

- Thèse présentée pour obtenir le grade de
- Docteur de l'Université de Strasbourg

# Thèse

# Thèse

Discipline : Physique Nucléaire  
par Bounseng BOUNTHONG

## Calculs microscopiques pour les noyaux exotiques de masse moyenne et lourde

Soutenue publiquement le 27 juin 2016 ■

### Membres du jury ■

**M NOWACKI Frédéric**, Directeur de Recherches, IPHC Strasbourg

**M BENDER Michael**, Directeur de Recherches, IPN Lyon

**Mme SMIRNOVA Nadezda**, Maître de conférences, CENBG - Université de Bordeaux

**M GALL Benoît**, Professeur, IPHC - Université de Strasbourg

**M RODRIGUEZ-FRUTOS Tomas**, Maître de conférences, Université de Madrid

**M. CAURIER Etienne**, Directeur de Recherches, IPHC Strasbourg

**Directeur**

**Rapporteur**

**Rapporteur**

**Président**

**Examineur**

**Examineur**



UNIVERSITÉ DE STRASBOURG

THESE

*Spécialité : Physique Nucléaire Théorique*

*présentée*

*par*

**Bounseng BOUNTHONG**

**CALCULS MICROSCOPIQUES POUR LES  
NOYAUX EXOTIQUES DE MASSE MOYENNE ET  
LOURDE**

*Soutenue le 27 juin 2016 devant la commission d'examen*

MM.	F. Nowacki	Directeur de Thèse
	M. Bender	Rapporteur externe
	N. Smirnova	Rapporteur externe
	B. Gall	Examineur
	T. Rodriguez	Examineur
	E. Caurier	Examineur



# Remerciements

Je voudrais tout d'abord remercier mon directeur de thèse Frédéric NOWACKI pour m'avoir soutenu, m'avoir procuré les meilleures conditions de travail et m'avoir donné nombreux conseils qui m'ont beaucoup aidés, je lui en suis très reconnaissant.

Je remercie particulièrement Etienne CAURIER, pour m'avoir donné de nombreux conseils et de nombreuses discussions dont j'ai beaucoup profité.

Je remercie également à Tomás Raúl RODRÍGUEZ FRUTOS pour toutes les suggestions qui m'ont été très utiles.

Je remercie les personnes qui ont accepté de faire partie de membre de mon jury : les rapporteurs externes, Monsieur Michael BENDER et Madame Nadezda SMIRNOVA, les examinateurs Messieurs Benoit GALL, Tomás Raúl RODRÍGUEZ FRUTOS et Etienne CAURIER.

Je remercie les personnes autour de moi à l'IPHC pour m'avoir donné beaucoup d'encouragements et plusieurs discussions depuis début de ma préparation de thèse, J. BARTEL, K. SIEJA et H. NAIDJA.

Je remercie finalement le responsable et tous les membres de laboratoire IPHC pour l'accueil et l'accompagnement tout au long de ma préparation de thèse. J'espère sincèrement avoir l'occasion de travailler dans le futur au sein d'une collaboration entre la France-IPHC et le Laos.



# Table des matières

<b>1</b>	<b>Introduction</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Le modèle en couches</b>	<b>9</b>
2.1	Représentation en schéma-m . . . . .	12
2.2	Modèle en couches et interactions réalistes . . . . .	13
<b>3</b>	<b>Le champ moyen déformé dans la base du modèle en couches</b>	<b>19</b>
3.1	Hamiltonien nucléaire . . . . .	21
3.2	Equations Hartree-Fock . . . . .	22
3.3	Hamiltonien à un corps de type Nilsson déformé . . . . .	25
3.4	Déformation nucléaire . . . . .	26
3.5	Les symétries des solutions Hartree-Fock . . . . .	29
3.6	Solution Hartree-Fock . . . . .	31
<b>4</b>	<b>Calculs sous contraintes</b>	<b>35</b>
4.1	Contrainte linéaire . . . . .	37
4.2	Contrainte quadratique . . . . .	38
4.3	Méthode lagrangien augmenté . . . . .	39
4.4	Accélération de la convergence . . . . .	41
4.5	Surface d'énergie potentielle des noyaux $N = Z$ : $^{72}\text{Kr}$ , $^{76}\text{Sr}$ et $^{80}\text{Zr}$ . . . . .	43
4.6	Déformation pour les noyaux riches en neutrons en $N = 46, 48, 50$ . . . . .	47
4.7	Structure des états de basse excitation du noyau $^{140}\text{Sm}$ . . . . .	54
4.8	Collectivité et triaxilité dans $^{42}\text{Ca}$ . . . . .	57

<b>5</b>	<b>Restauration du moment angulaire total</b>	<b>61</b>
5.1	Opérateurs de projection et éléments de matrice . . . . .	63
5.2	Réduction d'intervale des intégrations . . . . .	66
5.3	Restauration du moment angulaire dans le cas axial . . . . .	67
5.4	Opérateurs de transitions électromagnétiques . . . . .	67
5.5	Applications . . . . .	68
5.5.1	Spectres des noyaux déformés axiaux de la couche <i>sd</i> . . . . .	68
5.5.2	Bande rotationnelle du $^{20}\text{Ne}$ . . . . .	70
5.5.3	Bande rotationnelle du $^{74}\text{Cr}$ . . . . .	72
5.5.4	Spectres rotationnels de $^{76}\text{Sr}$ et $^{80}\text{Zr}$ . . . . .	74
5.5.5	Application dans la région de terres rares . . . . .	75
5.5.6	Application dans la région des noyaux superlourdes . . . . .	80
5.6	Restauration du moment angulaire dans le cas triaxial . . . . .	88
<b>6</b>	<b>Méthodes des coordonnées génératrices</b>	<b>89</b>
6.1	Formalisme . . . . .	91
6.2	Restauration du moment angulaire total et mélanges des configurations	93
6.3	Applications . . . . .	95
6.3.1	Application au cas du $^{28}\text{Si}$ dans la couche <i>sd</i> . . . . .	95
6.3.2	Bande rotationnelle du $^{48}\text{Cr}$ et $^{50}\text{Cr}$ . . . . .	95
<b>7</b>	<b>Conclusion</b>	<b>101</b>
<b>A</b>	<b>Moments multipolaires et opérateurs de Rotations</b>	<b>105</b>
A.1	Les éléments de matrice des opérateurs multipolaires . . . . .	105
A.2	Matrice de rotation . . . . .	106
A.3	Coefficients de Clebsch-Gordan . . . . .	107
<b>B</b>	<b>La seconde quantification</b>	<b>109</b>
B.1	Les opérateurs de création et d'annihilation . . . . .	109
B.2	Relation d'anticommutation . . . . .	109
B.3	Produits normaux, Contraction et Théorème de Wick . . . . .	110



<u>Table des matières</u>	v
Bibliographie	113
Table des figures	123
Liste des tableaux	127



# Chapitre 1

## Introduction



Parmi les intérêts de la physique nucléaire actuelle, l'étude des noyaux loin de la stabilité représente l'un des domaines les plus attrayants : l'étude de nouveaux isotopes permet d'accroître notre compréhension de la structure nucléaire et de préciser les modèles.

Du côté des noyaux à fort excès de neutrons apparaissent de phénomènes non connus près de la vallée de stabilité tels que les noyaux à halos, la disparition éventuelle de fermetures de couches, la modification de l'interaction spin-orbite. L'observation de noyaux très exotiques a un intérêt pour la compréhension des processus astrophysiques lors de la nucléosynthèse : processus r du côté de la drip line neutron, processus rp du côté de la drip line proton.

