepsilon_{\nu} - z_{\mu}} - \sum_{\mu'} \frac{1}{z_{\mu'} - z_{\mu}} = \frac{1}{G}$$

L'énergie de l'état fondamental s'écrit alors [46] :

$$E_{gs} = \sum_{\nu=1}^P z_{\nu}$$

5.2 Probabilités d'occupation

Les probabilités d'occupation sont des quantités très importantes dans la mesure où les quantités calculées sont exprimées en fonction de ces paramètres. Dans cette perspective, il est intéressant de comparer les probabilités d'occupation obtenues par les différentes approches précédemment étudiées.

Dans les tableaux 5.1 , 5.2 et 5.3, les probabilités d'occupation v_ν^2 sont calculées dans le cadre du modèle de Richardson pour $N=8, 16$ et 32 et $G=0.8, 0.5$ et 0.375MeV respectivement.

En examinant les résultats obtenues, on remarque que les probabilités d'occupation de la méthode FSBCS sont en très bon accord avec les résultats exacts. En outre, on remarque que les résultats de la théorie BCS sont meilleurs que ceux calculés par la méthode de Lipkin-Nogami; ceci est plus apparent pour les niveaux voisins du niveau de Fermi qui contribuent effectivement dans l'appariement. Ce résultat est surprenant puisque la méthode LN est considérée comme une correction de la théorie BCS et devrait présenter des résultats de meilleure qualité. Ce fait a été relevé dans des travaux précédents [39].

ν	BCS	LN	FSBCS	Exact
1	0.073448	0.075042	0.083357	0.082380
2	0.116581	0.125986	0.124386	0.122445
3	0.202637	0.224764	0.200099	0.196614
4	0.376503	0.394608	0.351990	0.347262
5	0.623497	0.605392	0.648010	0.652738
6	0.797362	0.775236	0.799901	0.803386
7	0.883419	0.874014	0.875614	0.877556
8	0.926552	0.924958	0.916643	0.917619

Tab. 5.1 : Probabilités d'occupation v_ν^2 calculées par différentes approches dans le cadre du modèle de Richardson pour $N=2P=8$ et $G=0.8 \text{ MeV}$

ν	BCS	LN	FSBCS	Exact
1	0.016844	0.018001	0.021745	0.021865
2	0.021979	0.023863	0.027603	0.027591
3	0.029484	0.032979	0.036111	0.035862
4	0.041669	0.048067	0.049073	0.048398
5	0.062723	0.074895	0.070045	0.068614
6	0.102697	0.125975	0.106685	0.103938
7	0.186842	0.225067	0.176968	0.172479
8	0.367603	0.394916	0.327839	0.323508
9	0.632397	0.605084	0.672161	0.676492
10	0.813157	0.774933	0.823032	0.827521
11	0.897303	0.874025	0.893341	0.896062
12	0.937276	0.925105	0.929954	0.931386
13	0.958330	0.951993	0.950926	0.951602
14	0.970516	0.967020	0.963889	0.964138
15	0.978121	0.976136	0.972396	0.972409
16	0.983156	0.981999	0.978255	0.978135

Tab. 5.2 : Même chose que le tableau 5.1 pour $N=2P=16$ et $G=0.5$ MeV

ν	BCS	LN	FSBCS	Exact
9	0.017809	0.021523	0.022583	0.022506
10	0.023160	0.028499	0.028608	0.028316
11	0.031249	0.392778	0.037325	0.036689
12	0.044215	0.056897	0.050536	0.049358
13	0.066587	0.087508	0.071755	0.069751
14	0.108801	0.143342	0.108429	0.105318
15	0.195919	0.244400	0.177945	0.174183
16	0.374317	0.404515	0.325551	0.325325
17	0.625683	0.595485	0.674449	0.674675
18	0.804080	0.755600	0.822055	0.825817
19	0.891199	0.856658	0.891571	0.894682
20	0.933413	0.912492	0.928245	0.930250
21	0.955784	0.943103	0.949464	0.950642
22	0.968751	0.960722	0.962675	0.963311
23	0.976839	0.971501	0.971391	0.971684
24	0.982191	0.978477	0.977417	0.977494

Tab. 5.3 : Même chose que le tableau 5.1 pour $N=2P=32$ et $G=0.375$ MeV, pour des niveaux voisins du niveau de Fermi.

5.3 Demi-largeur du gap

Afin de mettre en évidence l'échec de la théorie BCS dans la description des effets d'appariement dans le domaine des faibles corrélations, et d'examiner l'amélioration apportée par les méthodes de projection (*LN* et *FSBCS*), nous avons étudié l'évolution du paramètre du gap Δ en fonction de la force d'appariement dans le cadre du modèle à deux niveaux pour différentes valeurs du nombre de particules $N=8, 16$ et 32 . Les graphes correspondant sont rapportés dans les figures 5-2, 5-3 et 5-4. Dans ces graphes, le défaut de la théorie BCS apparaît clairement : la demi-largeur du gap s'annule pour $G < G_c$. Ceci conduit à la solution triviale qui correspond à l'absence d'appariement. Ce problème ne se pose pas dans les méthodes de projection (*LN* et *FSBCS*) où l'on constate que Δ décroît graduellement en fonction de G . Ceci est vrai même pour la région de faibles corrélations d'appariement ($G < G_c$), ce qui signifie qu'une solution physique non triviale existe dans ce domaine.

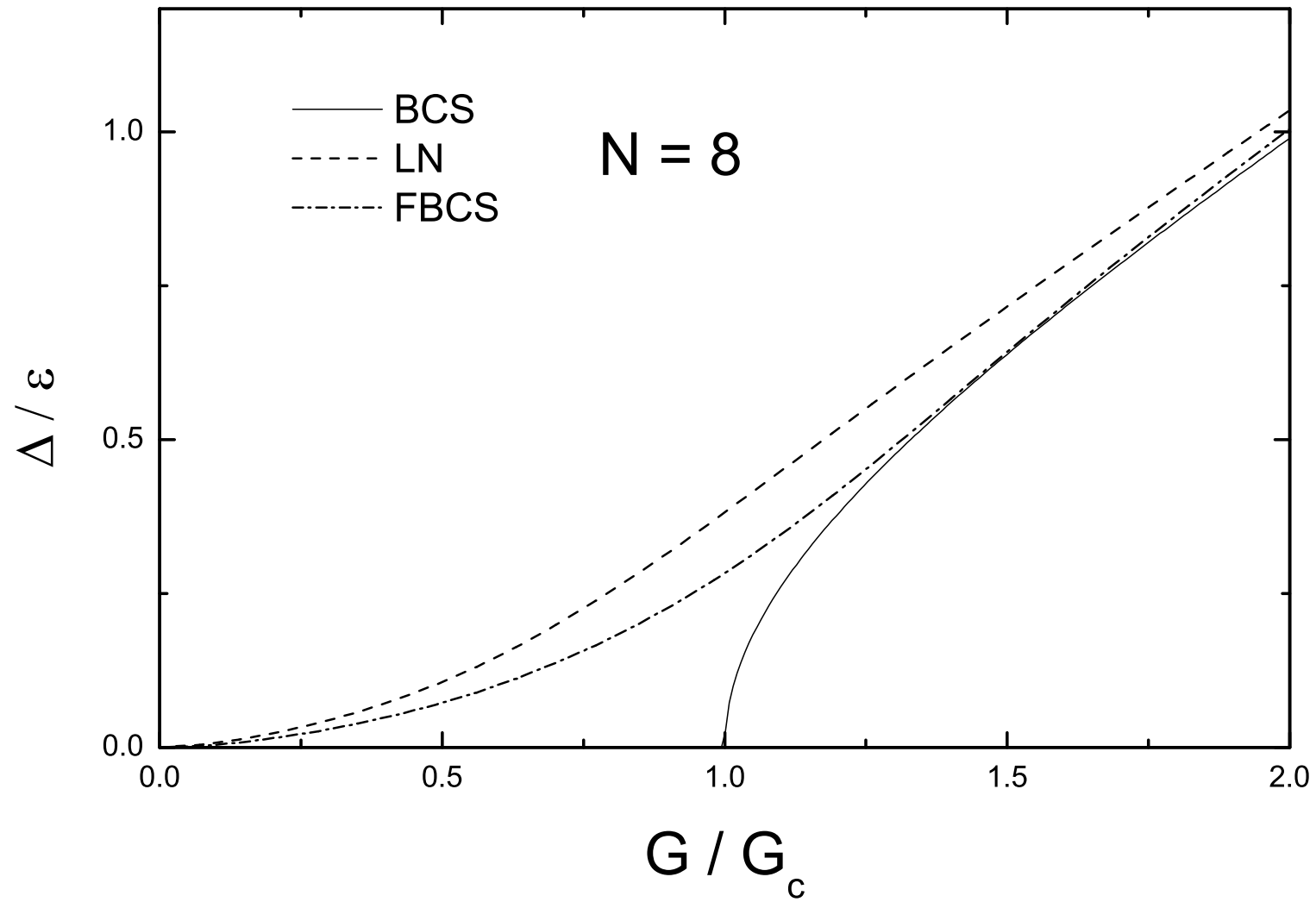


Fig. 5-2 : Evolution de la demi largeur du gap en fonction de la force d'appariement dans le cadre du modèle à deux niveaux pour $N=8$.