La dernière décennie a vu également un intérêt croissant se porter sur l'étude des décroissances double-beta ( $\beta\beta$ ). Le processus avec émission finale de neutrinos ( $\beta\beta$ ) $_{2\nu}$  est permis par le modèle standard des interactions faibles et fortes. Il a déjà été observé et c'est un test sévère des fonctions d'onde nucléaires. Le processus sans émission finale de neutrinos ( $\beta\beta$ ) $_{0\nu}$  serait un moyen d'atteindre, sans passer par les accélérateurs de haute énergie, la physique au-delà du modèle standard. Il serait la signature du caractère de Majorana du neutrino prédit par les modèles de Grande Unification (GUM) ou la SuperSymétrie (SUSY).

Parmi les modèles utilisés pour décrire ces phénomènes, le modèle en couches occupe une place de choix, car il est capable en principe de décrire simultanément toutes les propriétés spectroscopiques les plus variées d'une région de masse donnée. Malheureusement, le modèle en couches se heurte à deux difficultés majeures :

- la croissance exponentielle des dimensions avec le nombre de particules fait que les

applications ont d'abord essentiellement été appliquées aux régions de noyaux légers ou proches de couches fermées,

- les catastrophes lors d'emploi d'interactions réalistes (non description des transitions sphéricité/déformation par exemple).

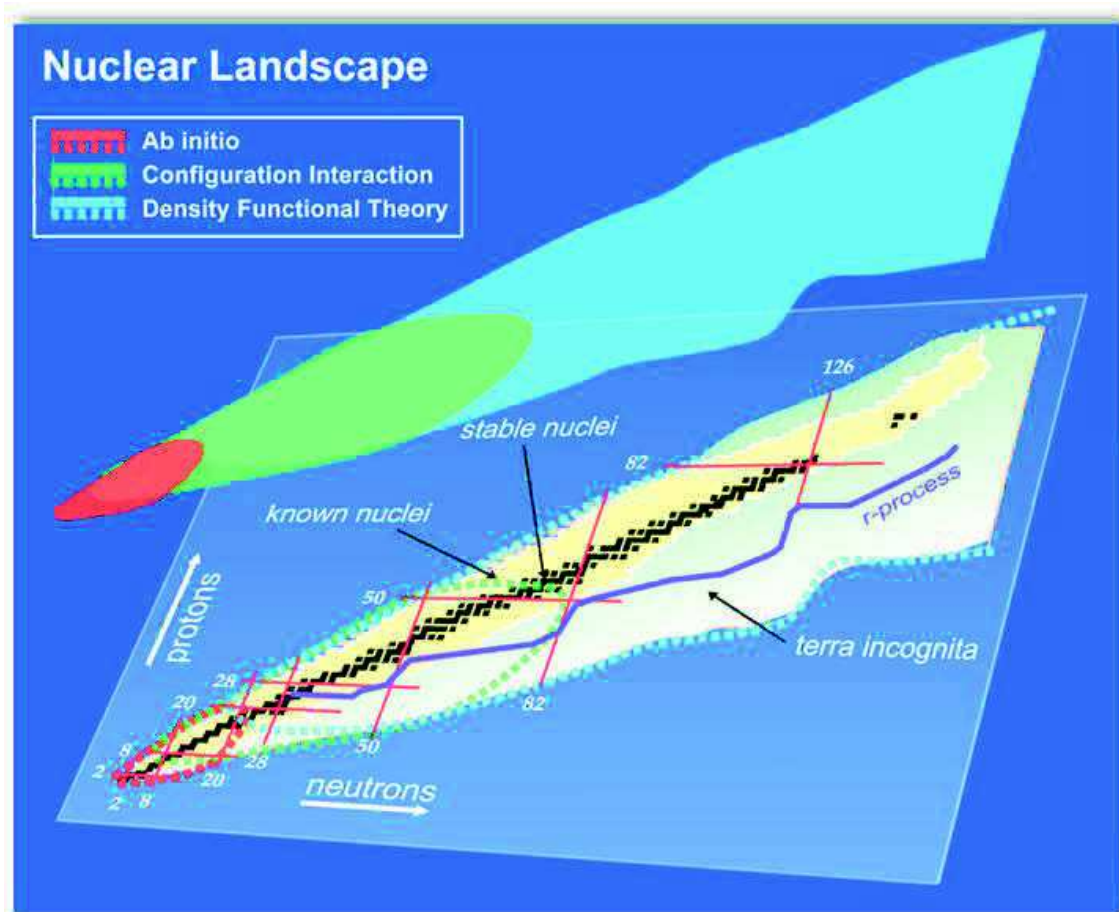


FIGURE 1.1 – Méthodes théoriques pour le problème à N corps nucléaire à travers la charte des noyaux. Ce schéma est tiré de la référence [1].

La limitations principale du modèle en couches étant la croissance exponentielle des matrices avec le nombre de particules, si l'on veut aller plus loin (plus loin signifie vers des noyaux plus lourds donc dans des espace de valence plus grands et avec un plus grand nombre de particules de valence), la seule façon de pouvoir aborder le problème

---

est évidemment d'utiliser des outils techniques alternatifs aux diagonalisations exactes.

L'objectif de cette thèse est de présenter l'apport des techniques (bien connues) des méthodes de champ moyen employées dans la base du modèle en couche tout en bénéficiant de l'expertise, notamment développée à Strasbourg concernant les contraintes phénoménologiques à incorporer aux interactions réalistes pour développer des interactions effectives fiables et utilisables dans ce genre de calculs. Ce genre d'approche n'est pas nouveau, et des versions récentes ont été récemment développées par Tokyo, au sein du groupe de T. Otsuka [2], à Tübingen au sein du groupe de A. Faessler avec les approches VAMPIR et extended VAMPIR par exemple [3, 4, 5]. Des calculs axiaux dans la base du modèles en couches pour la couche  $fp$  ont également été récemment conduits dans le groupe de M. Horoi [6]. Notre objectif premier est donc de se doter de cet outil efficace et complémentaire aux diagonalisations exactes.

Le chapitre 2 traite de la problématique des calculs de type champ moyen de type Hartree-Fock déformé dans la base du modèle en couche. Nous avons d'abord calculé et diagonalisé les opérateurs les plus généraux  $\hat{Q}_{\lambda\mu}$  avec  $(\lambda\mu) = (20), (22)$  quadrupolaires, puis en rajoutant les opérateurs (30) et (32) ou (31) et (33) octupolaires. Ces états de Nilsson sont ensuite utilisés comme états initiaux pour le programme de minimisation de l'énergie totale du système par la résolution des équations Hartree-Fock. Nous avons finalisé la mise au point de ce programme par comparaison des résultats avec les solutions de problèmes solubles analytiquement comme ceux d'un hamiltonien  $SU(3)$  ou par comparaison avec des diagonalisations exactes du modèle en couche. Ensuite, nous avons mis au point des procédures pour l'obtention de ces mêmes calculs avec contraintes pour une description complète de la surface d'énergie potentielle d'un noyau donné en fonction des degrés de liberté  $Q_{20}$  et  $Q_{22}$  (ou en fonction des paramètres de déformations  $\beta$  et  $\gamma$ ).