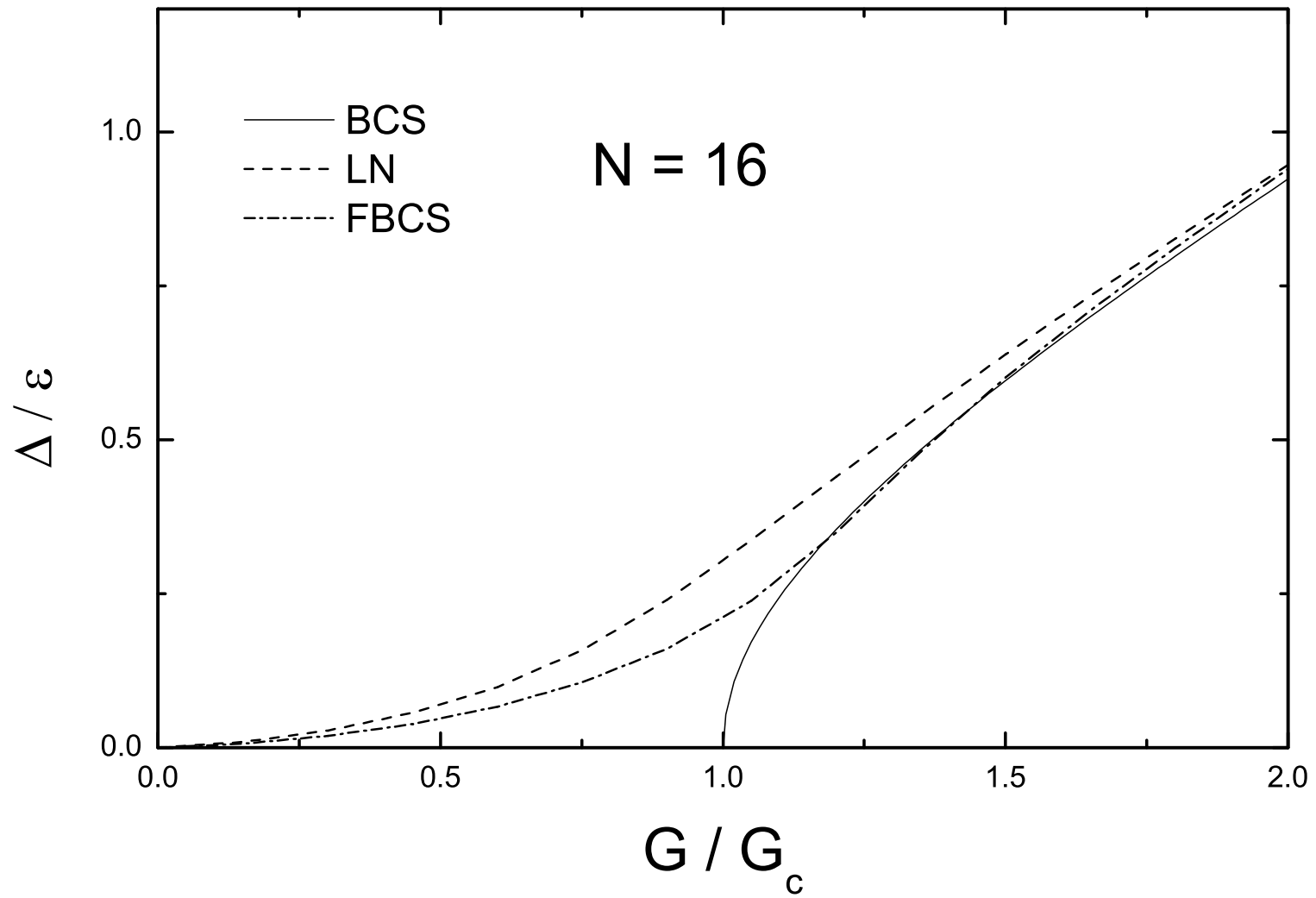


Fig. 5-3 : Même chose que le précédent pour $N=16$.

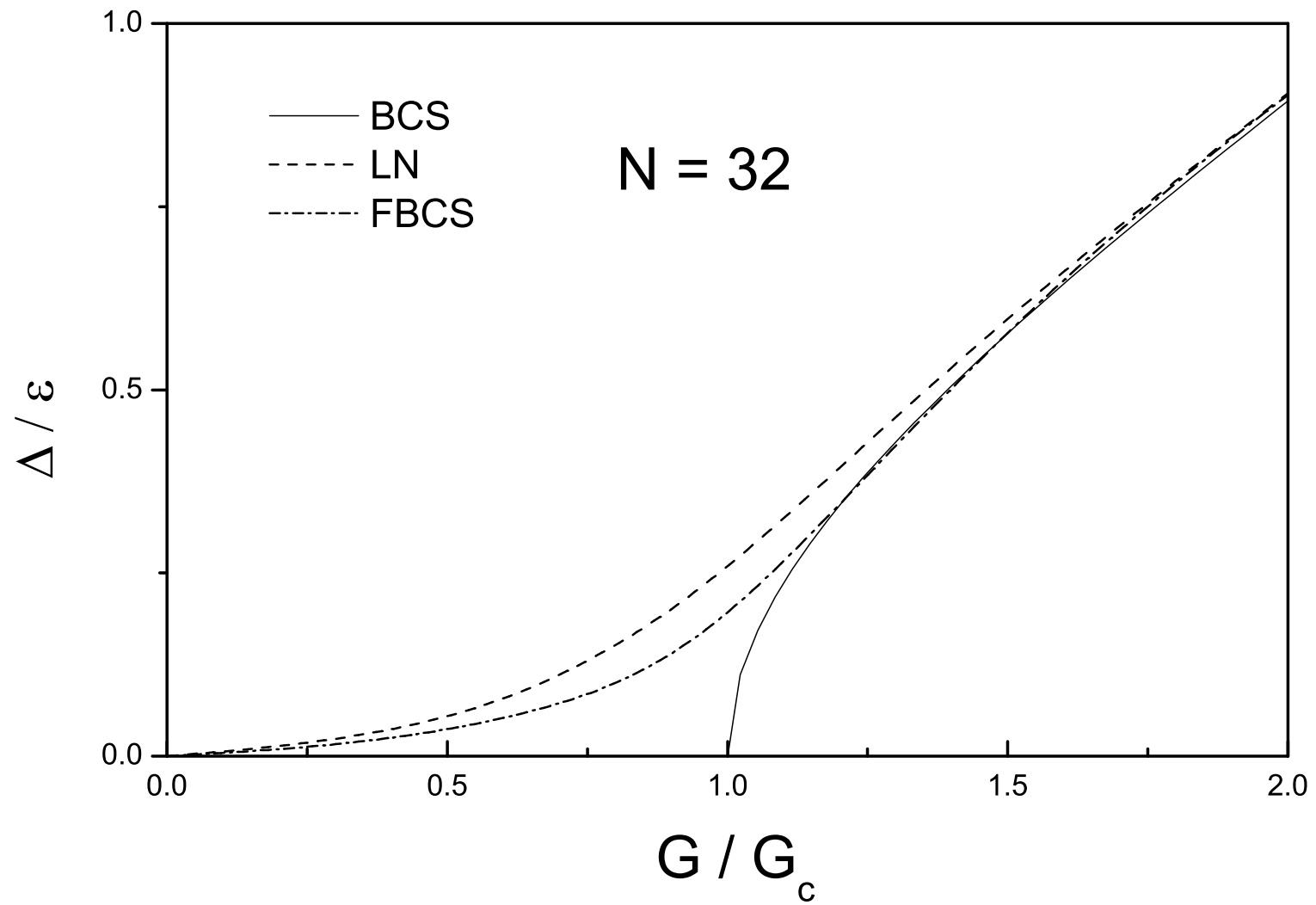


Fig. 5-4 : Même chose que le précédent pour $N=32$.

5.4 Energie de corrélations d'appariement et énergie de l'état fondamental

La théorie BCS a été introduite pour inclure les effets d'appariement dans le champ moyen, dans ce contexte, l'énergie de corrélation dû à l'appariement est définie par :

$$E_p = E_{BCS} - E_{SP} \quad (5.14)$$

où E_{BCS} est l'énergie de l'état fondamental calculée par la théorie BCS définie par l'eq.(1.33) et E_{SP} est l'énergie du modèle à particules indépendantes utilisé.

Pour étudier l'influence des approches que nous avons étudiées précédemment sur cette énergie nous avons tracé l'erreur relative définie par :

$$D(\%) = \frac{E_p^{exact} - E_p}{E_p^{exact}} \times 100 \quad (5.15)$$

où : E_p^{exact} est l'énergie de corrélation d'appariement exacte et E_p est celle calculée par les différentes méthodes, en fonction de la quantité adimensionnelle G/G_c . Ces graphes correspondent à plusieurs valeurs de N et dans le cadre du modèle à deux niveaux. Voir figures 5-5,5-6 et 5-7.