Au cours du chapitre 3, nous avons ensuite introduit des calculs sous contraintes de manière à obtenir une description complète de la surface d'énergie potentielle d'un noyau donné en fonction des degrés de liberté quadrupolaires (ou  $\beta, \gamma$ ). Divers types de contraintes ont été utilisés (linéaire, quadratique) ainsi que la méthode lagrangienne augmentée qui s'est avérée la plus efficace en particulier face aux instabilités numériques engendrées par la dégénérescence des niveaux à l'approximation Hartree-Fock.

Un certain nombre d'applications sont présentées, tout d'abord pour des noyaux de la couche (*sd*) dont la structure est bien connue et où les calculs Modèle en Couches sont réalisables. Les premières applications ont porté sur les noyaux exotiques à  $N=50$  autour du  $^{78}\text{Ni}$ . Les surfaces d'énergie potentielle des noyaux  $^{78}\text{Ni}$ ,  $^{76}\text{Fe}$  et  $^{74}\text{Cr}$  prédisent une coexistence sphérique/déformé  $^{78}\text{Ni}$  puis la disparition de la fermeture  $N=50$  et une transition vers un nouvel îlot de déformation pour  $^{76}\text{Fe}$  et  $^{74}\text{Cr}$ . Une seconde application a concerné la description des noyaux déformés le long de la ligne  $N=Z$  dans la région de masse  $A \sim 80$ . Là encore les surfaces d'énergie potentielle ont été calculées pour les noyaux  $^{72}\text{Kr}$ ,  $^{76}\text{Sr}$  et  $^{80}\text{Zr}$ . Les minima obtenus mettent en évidence la présence de structure très déformées de type Nparticules-Ntrous :  $4p4t$  pour  $^{72}\text{Kr}$ , ainsi que  $8p8t$  pour  $^{76}\text{Sr}$  et jusqu'à  $12p12t$  pour  $^{80}\text{Zr}$ . En faisant l'hypothèse d'un mouvement rotationnel, les moments quadrupolaires calculés ont permis d'extraire des intensités de transitions électromagnétiques  $B(E2)$  tout à fait compatibles avec les données expérimentales, démontrant la pertinence des ces calculs pour la description des systèmes très déformés. Enfin, deux études, en complément de calculs modèle en couche, ont permis d'interpréter dans  $^{42}\text{Ca}$ ,  $^{140}\text{Sm}$  de récentes données expérimentales notamment en termes de degré de liberté triaxial [7, 8].

Les deux chapitres suivants ont concerné la projection sur le moment angulaire des états de Nilsson ou Hartree-Fock déformés d'une part, ainsi que le problème délicat du mélange de déterminants de Slater non orthogonaux d'autre part.

Le chapitre 4 est consacré à la restauration du moment angulaire des déterminants de Slater déformés obtenus aux chapitres précédents. Nous avons tout d'abord procédé au cas le plus simple des états déformés à symétrie axiale où seule la rotation sur un seul angle intervient. Ensuite le cas le plus général concernant les systèmes triaxiaux où les rotations selon les trois angles d'Euler interviennent, ont été traités.

Dans le dernier chapitre, nous abordons le mélange de déterminants de Slater non orthogonaux par la méthode des coordonnées génératrices (GCM). Il s'agit ici d'approximer l'état collectif par une superposition de déterminants de Slater non-orthogonaux, pour pouvoir mélanger différents types de solutions Hartree-Fock déformées. Enfin, l'étape finale a consisté à obtenir les états de basse énergie en mélangeant par mini-



misation quelques états déformés projetés. La première application à des systèmes de masse moyenne déformés concerne la région des terres rares. A partir d'un coeur de  $^{132}\text{Sn}$ , nous avons pu décrire les spectres rotationnels pour les isotopes de Nd, Sm, Gd et Dy. Dans un second temps, nous nous sommes intéressés à la spectroscopie des noyaux superlours autour de  $N=152$ . A partir d'un coeur de  $^{208}\text{Pb}$  cette fois ci, nous décrivons les bandes rotationnelles  $^{252}\text{No}$  et  $^{256}\text{Rf}$ . Avec cette même interaction effective, décrivant à la fois les noyaux semi-magiques  $N=126$  et déformés  $N=152$ , nous prédisons la double magicité du noyau  $Z=114$ ,  $N=184$ . Ces résultats inédits et inaccessibles aux calculs de diagonalisations classiques ouvrent des perspectives quant à l'utilisation de ces outils très prometteurs.



## Chapitre 2

### Le modèle en couches



Le modèle en couches est fondé sur l'approximation que les propriétés fondamentales des états de basse excitation dans le noyau sont données par le comportement de quelques nucléons de valence occupant des orbitales de valence situées au dessus d'un coeur inerte et étant soumis au champ central moyen créé par l'ensemble des nucléons.

A partir de l'équation de Schrödinger à  $\mathcal{N}$  corps dans l'espace de Hilbert complet,

$$H\Psi(r(1), \dots, r(A)) = E \cdot \Psi(r(1), \dots, r(A))$$

où  $H$  est l'hamiltonien du système, décomposé en :

$$H = \sum_k T(k) + \sum_{k < l} W(k, l)$$

$T(k)$  étant le terme d'énergie cinétique,  $W(k, l)$  étant l'interaction nucléon-nucléon, on introduit un potentiel moyen à un corps permettant de réécrire :

$$H = \sum_k (T(k) + U(k)) + \left( \sum_{k < l} W(k, l) - \sum_k U(k) \right) = H^{(0)} + H^{(1)}$$

En général, on emploie un potentiel de forme simple comme approximation de  $U$ , un potentiel d'oscillateur harmonique ou un potentiel de Woods-Saxon. On est donc ramené au problème de la diagonalisation de l'interaction résiduelle  $H^{(1)}$  dans l'espace des fonctions d'ondes non perturbées données par  $H^{(0)}$ .

Le succès du champ moyen et du modèle à particules indépendantes associé montre que l'interaction nucléon-nucléon NN peut être régularisée dans la noyau. Néanmoins, le traitement et la résolution de ce problème dans l'espace de Hilbert complet n'est pas possible. Il est alors nécessaire de rechercher une approximation à la résolution exacte. Dans le cadre du modèle en couches, nous allons scinder l'espace de Hilbert complet en trois parties (figure 2.1) :

- un coeur inerte où les orbitales seront toujours occupées
- un espace de valence composé des orbitales contenant les degrés de liberté nécessaire à la description des phénomènes d'intérêts
- un espace externe où les orbitales seront toujours inoccupées

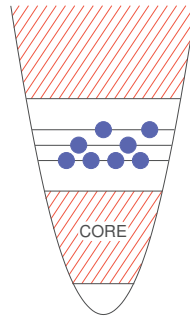


FIGURE 2.1 – Espace de Hilbert schématique

## 2.1 Représentation en schéma-m

En ce qui concerne la base dans laquelle sont écrites les fonctions d'ondes, on a généralement le choix entre deux alternatives.

La première dite représentation en schéma m comprend tous les Déterminants de Slater (SD) relatifs à A particules distribuées dans p orbitales individuelles  $|nljm\tau\rangle$ . Toutes les symétries de rotation sont ignorées et les seuls nombres quantiques conservés sont la parité, la projection du moment angulaire  $J_z$  et la projection de l'isospin  $T_z$ .

$$\Phi_{a_1 \dots a_A}(1, \dots, A) = \det\{\phi_{a_k}(r(k))\} = \prod_k a_{a_k}^+ |0\rangle$$

où  $\phi_{a_k}$  est la fonction d'onde individuelle de la particule  $k$  dans l'orbite  $a_k$ . L'avantage de cette représentation est sa grande simplicité, puisque les éléments de matrice à  $\mathcal{N}$  corps seront égaux à une phase près aux éléments de matrice à 2 corps découplés.

En revanche, les matrices générées ont une taille maximale puisque tous les états possibles sont inclus dans la base et les dimensions sont proportionnelles à la combinatoire de  $z$  protons distribués dans  $D_\pi$  orbitales et de  $n$  neutrons distribués dans  $D_\nu$  orbitales,

$$Dim \propto \binom{D_\pi}{z} \times \binom{D_\nu}{n}.$$

Ce dernier point explique la relative désaffection de ce modèle qui ne pouvait être utilisé que pour les noyaux proches des doublement magiques ou légers. Notons à ce propos que ces derniers sont précisément ceux pour lesquels le SM semble le moins valide, le champ moyen  $y$  étant moins bien établi.

Ce problème avait été abordé en 1989 avec le code ANTOINE [9, 10] en répondant aux vœux exprimés par Brown et Wildenthal (Annual Review of Nuclear and Particle Science Vol.38 (1988))

*"It is important to push maximum dimensions up to about **another order of magnitude**, to about 50.000 in the JT scheme or about 1.000.000 in the m-scheme".*

L'objectif fut largement dépassé au sein de la collaboration Strasbourg-Madrid et les diagonalisations de matrice de dimension  $10^9$  sont maintenant devenues banales, sans moyen informatique exceptionnel (station de travail ou PC).

La dimension des matrices nécessite une méthode de diagonalisation de type itératif comme Lanczos. La principale limitation rencontrée avec cette méthode réside non pas dans le calcul lui-même mais dans la manipulation (stockage sur disque) des vecteurs de Lanczos.

## 2.2 Modèle en couches et interactions réalistes

Avant d'entreprendre tout calcul de modèle en couches, il est nécessaire de définir un espace de travail. Généralement, celui-ci consiste en une couche majeure d'oscillateur

harmonique (dit espace  $0\hbar\omega$ ), dans la mesure où le nombre de configurations et donc les dimensions des matrices abordées doivent rester traitables.

Une restriction de l'espace de Hilbert à un espace modèle est donc inévitable et par conséquent, l'emploi d'interactions et d'opérateurs effectifs s'avère crucial ; de l'équation de Schrödinger dans l'espace total, on se ramène au problème suivant :

$$H\Psi = E\Psi \longrightarrow H_{eff}\Psi_{eff} = E\Psi_{eff}.$$

Deux alternatives sont possibles dans le choix d'une interaction effective. La première est l'emploi d'une interaction phénoménologique. Dans la couche ( $2s1d$ ) où les dimensions restent raisonnables, il est possible de déterminer les 63 éléments de matrice par fit sur des données expérimentales (niveaux d'énergies, transitions électromagnétiques) de toute la couche [14]. Il s'agit de minimiser par une procédure itérative de moindres carrés, l'écart entre les spectres calculés et les spectres expérimentaux. Le principe d'une telle procédure sera donné au paragraphe 2. Cependant, dans des espaces plus grands, cette procédure s'avère impossible. On peut alors choisir une interaction schématique dépendant de paramètres qui sont déterminés par ajustement phénoménologique sur un grand nombre de noyaux. On peut citer comme interaction de ce type, celle de Brown-Richter [15] dans la couche ( $1f2p$ ). La seconde alternative est l'emploi d'interactions réalistes, c'est-à-dire calculées à partir de potentiels qui reproduisent les déphasages lors de la diffusion nucléon-nucléon dans une fenêtre en énergie variant de 0 à 300 MeV.

Une telle description microscopique de noyaux se trouve confrontée à deux problèmes principaux qui sont la connaissance de l'interaction entre deux nucléons et la complexité des calculs numérique engendrés par le problème à  $\mathcal{N}$  corps, due notamment à la présence d'un coeur très répulsif.

La détermination du potentiel d'interaction entre deux nucléons a donné lieu à de nombreux travaux depuis les années 30, mais jusqu'à présent, il n'existe pas de méthode capable de déduire une telle force à partir de la chromodynamique quantique et des constituants des nucléons. Les expériences de diffusion N-N et les propriétés du deutéron ne fournissent qu'une partie des éléments de matrice de l'interaction nucléaire, ceux à deux corps entre des états de nucléons particuliers.

L'interaction N-N est bien connue à longue portée ( $r > 2fm$ ) où elle est représentée



par l'échange d'un pion (O.P.E.P.) et à moyenne portée ( $1fm < r < 2fm$ ) où elle est représentée par l'échange de deux pions et d'un méson  $\omega$ .

La répulsion à courte distance ( $r < 0.8fm$ ), en particulier, est due à un ensemble de phénomènes complexes (échanges multiples de pions et de mésons lourds, interactions entre mésons, résonances méson-nucléon dans les états intermédiaires ...) qu'il n'est pas possible d'inclure explicitement et qui sont simulés empiriquement. Même pour des formes modernes de potentiels comme Paris [16], Bonn [17] ou Argonne [18] des ajustements phénoménologiques sont également nécessaires pour les composantes à longue et moyenne portée de la force : les constantes de couplage méson-méson et/ou les masses des mésons doivent être prises à des valeurs différentes de celles expérimentalement connues.

Le coeur dur très répulsif des interactions réalistes conduit à des éléments de matrice très grands voire infinis. La technique de la matrice G de Brückner [19, 20] permet de s'affranchir de la partie très répulsive à courte portée et décrit la diffusion de deux nucléons libres dans la matière nucléaire infinie. Par définition, elle donne l'amplitude de transition entre les états de deux nucléons se propageant indépendamment l'un de l'autre dans le noyau avant et après collision. Ses éléments de matrice sont donc définis comme des états à deux nucléons indépendants à l'intérieur du noyau et représente donc une interaction effective pour des nucléons dans des états indépendants. L'ordre de grandeur des éléments de matrice G et de l'interaction effective qu'elle définit est raisonnable, et même relativement petit contrairement à celui de l'interaction N-N nue initiale : en effet, grâce au principe d'exclusion de Pauli, les collisions N-N à l'intérieur du noyau sont peu probables et pour une collision donnée, beaucoup des états finaux ne sont pas disponibles car ils sont occupés par les autres nucléons.

Enfin, les approches les plus récentes construisent des potentiels basés sur la théorie effective des champs. Les termes du langrangien chiral sont classés grâce au terme  $\left(\frac{Q}{\Lambda_\chi}\right)^\nu$  avec  $Q \sim m_\pi$  ( $140 MeV$ ),  $\Lambda_\chi \sim 700 MeV$ ,  $\nu$  est l'ordre chiral "power counting". Dans ce contexte, la hiérarchie des forces nucléaires apparaît naturellement avec non seulement des interactions nucléon-nucléon mais aussi des forces à trois corps, quatre corps etc ... en fonction de l'ordre de développement en perturbation [93, 94]. le paramètre  $\Lambda_\chi$  est un paramètre de coupure et correspond à l'énergie maximale du potentiel, permettant

de s'affranchir de la répulsion à courte portée.