Dans la région où $G < G_c$, l'erreur commise en utilisant la théorie BCS est maximale ($D^{BCS}(G < G_c) = 100\%$), cela signifie que la théorie BCS coïncide avec le modèle à particules indépendantes. Pour les fortes corrélations, cette erreur décroît sensiblement mais reste importante (pour $N = 8, D^{BCS}(G/G_c = 2.5) \simeq 29\%$, pour $N = 16, D^{BCS}(G/G_c = 2.5) \simeq 16\%$ et pour $N = 32, D^{BCS}(G/G_c = 2.5) \simeq 9\%$). On constate que les résultats s'améliorent au fur à mesure que N augmente, ce qui confirme que la théorie BCS convient mieux à la description des systèmes ayant un grand nombre de particules.

La méthode LN est très bonne pour les fortes corrélations. On remarque que dès que G/G_c devient supérieur à 1.5, l'erreur relative D^{LN} devient très petite. Par contre, pour $G < G_c$, cette erreur est relativement importante : la méthode LN, dans cette région, est moins précise. On remarque également que la QRPA fournit des résultats très satisfaisants sauf autour du point $G = G_c$ où l'on constate une

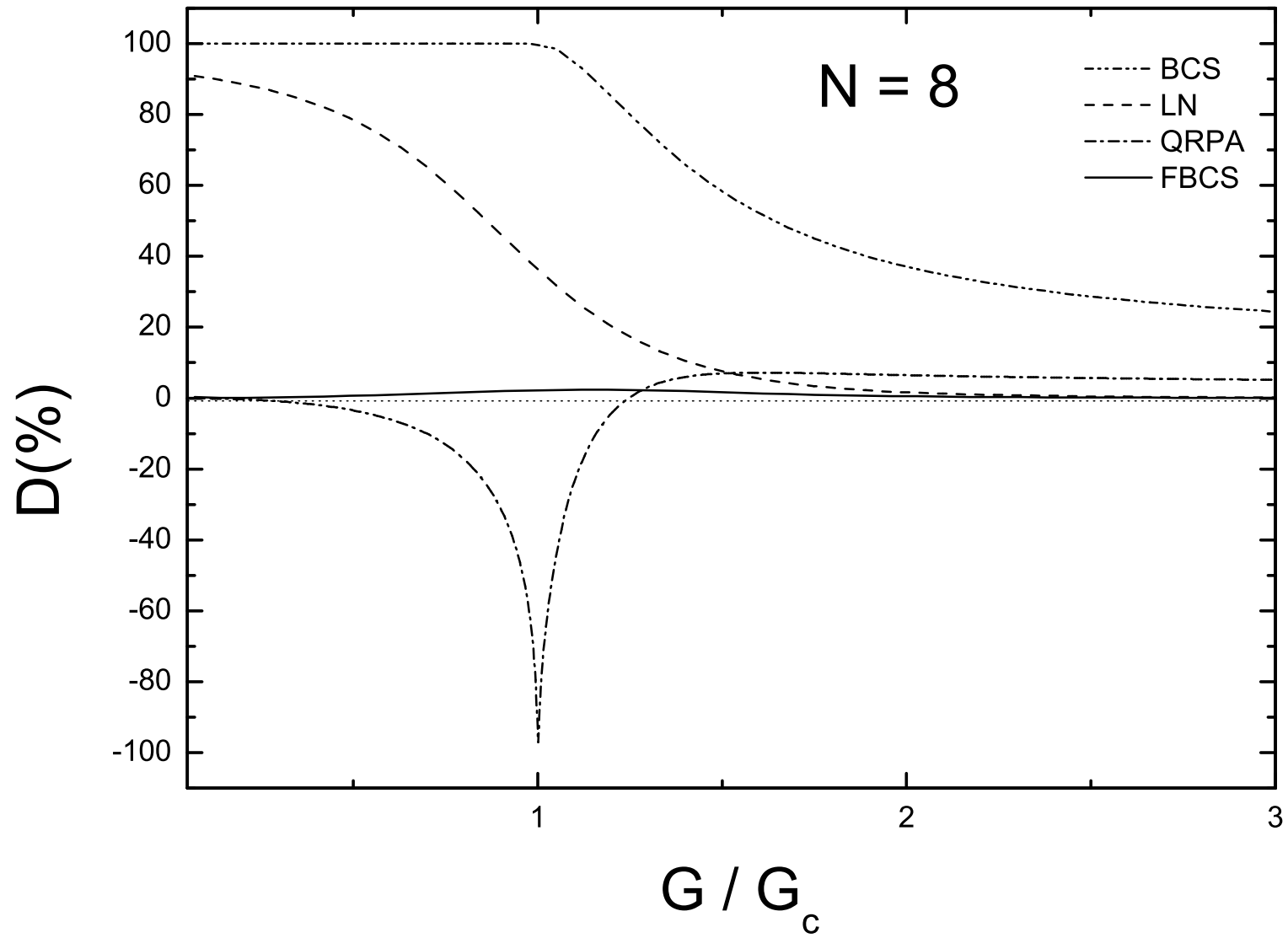


Fig. 5-5 : Evolution de la quantité D en fonction de la force d'appariement dans le cadre du modèle à deux niveaux pour $N=8$.

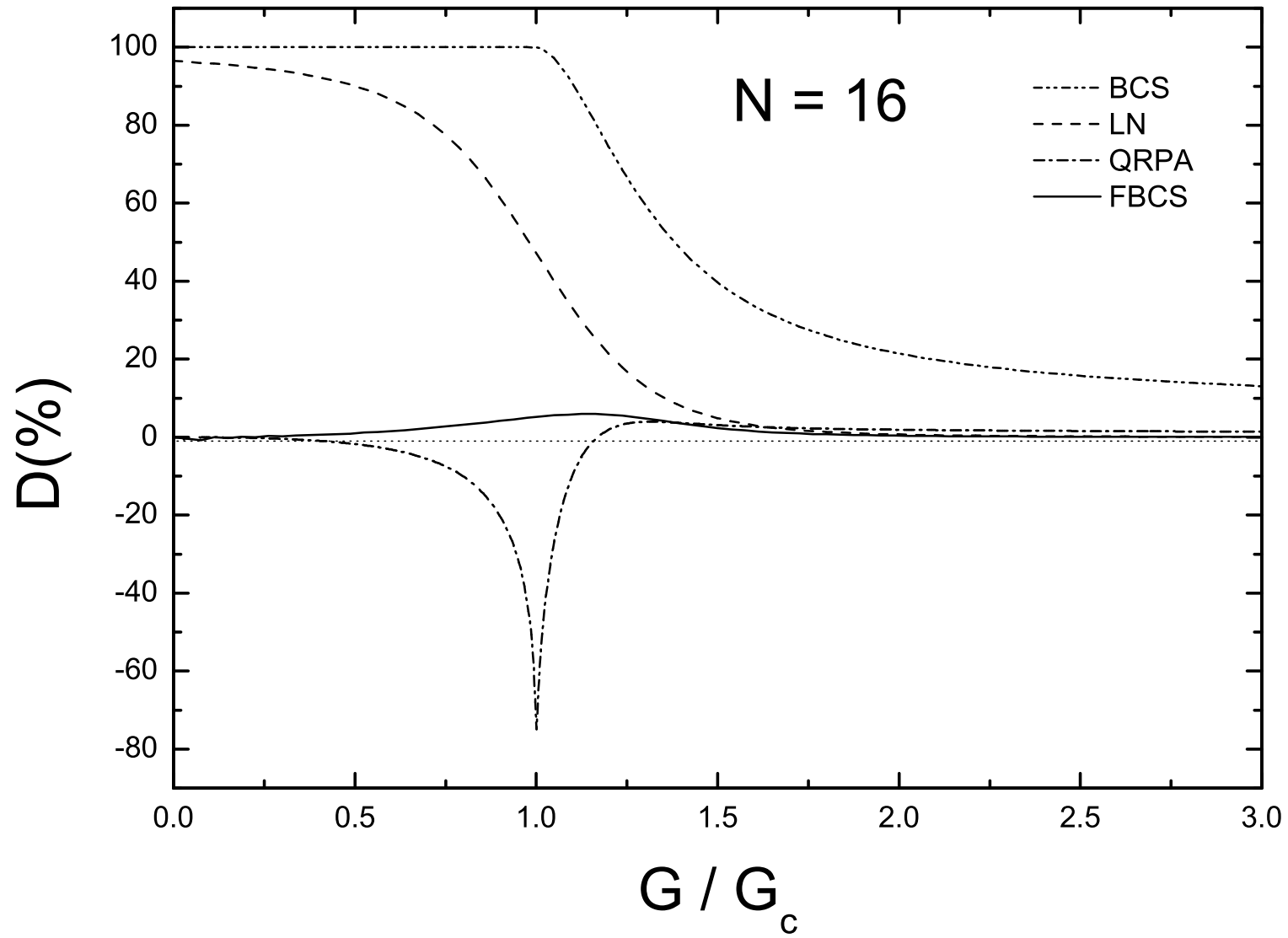


Fig. 5-6 : Même chose que le précédent pour N=16.