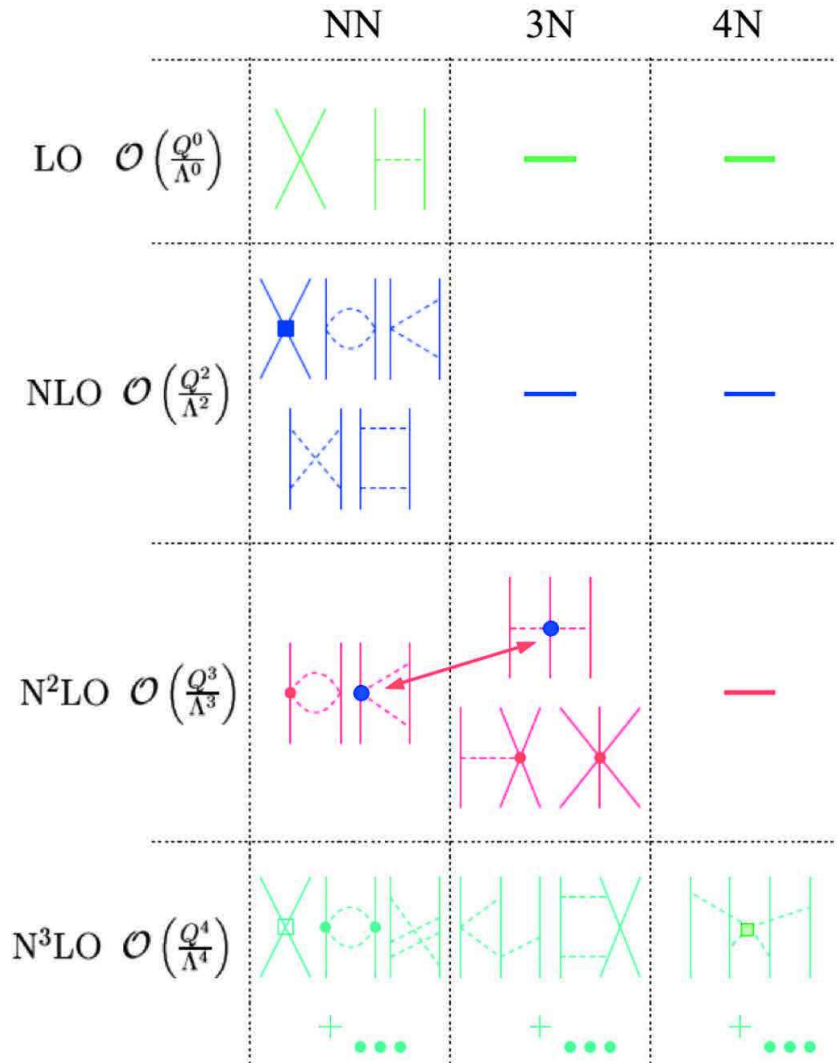


FIGURE 2.2 – Hiérarchie des forces nucléaires dans la théorie de perturbation chirale, classées selon l'ordre chiral  $\nu$  et le développement en fonction de  $\left(\frac{Q}{\Lambda_x}\right)^\nu$  [21].

Cependant, les forces réalistes ainsi construites reproduisent mal les propriétés de

saturation de la matière nucléaire c'est-à-dire qu'elles n'offrent pas une description simultanée des rayons et des énergies de liaison des noyaux. On peut tenter d'expliquer ceci simplement en remarquant que la distance moyenne entre nucléons dans le noyaux est de l'ordre de 2.4 fm et relève donc de la partie à moyenne et longue portée de l'interaction qui est certainement la mieux comprise et la mieux décrite. Cependant, la partie à courte portée contient les termes répulsifs nécessaires au principe de Pauli et aux propriétés de saturation.

Leur comportement spectroscopique se dégrade également au fur et à mesure que le nombre de particules de valence augmente.

Il a été démontré récemment [22, 23] qu'il est possible de séparer strictement l'hamiltonien nucléaire, en

- une partie monopolaire  $\mathcal{H}_m$ , uniquement sensible aux variations Hartree-fock, et responsable des propriétés de saturation et de comportement des énergies individuelles,
- une partie multipolaire  $\mathcal{H}_M$ , responsable des corrélations et de la spectroscopie détaillée.

La partie multipolaire s'avère être de bonne qualité et en fait semblable d'une interaction réaliste à une autre [22], et indépendante de la procédure de régularisation (matrice  $G$ ,  $V_{lowk}$  ...) et c'est également le cas des potentiels chiraux [24]. Les progrès actuels dans la description de la structure nucléaire à partir de premiers principes (description dite « ab-initio ») amènent à penser que les corrections phénoménologiques introduites sur la partie monopolaire des interactions réalistes proviennent des forces à trois corps qui n'avaient pas incorporées jusqu'à présent [25, 26, 27]. L'ensemble des interactions effectives utilisées dans ce travail est basé sur des interactions réalistes (matrice  $G$  ou  $V_{lowk}$ ) avec contraintes phénoménologiques sur les noyaux à couche fermée plus ou moins une particule.



## Chapitre 3

### Le champ moyen déformé dans la base du modèle en couches



### 3.1 Hamiltonien nucléaire

La description exacte d'un noyau comportant  $A$  nucléons est impossible pour  $A$  grand. Une méthode alternative à la description exacte est l'approximation du champ moyen de type Hartree-Fock déformé. L'approximation du champ moyen consiste à considérer chaque nucléon du noyau comme une particule indépendante soumise au potentiel créé par l'ensemble des nucléons eux-mêmes. Elle permet de transformer le problème à  $A$  corps en  $A$  problèmes à un corps, dont la résolution est plus aisée. En utilisant d'un potentiel moyen déformé de type Nilsson, l'approche Hartree-Fock déformée réduit le champ moyen à partir d'une interaction nucléons-nucléons effective. L'Hamiltonien nucléaire du système à  $A$  nucléons se définit par la formule générale :

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^A t_i + \frac{1}{2} \sum_{i<j}^A v_{ij} \quad (3.1)$$

où  $t_i$  et  $v_{ij}$  sont l'énergie cinétique et les interactions nucléon-nucléon à deux corps de particule  $i$  et  $j$ . On ne considère ici que des interactions à deux corps et l'on suppose que les interactions à partir de trois corps sont négligables. On peut alors réécrire l'expression Eq. (3.1) à l'aide du potentiel moyen  $u_i$  par :

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^A (t_i + u_i) + \left( \frac{1}{2} \sum_{i<j}^A v_{ij} - u_i \right) = \mathcal{H}_0 + H_{res} \quad (3.2)$$

où  $\mathcal{H}_0$  et  $H_{res}$  sont respectivement le champ moyen à un corps et l'interaction résiduelle. On utilise la procédure de Hartree-Fock pour déterminer la partie du champs moyen

$u_i$  et cette méthode sera présentée dans la prochaine section.

## 3.2 Equations Hartree-Fock

Soit  $|j\rangle$  une base orthonormée et complete voir dans réf. [28, 29] par exemple : une base d'oscillateur harmonique sphérique dans la représentation  $|jm\rangle$  utilisée dans le modèle en couche  $|j\rangle = |nljm\rangle$  (quelque fois on utilise la notation  $|jm\rangle = |nljm\rangle$ ) pour développer la fonction d'onde d'une particule  $\varphi_j = \varphi_{nljm}$  cette notation peut trouver aussi dans réf. [30]

- $n$  est le nombre quantique principal (ou radial),
- $l$  est le moment cinétique orbital,
- $j = l \pm \frac{1}{2}$  est le moment cinétique total
- $m$  est la projection de  $j$  sur l'axe de symétrie ( $OZ$ )

On réécrit l'Hamiltonien du système Eq. (3.2) en seconde quantification par :

$$H = \sum_{ij} t_{ij} a_i^\dagger a_j + \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \bar{v}_{ij,kl} a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k \quad (3.3)$$

où

$$t_{ij} = \langle i|t|j\rangle \quad (3.4)$$

$$\bar{v}_{ij,kl} = V_{ij,kl} - V_{ij,lk} \quad (3.5)$$

sont les éléments de matrice de l'énergie cinétique d'une particule et les éléments de matrice antisymétriques de l'interaction à deux corps entre nucléons.  $a_i^\dagger$  et  $a_j$  sont les opérateurs de création et annihilation d'une particule, dans le cadre du formalisme de seconde quantification résumé dans l'appendice B et dont on peut trouver le détail dans ces différentes sources [30, 31].

En seconde quantification la fonction d'onde Hartree-Fock définie comme :

$$|\Phi\rangle = \prod_{i=1}^A a_i^\dagger |0\rangle \quad (3.6)$$

où  $|0\rangle$  est un état du vide, dans une base donnée  $|\Phi\rangle$  est un déterminant de Slater.



A l'aide du théorème de Wick (appendice B) on obtient l'expression pour l'énergie du système, en supposant qu'il vérifie la condition d'orthonormalisation  $\langle \Phi | \Phi \rangle = 1$  :

$$E_{HF} = \langle \Phi | H | \Phi \rangle = \sum_{\lambda \in \Phi} \langle \lambda | t | \lambda \rangle + \frac{1}{2} \sum_{\lambda, \mu \in \Phi} \langle \lambda \mu | \bar{v} | \lambda \mu \rangle \quad (3.7)$$

La fonction d'onde Hartree-Fock  $|\Phi\rangle$  est obtenue par minimisation de l'énergie totale du système pour la valeur moyenne de l'Hamiltonien :

$$\delta \frac{\langle \Phi | H | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle} = 0 \quad (3.8)$$

Soit  $|\lambda\rangle$  une orbite occupée dans  $|\Phi\rangle$

$$|\lambda\rangle = \sum_{jm} c_{jm}^\lambda |jm\rangle \quad (3.9)$$

qui vérifie la relation d'orthonormalisation

$$\sum_{jm} c_{jm}^{\lambda*} c_{jm}^{\lambda'} = \delta_{\lambda\lambda'} \quad (3.10)$$

$|\Phi\rangle$  est obtenue par une variation infinitésimale des coefficients  $c_{jm}^\lambda$  (pour simplifier on utilise la notation de base  $j$  qui se compose des états  $(nljm)$  dans les expressions suivantes). L'énergie du système sera stationnaire lorsque :

$$\frac{\partial}{\partial c_j^{\lambda*}} [\langle \Phi | H | \Phi \rangle - \sum_{\mu\mu'} \alpha_{\mu\mu'} \sum_j c_j^{\mu*} c_j^{\mu'}] = 0 \quad (3.11)$$

où  $\alpha_{\mu\mu'}$  sont les multiplicateurs de Lagrange provenant de la relation Eq. (3.10). En remplaçant les orbites Eq. (3.9) dans Eq. (3.7) et après la procédure de dérivation de l'équation Eq. (3.11) on obtient les équations.

$$\sum_{j'} \left[ \langle j | t | j' \rangle + \sum_{\lambda \in \Phi} \sum_{j_1 j_2} c_{j_1}^{\lambda*} \langle j j_1 | \bar{v} | j' j_2 \rangle c_{j_2}^\lambda \right] c_{j'}^\lambda = \sum_{\mu} \alpha_{\lambda\mu} c_j^\mu \quad (3.12)$$

On obtient les équations Hartree-Fock, équations aux valeurs propres :

$$\sum_{j'} \langle j | h | j' \rangle c_{j'}^\lambda = e_\lambda c_j^\lambda \quad (3.13)$$

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

### 24 Chapitre 3. Le champ moyen déformé dans la base du modèle en couches

L'Hamiltonien à un corps  $h$ , sera appelé l'Hamiltonien Hartree-Fock. Ses éléments de matrice sont définis par :

$$\begin{aligned}\langle j|h|j'\rangle &= \langle j|t|j'\rangle + \sum_{\lambda \in \Phi} \langle j\lambda|\bar{v}|j'\lambda\rangle \\ &= \langle j|t|j'\rangle + \sum_{\lambda \in \Phi} \sum_{j_1 j_2} c_{j_1}^{\lambda*} \langle j j_1|\bar{v}|j' j_2\rangle c_{j_2}^{\lambda}\end{aligned}\quad (3.14)$$

On résout les équations de Hartree-Fock (3.13) et (3.14) par un processus itératif :

- 1) On commence par choisir un ensemble de coefficients  $c_j^\lambda$  qui constituent une solution approchée et on choisit également quelles orbitales sont occupées. Un des choix pour l'ensemble de coefficients initiaux provient des orbitales de type Nilsson déformées : ces états sont obtenus par construction et diagonalisation des opérateurs multipolaires comme explicité dans la section suivante.
- 2) On calcule les éléments de matrice de l'Hamiltonien de Hartree-Fock Eq. (3.14) en utilisant l'ensemble de coefficients  $c_j^\lambda$  initiaux.
- 3) On résout l'équation Eq. (3.13) en diagonalisant la matrice Eq. (3.14) de l'Hamiltonien Hartree-Fock. On obtient alors de nouveaux coefficients  $c_j^\lambda$  ainsi que les énergies  $e_\lambda$  des orbitales, qui constituent une nouvelle solution approchée et on choisit quelles orbitales sont occupées et on revient à l'étape 2).

Le processus itératif converge lorsque les diagonalisations successives donnent les mêmes coefficients  $c_j^\lambda$ . Les équations de Hartree-Fock admettent plusieurs solutions. Elles dépendent notamment de l'ensemble de coefficients  $c_j^\lambda$  initiaux. Donc, l'énergie du système possède plusieurs minima locaux.

Pour décrire l'état fondamental du noyau on choisit évidemment la solution qui a l'énergie la plus basse. Le choix des orbitales occupées à étape 3) est respecté cette condition. En général, deux fonctions d'ondes Hartree-Fock ne sont pas orthogonales, et l'on reviendra à ce problème dans le chapitre 6 par l'étude des états collectifs en appliquant la méthode des coordonnées génératrices (GCM) [31, 32, 33].