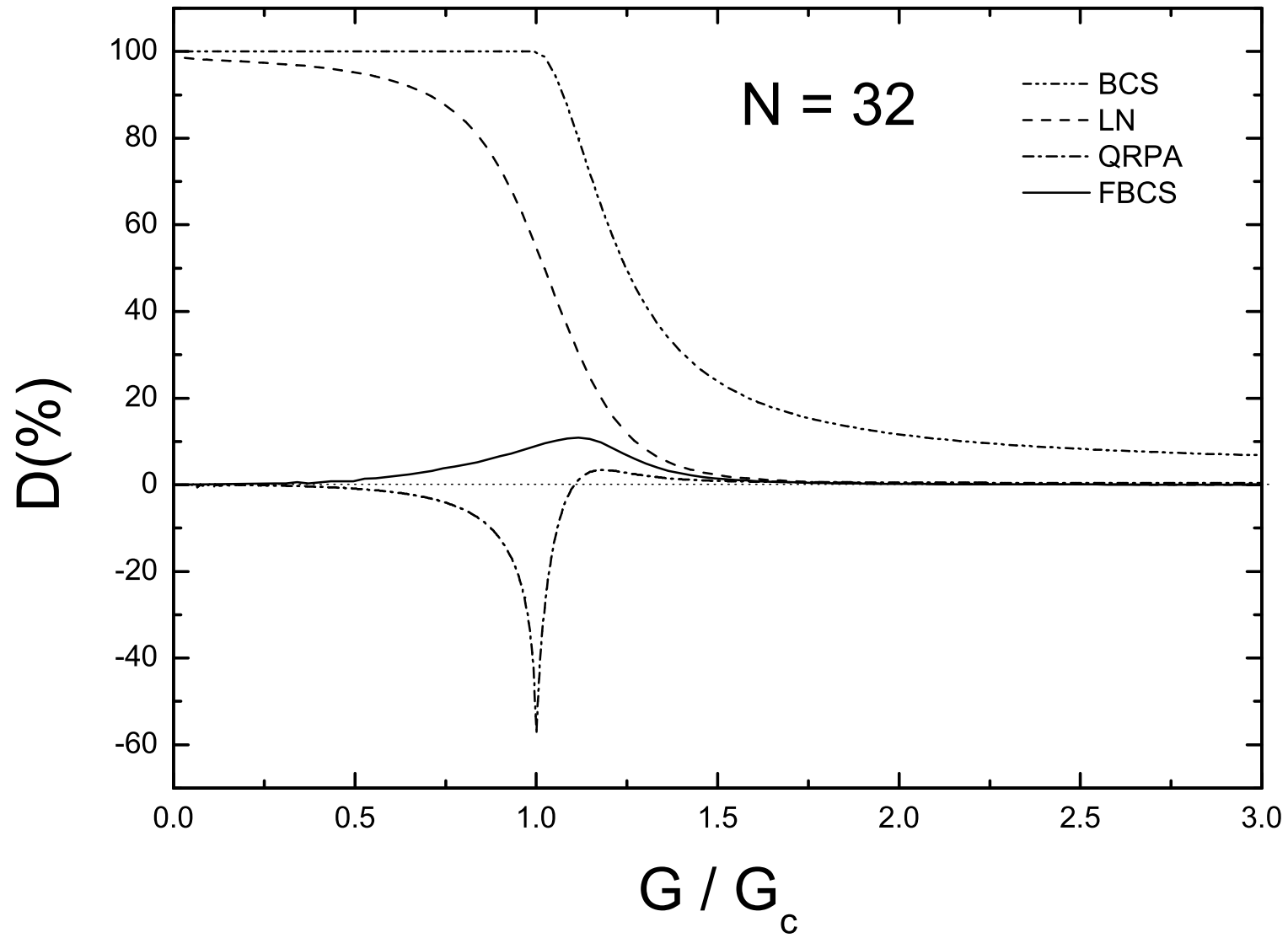


Fig. 5-7 : Même chose que le précédent pour $N=32$.

discontinuité des courbes due à la transition du système de la phase normale à la phase superfluide. Par ailleurs, la méthode FSBCS est nettement meilleure car l'erreur ne dépasse pas 5% pour $N=8$, 12% pour $N=16$ et 18% pour $N=32$, et ce pour toute valeur de G .

Afin de mettre en évidence l'influence du nombre de particules sur l'énergie évaluée par les différentes méthodes, nous avons tracé en dans la figure 5-8 l'évolution de la quantité D en fonction de N pour une valeur donnée de G . Cette valeur a été choisie de manière à ce que le système soit en phase superfluide. On constate que les courbes des méthodes Lipkin-Nogami, QRPA et FSBCS se rejoignent dès que $N=16$, tandis que celle de BCS s'écarte sensiblement des autres pour N petit. Cependant, l'erreur D diminue sensiblement pour les grandes valeurs de N où la théorie BCS devient une approximation acceptable. Globalement, on remarque que la qualité des différentes approches s'améliore au fur et à mesure que N augmente.

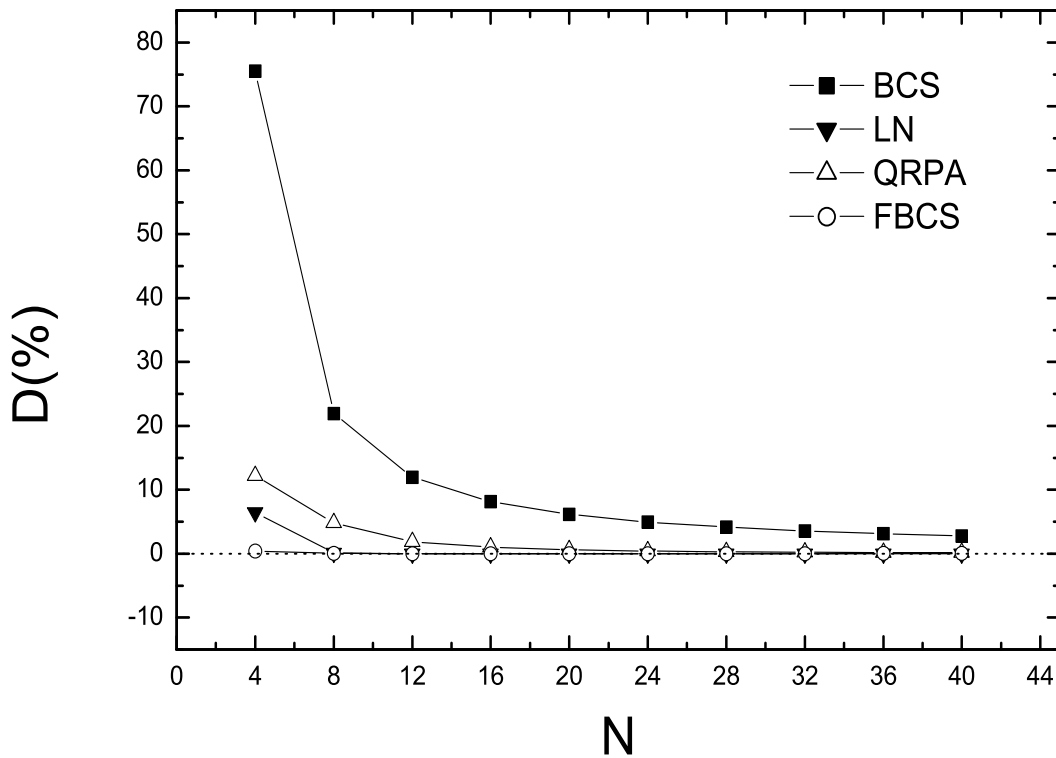


Fig. 5-8 : Evolution de la quantité D en fonction du nombre de particules N dans le cadre du modèle à deux niveaux pour $G=0.5\text{MeV}$.

Après avoir testé la validité de chaque méthode dans le cadre du modèle à deux niveaux, nous les avons appliquées au modèle de Richardson pour différentes valeurs du nombre de particules ($N=8, 16$ et 32). Pour cela, nous avons tracé l'évolution de l'énergie de l'état fondamental en fonction de la force d'appariement G dans les figures 5-9, 5-10 et 5-11. De prime abord, on remarque que les résultats obtenus

par les méthodes LN, QRPA et FSBCS sont meilleurs que ceux de la théorie BCS. Néanmoins, cette amélioration diffère sensiblement d'une méthode à une autre. En effet, dans le cas de la méthode LN, les résultats sont de bonne qualité pour les grandes valeurs de G , mais s'écartent des résultats exacts d'une manière très sensible dans la région des faibles corrélations d'appariement. Les raisons de l'écart de la méthode LN dans cette région ont été discutées dans les références [42, 43, 47]. Il a été attribué à la troncature du développement en série (2.10).

On remarque également que les résultats de la méthode de projection FSBCS présentent un accord presque parfait avec les résultats exacts et ce, pour toutes les valeurs de G . Ce qui nous permet de conclure que les effets des fluctuations du nombre de particules observées dans la théorie BCS ont été éliminés.