Pour la solution numérique, l'Hamiltonien Hartree-Fock  $h$  est calculé, en appliquant la matrice de densité définie par :

$$\rho_{jj'} = \sum_{\lambda=1}^A c_j^\lambda c_{j'}^{\lambda*} \quad (3.15)$$

Les éléments de matrice  $\langle j\lambda|\bar{v}|j'\lambda\rangle^1$  dans Eq. (3.14) peuvent s'exprimer comme :

$$\begin{aligned}\langle jm\lambda|\bar{v}|j'm'\lambda\rangle &= \sum_{kl} c_k^{\lambda*} \langle jm, km_\lambda|\bar{v}|j'm', lm_\lambda\rangle c_l^\lambda \\ &= \delta_{mm'} \sum_{kl} c_k^{\lambda*} c_l^\lambda \sum_{JT} \langle jmkm_\lambda|JM\rangle \langle j'm'lm_\lambda|JM\rangle \langle jk|V|j'l\rangle_{JT}\end{aligned}\quad (3.16)$$

où  $J$  est le moment angulaire total,  $T$  est l'isospin total,  $M = m + m_\lambda$  et  $\langle jk|V|j'l\rangle_{JT}$  est élément de matrice couplé à bon moment angulaire et bon isospin (en générale Eq. (3.16) contient les coefficients de Clebsch-Gordan en isospin. Mais, on a calculé les éléments de matrice  $V_{pp}$ ,  $V_{nn}$  et  $V_{pn}$  dont, les coefficients de Clebsch-Gordan en isospin sont déjà pris en compte). Nous prendrons ici toujours des éléments de matrice utilisés dans les calculs de modèle en couche. Il faut remarquer que les fonctions d'onde de proton et de neutron ne sont jamais mélangées. Donc, l'équation Eq. (3.16) est calculée séparément pour protons et neutrons.

Une fois que les orbites  $\lambda$  sont calculées, l'énergie Hartree-Fock Eq. (3.7) du système s'obtient finalement par la relation :

$$E_{HF} = \frac{1}{2} \sum_{\lambda \in \Phi} (\langle \lambda | t | \lambda \rangle + e_\lambda) \quad (3.17)$$

### 3.3 Hamiltonien à un corps de type Nilsson déformé

On considère l'Hamiltonien à un corps de type Nilsson déformé réf. [34, 35] selon l'expression de la formule générale :

$$\mathcal{H}_{Nil} = h_0 + \sum_{\mu=-2}^2 \alpha_{2\mu} \hat{Q}_{2\mu} + \sum_{\mu=-3}^3 \alpha_{3\mu} \hat{Q}_{3\mu} \quad (3.18)$$

où  $h_0$  est l'Hamiltonien à un corps. Cet Hamiltonien est peut être le potentiel de l'oscillateur harmonique sphérique ou tout simplement les énergies individuelles du système au dessus du cœur inerte,

$$h_0 = \sum_i \epsilon_i a_i^\dagger a_i$$

---

1. Les deux premiers termes  $\langle \dots | \dots \rangle$  dans Eq. (3.16) sont les coefficients de Clebsch-Gordan voir dans l'appendice A.3

## 26 Chapitre 3. Le champ moyen déformé dans la base du modèle en couches

$\alpha_{\lambda\mu}$  sont les paramètres de déformations et  $\hat{Q}_{\lambda\mu}$  (Eq. (3.21)) sont les opérateurs du moment multipolaires de masses avec :

- Pour  $\lambda = 2$ ,  $\hat{Q}_{2\mu}$  est l'opérateur du moment quadrupolaire de masse avec  $\mu = -2, -1, 0, 1, 2$ , mais seul des nombres pair de  $\mu$  sont permis dans Eq. (3.18) (cette limitation provient propriété du déterminant de Slater Hartree-Fock). En coordonnées cartésiennes,  $\hat{Q}_{2\mu}$  s'écrit (on utilise la notation  $\hat{Q}_{22} = \hat{Q}_{2-2}$ ) :

$$\hat{Q}_{20} = 2z^2 - x^2 - y^2 = 3z^2 - r^2 \quad (3.19)$$

où

$$\begin{aligned} r^2 &= x^2 + y^2 + z^2 \\ \hat{Q}_{22} &= \sqrt{3}(x^2 - y^2) \end{aligned} \quad (3.20)$$

le facteur  $\sqrt{3}$  dans Eq. (3.20) est une constante et utilise dans réf. [36, 37]

- Pour  $\lambda = 3$ ,  $\hat{Q}_{3\mu}$  est l'opérateur du moment octupolaire (on ne donne pas ici l'équation cartésienne ces opérateurs).

La définition cartésienne de ces opérateurs  $\hat{Q}_{\lambda\mu}$  n'est pas adaptée à notre base et il est plus pratique d'exprimer  $\hat{Q}_{\lambda\mu}$  en terme des harmoniques sphériques et de l'opérateur  $r$  [30] :

$$\hat{Q}_{\lambda\mu} = r^\lambda Y_{\lambda\mu} \quad (3.21)$$

où  $r^\lambda$  est la partie radiale,  $Y_{\lambda\mu}$  est la partie harmonique shérique et il satisfait la relation :

$$\hat{Q}_{\lambda-\mu} = (-1)^\mu \hat{Q}_{\lambda\mu} \quad (3.22)$$

Les éléments de matrice des opérateurs  $\hat{Q}_{\lambda\mu}$  sont calculés dans l'appendice Eq. (A.1). On utilise la notation dans réf. [30], qui est différente dans réf. [31] à une phase près.

### 3.4 Déformation nucléaire

La déformation nucléaire est une notion importante pour comprendre la stucture des noyaux « **la forme du noyau** » dans son état intrinsèque par exemple la déformation quadrupolaire, octupolaire, hexadecapolaire ..., mais la déformation nucléaire, elle n'est

pas une observable. Dans notre travail, nous allons nous limiter au cas de la déformation quadrupolaire ( $\lambda = 2$  dans Eq. (3.21)) qui correspond à la forme ellipsoïdale du noyau (voir référence) [31, 38].

Dans le cas de déformations purement quadrupolaires, la surface nucléaire ne dépend que 5 paramètres ( $\mu = -2, -1, 0, 1, 2$ ) qui définissent l'orientation des axes du repère associé au rayon et les élongations du noyau selon ces axes.

Les paramétrisations utilisées sont les moments quadrupolaires de masse axiales  $Q_{20}$  et non axiales (triaxiales)  $Q_{22}$  qui correspondent à deux paramètres  $\beta$  et  $\gamma$  dans la notation de Hill-Wheeler réf. [32] et associés à la forme intrinsèque du noyau dans un repère bien défini voir Fig. (3.1).

Le moment quadrupolaire de masse  $Q_{20}$  et  $Q_{22}$  est la valeur moyenne des opérateurs du moment quadrupolaire  $\hat{Q}_{2\mu}$  Eq. (3.21), et on peut calculer ces paramètres directement à partir de la fonction d'onde Hartree-Fock  $|\Phi\rangle$  réf. [39].

$$\begin{aligned} Q_{20} &= \sqrt{\frac{16\pi}{5}} \sum_{i=p,n} e_i \langle \Phi | \hat{Q}_{20} | \Phi \rangle_i \\ Q_{22} &= \sqrt{\frac{8\pi}{5}} \sum_{i=p,n} e_i \left( \langle \Phi | \hat{Q}_{22} | \Phi \rangle_i + \langle \Phi | \hat{Q}_{2-2} | \Phi \rangle_i \right) \end{aligned} \quad (3.23)$$

Le moment quadrupolaire de masse total est donné par :

$$Q = \sqrt{Q_{20}^2 + Q_{22}^2} \quad (3.24)$$

Unité du moments quadrupolaires de masses Eq. (3.23) et Eq. (3.24) est exprimé en  $b^2$ , ces moments quadrupolaires sont associés aux paramètres de déformations  $\beta$  et  $\gamma$  réf. [40, 41, 42] :

$$\begin{aligned} \gamma &= \arctan\left(\frac{Q_{22}}{Q_{20}}\right) \\ \beta &= \frac{b^2 Q \sqrt{20\pi}}{3r_0^2 A^{\frac{5}{3}}} \end{aligned}$$

avec  $b^2 = \frac{41.4}{45A^{-\frac{1}{3}} - 25A^{-\frac{2}{3}}} \text{ fm}^2$  le paramètre d'oscillateur harmonique réf. [30, 43, 44, 45],  $r_0 = 1.2 \text{ fm}$  le rayon nucléaire et  $A$  la masse du noyau.