Par ailleurs, la QRPA reproduit des résultats de bonne qualité dans la région des fortes corrélations ($G > G_c$) et de faibles corrélations ($G < G_c$), mais donne une prédiction médiocre de l'énergie de l'état fondamental autour de ce point où l'on observe une discontinuité correspondant à une transition non physique du système de la phase normale à la phase superfluide. Cette discontinuité est due à l'utilisation de l'approximation des quasi-bosons (3.14) qui consiste à traiter les paires de fermions comme étant des bosons et à évaluer les valeurs moyennes sur un vide non corrélé (le vide BCS). Plusieurs travaux ont été effectués dans le but de surmonter ce problème. On peut citer notamment :

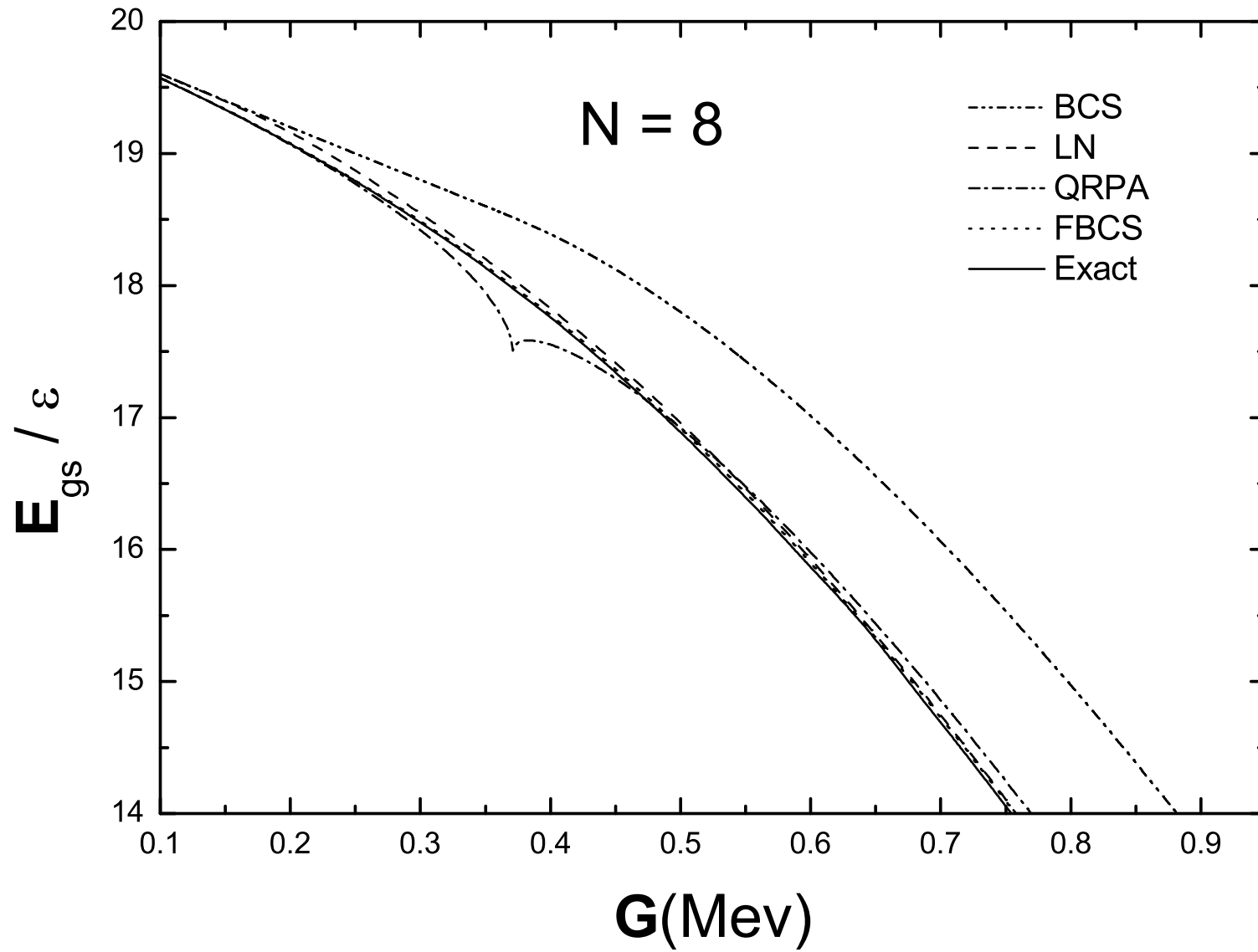


Fig. 5-9 : Evolution de l'énergie de l'état fondamental en fonction de la force d'appariement dans le cadre du modèle de Richardson pour N=8.

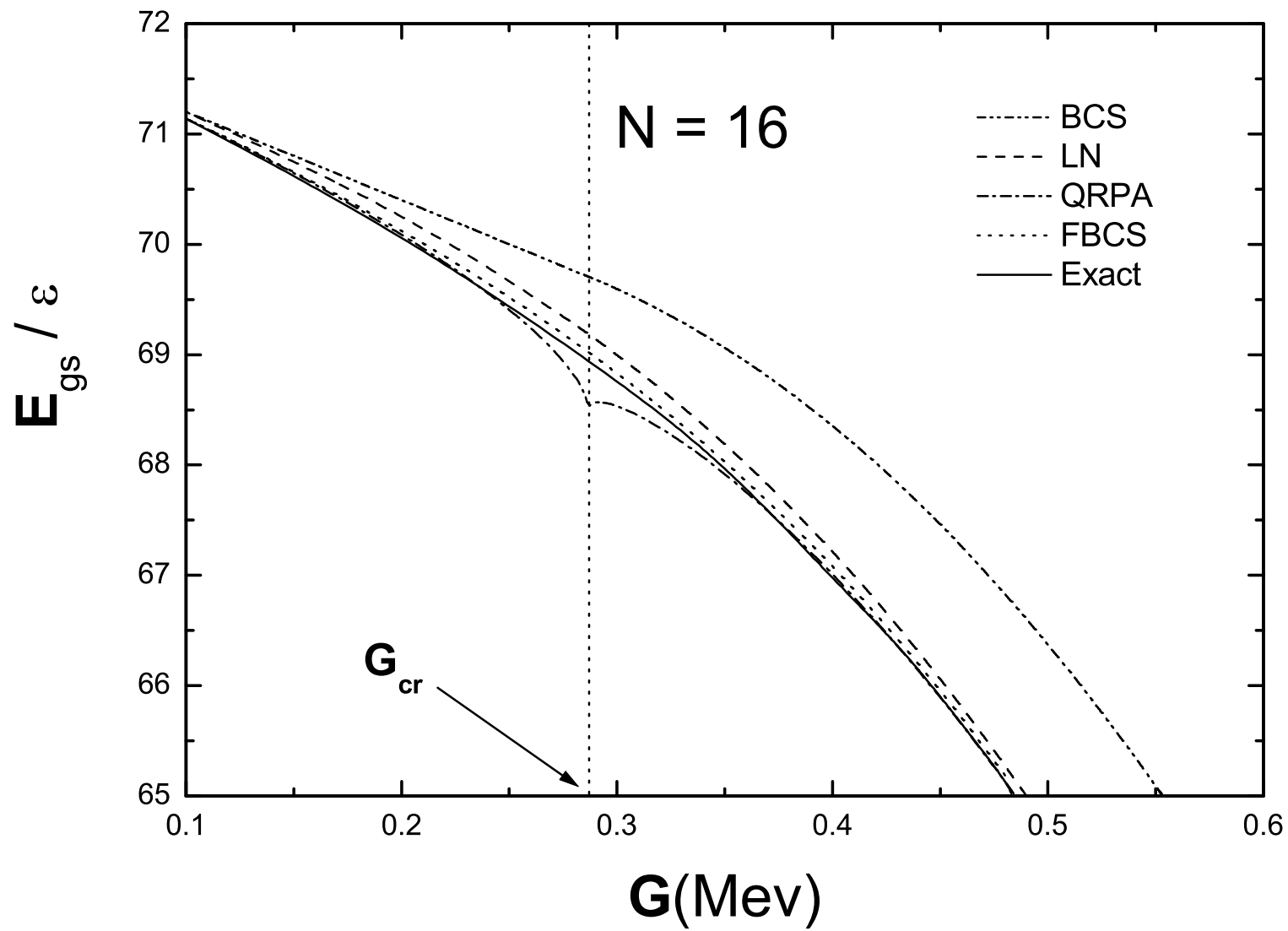


Fig. 5-10 : Même chose que le précédent pour $N=16$.

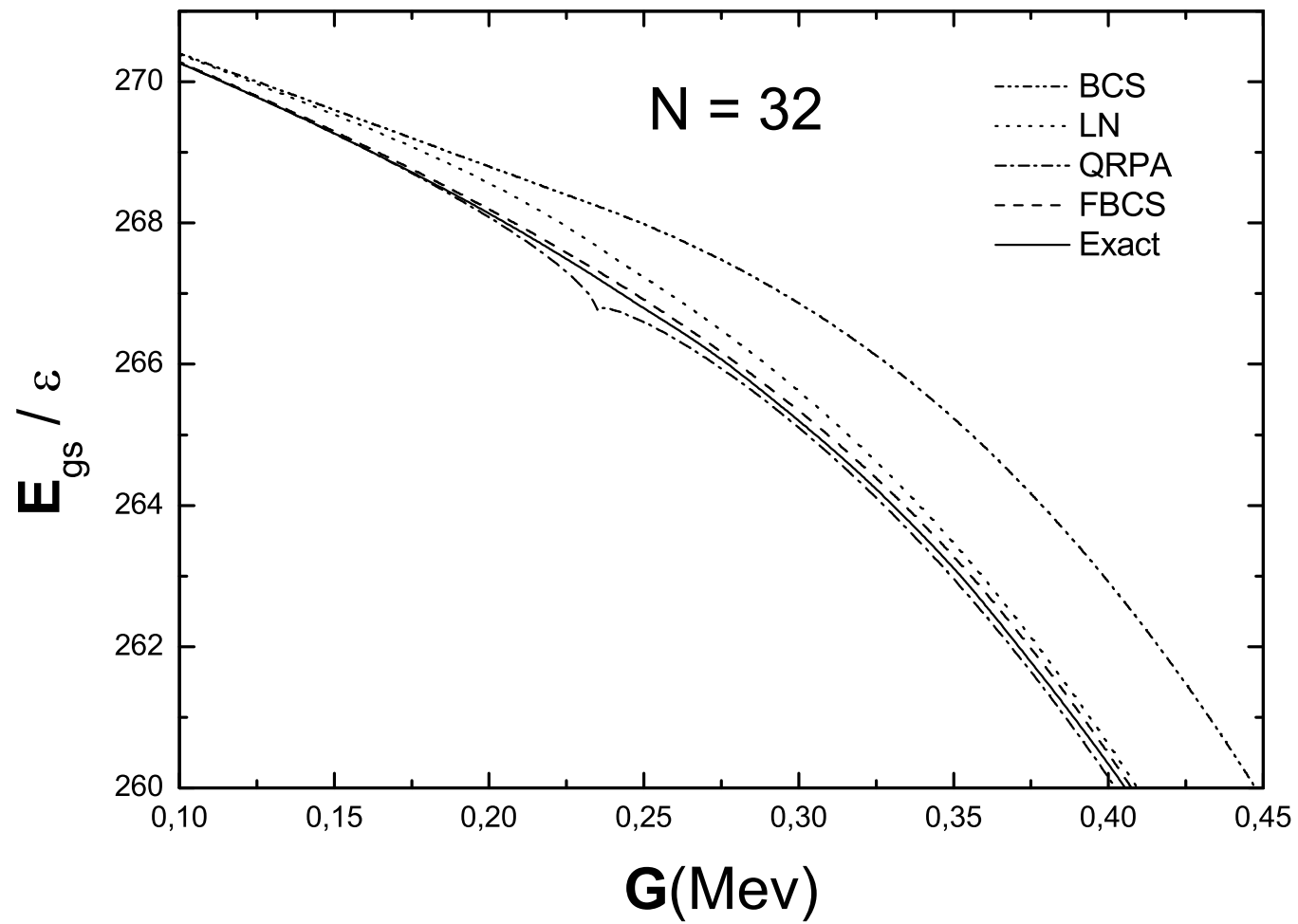


Fig. 5-11 : Même chose que le précédent pour N=32.

1. La QRPA renormalisée qui consiste à remplacer l'approximation des quasi-bosons(3.14) par une approximation moins grossière en renormalisant la valeur moyenne des commutateurs par :

$$\left\langle RPA \left| \left[A_i, A_j^\dagger \right] \right| RPA \right\rangle = D_j \delta_{ij} \quad (5.16)$$

avec : $D_j = 1 - 2n_j$

et : $n_j = \left\langle RPA \left| a_j^\dagger a_j \right| RPA \right\rangle \neq 0$

où n_j est déterminé d'une manière self consistante comme décrit dans la ref. [52]. Cette méthode a été très utilisée [2,44,45,49,51,52] et a donné des résultats satisfaisants.

2. La self-consistante RPA(SC-QRPA) [57] repose sur l'idée de la construction d'un état corrélé $|RPA\rangle$ et ensuite le calcul des valeurs moyennes des commutateurs sur cet état.

Un calcul self-consistent prenant en considération les corrélations d'appariement a été effectué récemment [53]. Cependant, cette approche n'a été appliquée qu'au modèle à deux niveaux.

De plus, Sambataro et Dinh Dang [48] ont proposé une approche variationnelle basée sur un mapping de Marumori(VM-RPA) [1]. Le problème est par conséquent transféré d'un espace de fermions à un espace de bosons, permettant ainsi de contourner les problèmes liés aux règles d'anticommutation des opérateurs fermioniques. Cette approche a été appliquée au modèle à deux niveaux et comparée à la SC-QRPA dans la référence [53]. Néanmoins, nous avons remarqué que ces résultats n'ont pas été comparés à ceux des méthodes de projection. Pour cela, nous avons jugé utile de faire une comparaison entre les approches sus-citées et la méthode de projection FSBCS.

Sur le tableau 5.4 sont regroupés les résultats des trois approches ainsi que les résultats exacts de l'énergie de l'état fondamental calculées dans le cadre du modèle à deux niveaux.

En examinant ces résultats, on constate que les différentes approches donnent des résultats très proches pour les faibles corrélations tandis que pour la région des fortes corrélations, les résultats des approches SC-QRPA et VM-RPA s'écartent un peu des résultats exacts. En plus ces deux méthodes nécessitent des efforts numériques

G/ϵ	Exact	FSBCS	SC-QRPA	VM-RPA
0.00	-20.00000	-20.00000	-20.00000	-20.00000
0.01	-20.21101	-20.21095	-20.21101	-20.21101
0.02	-20.44921	-20.44894	-20.44917	-20.44918
0.03	-20.72625	-20.72434	-20.72593	-20.72599
0.04	-21.06339	-21.05507	-21.06100	-21.06130
0.05	-21.50260	-21.47417	-21.48640	-21.48733
0.06	-22.12491	-22.05662	-22.03260	-22.03638
0.07	-23.03321	-22.95639	-22.77899	-22.80453
0.08	-24.24609	-24.19577	-23.97001	-23.99588
0.09	-25.68929	-25.65749	-25.39821	-25.42829
0.10	-27.29077	-27.26918	-26.98390	-27.01885

Tab. 5.4 : L'énergie de l'état fondamental en fonction de la quantité G/ϵ calculée par les trois approches dans le cadre du modèle à deux niveaux pour $N=20$.

considérables [53]. La méthode FSBCS est nettement meilleure dans cette région.

Conclusion

Dans le but d'éliminer les effets non physiques (spurious effects) dus à la non conservation du nombre de particules de la théorie BCS, nous avons étudié, dans le présent travail, trois méthodes dont deux sont des méthodes approximatives et une méthode exacte d'élimination des fluctuations du nombre de particules. .

Nous avons considéré la méthode de Lipkin-Nogami qui permet d'obtenir, par l'introduction d'un nouveau coefficient pour tenir compte du vrai nombre de particules, une expression approximative de l'énergie de l'état fondamental projeté sans passer par des calculs de projection explicite. Les nouvelles équations du gap ont été établies. Ces équations généralisent celles de la méthode BCS et sont de forme similaire ; ce qui facilite leur programmation.

Les problèmes de la brisure de symétrie dus à la non conservation du nombre de particules ont été, par la suite, pris en considération par le biais l'approximation des phases aléatoires (QRPA). Celle-ci repose sur la méthode des commutateurs ou la méthode des équations du mouvement et consiste à approximer le vide de la méthode par l'état BCS. Les équations de la QRPA sont été alors établies et résolues dans le cadre de l'approximation des quasi-bosons (QBA). Cette dernière facilite la résolution des équations de la QRPA mais viole le principe d'exclusion de Pauli.

La méthode de restauration exacte du nombre de particules utilisée dans ce travail est la méthode FSBCS. Elle est basée sur une discrétisation de l'expression intégrale continue de l'opérateur de projection dans l'espace nombre d'occupation. Cette méthode permet de construire une suite de fonctions rapidement convergente vers l'état ayant le bon nombre de particules. Les équations du gap de la méthode ont été établies et les paramètres variationnels ont été déterminés en résolvant ces équations. Cette approche dite de variation après projection (VAP) est en cohérence avec le principe variationnel de Ritz.

Afin de rendre compte de la validité de ces trois méthodes, nous avons utilisé comme modèles à particules indépendantes deux modèles schématiques exacte-

ment solubles. Le modèle à deux niveaux où l'on considère que N particules sont réparties sur deux niveaux ayant la même dégénérescence. Il est utilisé pour simuler le cas du noyau sphérique. Le second modèle est celui de Richardson. Il est basé sur un spectre discret équidistant d'énergies à particules indépendantes. Ce modèle est généralement utilisé pour la simulation des noyaux déformés. Le choix de ces deux modèles a été motivé par leur large utilisation dans la littérature et leur maniabilité au niveau du calcul numérique.

Dans une première étape, nous avons comparé les probabilités d'occupation de la théorie BCS à celles des méthodes de projection Lipkin-Nogami et FSBCS aux résultats exacts. Il s'est avéré que les meilleurs résultats sont fournis par la méthode FSBCS tandis que les résultats de la méthode de Lipkin-Nogami sont moins bons que ceux de BCS.

Par ailleurs, la défaillance de la théorie BCS dans la région des faibles corrélations d'appariement est mise en exergue en étudiant la demi largeur du gap. Le problème de l'existence de la valeur critique de la force d'appariement est éliminé par les méthodes de projection Lipkin-Nogami et FSBCS.

Nous nous sommes intéressés plus particulièrement dans ce travail, à l'énergie de l'état fondamental et l'énergie de corrélation d'appariement. Afin d'évaluer l'apport des trois méthodes à ces deux quantités, nous avons étudié, dans le cadre du modèle à deux niveaux, l'évolution de l'erreur relative commise en calculant l'énergie de corrélation d'appariement et ce, dans chaque méthode. Nous avons constaté que la méthode FSBCS approche d'une façon quasi parfaite les résultats exacts et ce, pour toutes les valeurs de la force d'appariement. Par ailleurs, la QRPA fournit des résultats satisfaisants sauf autour de la valeur critique de G . Ceci est une conséquence de la transition de phase normale-superfluide due à l'utilisation de l'approximation des quasi-bosons dans l'établissement des équations de la QRPA. La méthode de Lipkin-Nogami ne donne des résultats satisfaisants que dans la région des fortes corrélations où on remarque que les courbes des trois méthodes se rejoignent. Dans la région des faibles corrélations, la méthode de Lipkin-Nogami sous-estime l'énergie de corrélations d'appariement, toutefois, elle améliore les résultats de la théorie BCS. En ce qui concerne l'énergie de l'état fondamental, les mêmes remarques demeurent valables. Parmi les trois méthodes, la méthode FSBCS reste incontestablement la meilleure. Elle reproduit de bons résultats pour toutes les valeurs de la force d'appariement.

Finalement, Nous avons comparé les résultats de la méthode FSBCS à deux

méthodes récemment proposées pour corriger les défauts de la QRPA. Il s'agit de la QRPA self consistante et une approche variationnelle de la QRPA basée sur le mapping du type de Marumori. Bien que ces deux méthodes conduisent à des résultats satisfaisants et traitent, en conséquence, convenablement les corrélations entre quasi-particules, la méthode de projection FSBCS reste le meilleur moyen pour restaurer la symétrie relative au nombre de particules brisée dans la théorie BCS.

Annexe A

Hamiltonien nucléaire en représentation quasi-particules

En représentation particules l'hamiltonien nucléaire s'écrit :

$$H' = H - \lambda N = \sum_{\nu>0} (\varepsilon_\nu - \lambda) a_\nu^\dagger a_\nu - G \sum_{\nu,\mu>0} a_\nu^\dagger a_\nu^\dagger a_{\tilde{\mu}} a_\mu \quad (\text{A.1})$$

En appliquant le théorème de Wick, on trouve :

$$\begin{aligned} H' = E_0 &+ \sum_{\nu>0} H_{11}^\nu E_\nu \bar{n}_\nu + \sum_{\nu,\mu>0} H_4^{\nu,\mu} (A_\nu^\dagger A_\mu^\dagger + A_\mu A_\nu) \\ &+ \sum_{\nu,\mu>0} H_{31}^{\nu,\mu} (\bar{n}_\mu A_\nu + A_\nu^\dagger \bar{n}_\mu) \\ &+ \sum_{\nu,\mu>0} H_{22}^{\nu,\mu} (A_\nu^\dagger A_\mu) + \sum_{\nu,\mu>0} \dot{H}_{22}^{\nu,\mu} \bar{n}_\mu (\bar{n}_\nu - \delta_{\nu\mu}) \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

avec :

$$\begin{aligned}
E_0 &= 2 \sum_{\nu > 0} \left(\varepsilon_\nu - \lambda - \frac{G}{2} v_\nu^2 \right) v_\nu^2 - \frac{\Delta^2}{G} \\
H_{11}^\nu &= \left(\varepsilon_\nu - \lambda - \frac{G}{2} v_\nu^2 \right) (u_\nu^2 - v_\nu^2) + 2\Delta u_\nu v_\nu \\
H_4^{\nu,\mu} &= \frac{G}{2} (u_\nu^2 v_\mu^2 + u_\mu^2 v_\nu^2) = H_4^{\mu,\nu} \\
H_{31}^{\nu,\mu} &= G u_\mu v_\mu (u_\nu^2 - v_\nu^2) \neq H_{31}^{\mu,\nu} \\
H_{22}^{\nu,\mu} &= -G (u_\nu^2 u_\mu^2 + v_\nu^2 v_\mu^2) = H_{22}^{\mu,\nu} \\
\dot{H}_{22}^{\nu,\mu} &= -G u_\nu v_\nu u_\mu v_\mu = \dot{H}_{22}^{\mu,\nu} \\
\Delta &= G \sum_{\nu > 0} u_\nu v_\nu : \text{demi-largeur du gap.}
\end{aligned}$$

où : $A_\nu^\dagger$ et A_ν sont les opérateurs de création et d'annihilation de paires de quasi-particules définis par :

$$\begin{aligned}
A_\nu^\dagger &= \alpha_\nu^\dagger \alpha_{\bar{\nu}}^\dagger \\
A_\nu &= (A_\nu^\dagger)^\dagger = \alpha_{\bar{\nu}} \alpha_\nu
\end{aligned}$$

et $\bar{n}_\nu$ et défini par :

$$\begin{aligned}
\bar{n}_\nu &= n_\nu + n_{\bar{\nu}} \\
n_\nu &= \alpha_\nu^\dagger \alpha_\nu \\
n_{\bar{\nu}} &= \alpha_{\bar{\nu}}^\dagger \alpha_{\bar{\nu}}
\end{aligned}$$

Ces opérateurs vérifient les relations de commutations suivantes :

$$\begin{aligned}
[A_\nu, A_\mu^\dagger] &= \delta_{\nu\mu} (1 - \bar{n}_\nu) \\
[A_\nu, A_\mu] &= [A_\nu^\dagger, A_\mu^\dagger] = 0 \\
[A_\nu^\dagger, n_\mu] &= -\delta_{\nu\mu} A_\nu^\dagger = [A_\nu^\dagger, n_{\bar{\mu}}] \\
[A_\nu, n_\mu] &= \delta_{\nu\mu} A_\nu = [A_\nu, n_{\bar{\mu}}] \\
[\bar{n}_\nu, A_\mu^\dagger] &= 2\delta_{\nu\mu} A_\nu^\dagger \\
[\bar{n}_\nu, A_\mu] &= -2\delta_{\nu\mu} A_\nu
\end{aligned}$$

Annexe B

Calcul des commutateurs

$$\left[A_\nu, \left[H, A_\mu^\dagger \right] \right] \text{ et } \left[A_\nu, \left[H, A_\mu \right] \right]$$

On explicite l'hamiltonien en représentation quasi-particules (voir Annexe A), puis on calcule $[H, A_\mu]$ et $[H, A_\mu^\dagger]$:

$$\begin{aligned} [H, A_\mu^\dagger] &= 2 \left(E_\mu - \dot{H}_{22}^{\mu,\mu} \right) A_\mu^\dagger + \sum_{\nu>0} [H_4^{\nu,\mu} (1 - \bar{n}_\mu) A_\nu + H_4^{\mu,\nu} A_\nu (1 - \bar{n}_\mu)] \\ &\quad + \sum_{\nu>0} [H_{31}^{\mu,\nu} \bar{n}_\nu (1 - \bar{n}_\mu) + 2H_{31}^{\nu,\mu} (A_\mu^\dagger A_\nu + A_\nu^\dagger A_\mu^\dagger)] \\ &\quad + \sum_{\nu>0} H_{22}^{\nu,\mu} A_\nu^\dagger (1 - \bar{n}_\mu) + 2 \sum_{\nu>0} \dot{H}_{22}^{\nu,\mu} (\bar{n}_\nu A_\mu^\dagger + A_\mu^\dagger \bar{n}_\nu) \end{aligned} \quad (\text{B.1})$$

$$\begin{aligned} [H, A_\mu] &= - \left([H, A_\mu^\dagger] \right)^\dagger \\ &= -2 \left(E_\mu - \dot{H}_{22}^{\mu,\mu} \right) A_\mu - \sum_{\nu>0} [H_4^{\nu,\mu} (1 - \bar{n}_\mu) A_\nu^\dagger + H_4^{\mu,\nu} A_\nu^\dagger (1 - \bar{n}_\mu)] \\ &\quad - \sum_{\nu>0} [H_{31}^{\mu,\nu} (1 - \bar{n}_\mu) \bar{n}_\nu + 2H_{31}^{\nu,\mu} (A_\nu^\dagger A_\mu + A_\mu A_\nu)] \\ &\quad - \sum_{\nu>0} H_{22}^{\nu,\mu} (1 - \bar{n}_\mu) A_\nu - 2 \sum_{\nu>0} \dot{H}_{22}^{\nu,\mu} (A_\mu \bar{n}_\nu + \bar{n}_\nu A_\mu) \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

On a alors :

$$\begin{aligned}
[A_\nu, [H, A_\mu^\dagger]] &= 2 \left(E_\mu - \dot{H}_{22}^{\mu,\mu} \right) (1 - \bar{n}_\nu) \delta_{\nu\mu} - 2 \sum_{l>0} H_4^{l,\mu} \delta_{\nu\mu} (A_\nu A_l + A_l A_\mu) \\
&\quad - 2 \sum_{l>0} H_{31}^{\mu,l} [\delta_{\nu\mu} \bar{n}_l A_\nu + \delta_{\nu l} A_\nu (\bar{n}_\mu - 1)] \\
&\quad + 2 \sum_{l>0} H_{31}^{l,\mu} \left[(1 - \bar{n}_\nu) (\delta_{\nu\mu} A_l + \delta_{\nu l} A_\mu^\dagger) + A_l^\dagger (1 - \bar{n}_\nu) \delta_{\nu\mu} \right] \\
&\quad + 2 \sum_{l>0} \dot{H}_{22}^{l,\mu} [2 \delta_{\nu l} (A_\mu^\dagger A_\nu + A_\nu A_\mu^\dagger) + \delta_{\nu\mu} (\bar{n}_l (1 - \bar{n}_\nu) + (1 - \bar{n}_\nu) \bar{n}_l)] \\
&\quad + \sum_{l>0} H_{22}^{\nu,\mu} [\delta_{\nu l} (1 - \bar{n}_\nu) (1 - \bar{n}_\mu) + 2 \delta_{\nu\mu} A_l^\dagger A_\nu] \tag{B.3}
\end{aligned}$$

et :

$$\begin{aligned}
[A_\nu, [H, A_\mu]] &= - \sum_{l>0} H_4^{l,\mu} \left[(1 - \bar{n}_\nu) (1 - \bar{n}_\mu) \delta_{\nu l} - 2 \delta_{\nu\mu} A_l^\dagger A_\nu \right. \\
&\quad \left. + (1 - \bar{n}_\mu) (1 - \bar{n}_\nu) \delta_{\nu l} - 2 \delta_{\nu\mu} A_\nu A_l^\dagger \right] \\
&\quad - 2 \sum_{l>0} H_{31}^{\mu,l} [(1 - \bar{n}_\mu) A_\nu \delta_{\nu l} - A_\nu \bar{n}_l \delta_{\nu\mu}] - 2 \sum_{l>0} H_{31}^{l,\mu} (1 - \bar{n}_\nu) \delta_{\nu l} \\
&\quad - 2 \sum_{l>0} H_{22}^{l,\nu} \delta_{\nu\mu} A_\nu A_l - 4 \dot{H}_{22}^{l,\mu} (A_\mu A_\nu + A_\nu A_\mu) \tag{B.4}
\end{aligned}$$

on obtient finalement pour les éléments de matrices $\mathcal{A}_{\nu\mu}$ et $\mathcal{B}_{\nu\mu}$:

$$\begin{aligned}
\mathcal{A}_{\nu\mu} &= \langle BCS | [A_\nu, [H, A_\mu^\dagger]] | BCS \rangle \\
&= 2 \left(E_\nu + 2 \dot{H}_{22}^{\nu,\nu} \right) \delta_{\nu\mu} + H_{22}^{\nu,\mu} \tag{B.5}
\end{aligned}$$

$$= 2 \left(E_\nu - 2 G u_\nu^2 v_\nu^2 \right) \delta_{\nu\mu} - G \left(u_\nu^2 u_\mu^2 + v_\nu^2 v_\mu^2 \right)$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{B}_{\nu\mu} &= - \langle BCS | [A_\nu, [H, A_\mu]] | BCS \rangle \\
&= 2 H_4^{\nu,\mu} - 2 H_4^{\nu,\nu} \tag{B.6}
\end{aligned}$$

$$= G \left(u_\nu^2 v_\mu^2 + v_\nu^2 u_\mu^2 \right) - 2 G u_\nu^2 v_\nu^2 \delta_{\nu\mu}$$

Bibliographie

- [1] P. Ring and P. Schuck, “*The nuclear many body problem*” (Springer-Verlag, New York, 1980)
- [2] D.J. Rowe, “*Nuclear collective motion*” (Methuen, London, 1970)
- [3] S.G. Nilsson, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selesk. **29** (1955) 16.
- [4] R.D. Woods and D.S. Saxon, Phys. Rev. **95** (1954) 577
- [5] A. Bohr, B.R. Mottelson and D. Pines, Phys. Rev. **110** (1958) 936.
- [6] S.T. Belyaev, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selesk. **31** (1959) 11.
- [7] J. Bardeen, L.N. Cooper and J.R. Schreiffer, Phys. Rev. **108** (1957) 1175.
- [8] N.N. Bogoliubov, Nuovo Cimento **7** (1958) 794.
- [9] J.G. Valatin, Nuovo Cimento **7** (1958) 843.
- [10] N.Benhamouda, Thèse de Magister, (U.S.T.H.B 1999)
- [11] A. M. Lane, “*Nuclear Theory*” (Benjamin, New York,1964).
- [12] H.J. Lipkin,Ann.Phys. **31**(1960)203
- [13] Y. Nogami, Phys. Rev. **B 134** (1964) 313.
- [14] Y. Nogami and I.J. Zucker, Nucl. Phys. **60** (1964) 203
- [15] Y. Nogami, Phys.Lett. **15** (1965) 335
- [16] J.F. Goodfellow and Y.Nogami, Can. J. Phys. **44** (1966) 1321
- [17] A. Kamlah, Z. Phys, **216** (1968) 52
- [18] K. Dietrich, H.J. Mang and J.H. Pradal, Phys. Rev. **135**, B22 (1964).
- [19] H.C. Pradhan, Y. Nogami, and J. Law, Nucl. Phys. **A201** (1973) 357.
- [20] P. Quentin, N. Redon, J.Meyer,M. Meyer, Phys. Rev. **C 41** (1990) 41.
- [21] P. Magierski, S Cwiok, J. Dobaczewski and W. Nazarewicz,Phys. Rev. **C48**, 1686 (1993).

- [22] B. Gall, P. Bonche, J. Dobaczewski, H. Flocard and P.H. Heenen, Z. Phys, **A348** (1993) 183
- [23] A. Valor, J.L. Egido and L.M. Robeldo, Phys. Rev. **C53** (1996) 172.
- [24] W. Satula, R. Wyss and P. Magierski, Nucl. Phys. **A578** (1994) 45.
- [25] D. Böhm and D. Pines, Phys. Rev. **92** (1953) 609.
- [26] M. Baranger, Phys. Rev. **120** (1960) 957.
- [27] J. Sawiki, Nucl. Phys. **126** (1962) 2231.
- [28] D.J. Thouless, Nucl. Phys. **22** (1961) 78.
- [29] R.A. Ferrell, Phys. Rev. **107** (1957) 631.
- [30] C. Volpe, *Ecole d'été de physique nucléaire Joliot-Curie*, IN2P3, 2000.
- [31] M. Fellah, T.F.H. Hammann and D.E. Medjadi, Phys. Rev. **C8** (1973) 1585.
- [32] M. Fellah and T.F.H. Hammann, Phys. Rev. **C10** (1974) 284.
- [33] M. Fellah and T.F.H. Hammann, J. Phys, (Paris) **36** (1975) 461.
- [34] M. Fellah and T.F.H. Hammann, Nuovo Cimento **30A** (1975) 239.
- [35] N.H. Allal and M. Fellah, Phys. Rev. **C48** (1991) 2648.
- [36] M.R. Oudih, Thèse de Magister, (U.S.T.H.B 1999)
- [37] M. Fellah, N.H. Allal, M.R. Oudih and N. Benhamouda, Alg. Rev. Nucl. Sci. **2** (1998) 59.
- [38] N. Benhamouda, M.R. Oudih, N.H. Allal and M. Fellah, Nucl. Phys. **A690** (2001) 219.
- [39] M.R. Oudih, M. Fellah and N.H. Allal, Int. J. Mod. Phys. E **12**, 109 (2003).
- [40] V.N. Fomenko, J. Phys. **A3** (1970) 8.
- [41] J. Högaasen-Feldman, Nucl. Phys. **A28** (1961) 258
- [42] D.C. Zheng, W.L. Sprung and H. Flocard, Phys. Rev. **C46** (1992) 1355.
- [43] J. Dobaczewski and W. Nazarewicz, Phys. Rev. **C47** (1993) 2418.
- [44] O. Civitarese and M. Reboiro, Phys. Rev. C **57**, (1998) 3062.
- [45] E.J.V. de Passos, A.F.R. de Toledo Piza, F. Krmpotic, Phys. Rev. **C58**, (1998) 1841.
- [46] K. Hagino and G.F. Bertsch, Phys. Rev. C **57**, (2000) 3062
- [47] K. Hagino and G.F. Bertsch, Nucl. Phys. **A679** (2000) 163.

- [48] M. Sambataro and N. Dinh Dang, Phys. Rev. C **59**, (1999) 1422.
- [49] N. Dinh Dang, Eur. Phys. **A16** (2002) 181.
- [50] M. Rho and J.O. Rasmussen, Phys. Rev. B **135**, (1964) 1295
- [51] D.J. Rowe, Phys. Rev.**175** (1968) 1283; Rev. Mod. Phys. 40 (1968) 153; Nucl. Phys. **A107** (1968) 99; J.C. Parikh and D.J. Rowe, Phys. Rev.**175** (1968) 1293.
- [52] F. Catara, N. Dinh Dang, M. Sambataro, Nucl. Phys. **A579** (1994) 1.
- [53] A. Rabhi, R. Bennaceur, G. Chanfry and P. Schuck, Phys. Rev. **C66** (2002) 064315.
- [54] R.W. Richardson and N. Sherman, Nucl. Phys. **52** (1964) 221.
- [55] R.W. Richardson, J. Math. Phys. 18(1977)1802
- [56] M. Hasegawa and F.S. Tasaki, **C35** (1987) 1508.
- [57] P. Schuck and S. Ethofer, Nucl. Phys. **A212** (1973) 269.
- [58] J. Dukelsky, G. Röpke and P. Schuck, Nucl. Phys. **A628** (1998) 17.