- le paramètre  $\beta$  représente l'élongation du noyau,
- pour les noyaux sphériques  $\beta = 0$ ,

### 28 Chapitre 3. Le champ moyen déformé dans la base du modèle en couches

- pour  $\beta \neq 0$  on caractérise la forme du noyau selon valeur de  $\gamma$

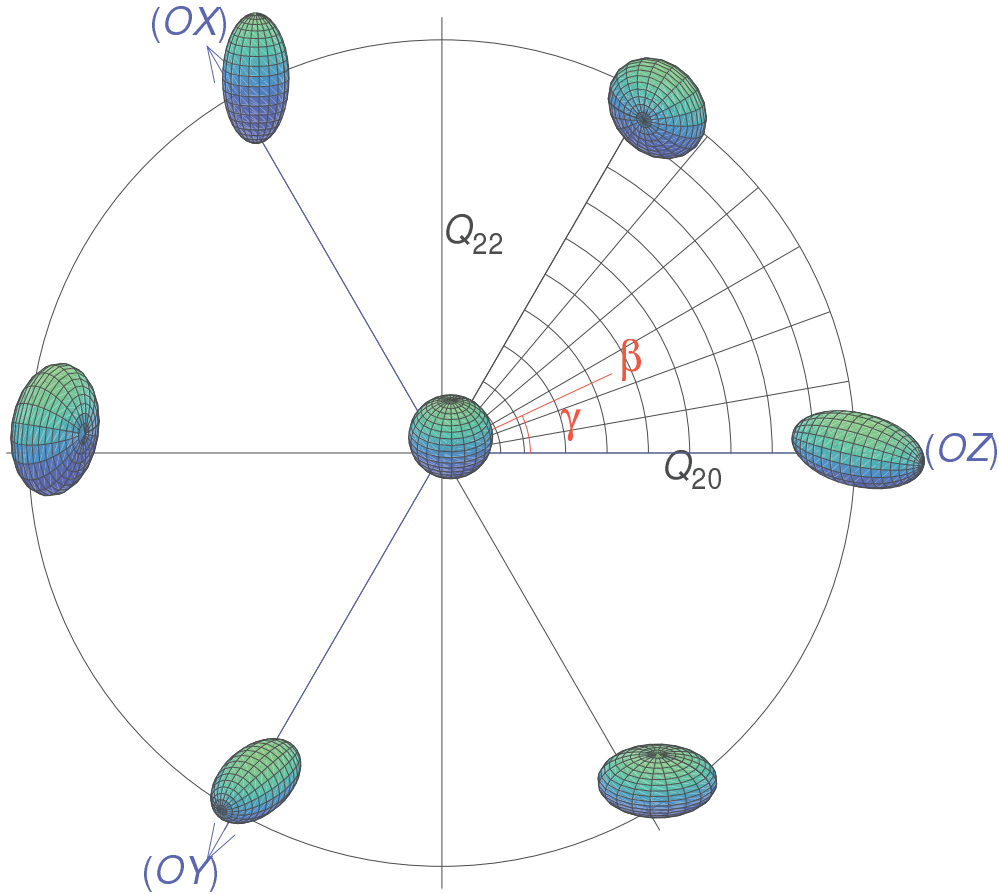


FIGURE 3.1 – Interprétation de la forme du noyau dans le plan des déformations  $(\beta, \gamma)$ , cette interprétation n'est plus valable si le déterminant de Slater est brisé la symétrie par renversement du temps.

- dans le plan  $(Q, \gamma)$  ou  $(\beta, \gamma)$ , on divise ce plan en six sextants caractérisés par la déformation  $\gamma$  de  $0^\circ$  à  $360^\circ$  voir Fig. (3.1). Pour  $\gamma = 0^\circ$  ( $60^\circ$ ),  $120^\circ$  ( $180^\circ$ ),  $240^\circ$  ( $300^\circ$ ) correspond à la déformation à symétries axiales de la forme prolate (oblate), pour  $\gamma$  en dehors des trois axes principaux  $(OX)$ ,  $(OY)$  et  $(OZ)$  le noyau possède une forme triaxiale. Le sextant  $\gamma \in [0^\circ; 60^\circ]$  contient toute l'information sur la surface d'énergie potentielle du noyau et puis il est invariant par rapport à une rotation de  $120^\circ$ .

Comme au cours de la discussion de la section précédent les composantes  $Q_{21} =$

$Q_{2-1} = 0$  parce que la fonction d'onde  $|\Phi\rangle$  est invariante par renversement du sens du temps. Dans le cadre du modèle en couches, de même que l'interaction utilisée est effective c'est à dire qu'elle tient en compte, par la théorie de perturbation des excitations externes à l'espace de valence, les opérateurs de transitions sont renormalisés. Un moyen usuel pour le calcul des moments quadrupolaires de masses  $Q_{20}$  et  $Q_{22}$  dans Eq. (3.23), est l'emploi d'une charge effective.

La charge effective est définie par plusieurs auteurs, on prend la notation utilisée dans la réf. [44] :

$$e_{eff}^p = (1 + \chi)e, \quad e_{eff}^n = \chi e \quad (3.25)$$

où  $\chi$  est la constante de polarisation électrique. On utilise le plus souvent par exemple dans le modèle en couches et pour des espace  $0\hbar\omega$ , la valeur microscopique de Dufour-Zuker [22]  $\chi_p = 0.31$ ,  $\chi_n = 0.46$ . Selon les espaces de valence utilisés, on peut appliquer différentes valeurs de  $\chi$  selon les noyaux étudiés. Enfin, pour les calculs d'opérateurs de masse, on prendra alors

$$e_{eff}^p = e_{eff}^n = (1 + \chi_p + \chi_n)e$$

### 3.5 Les symétries des solutions Hartree-Fock

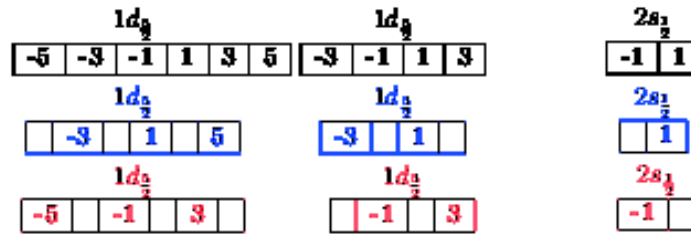
Les symétries du champs moyen nous permettent de limiter le développement des orbites l'Eq. (3.9) voir dans réf. [28, 29]. On considère dans notre cas que l'Eq. (3.9) sont les orbites de protons et de neutrons. Les symétries du champs moyen les plus rencontrés sont :

- la symétrie par renversement du temps : si pour chaque orbite occupée l'Eq. (3.9) alors l'orbite du renversement du temps noté  $|\tilde{\lambda}\rangle$  est aussi occupée. Le développement d'orbite  $|\lambda\rangle$  dans l'Eq. (3.9) est limité à  $m$  varie seulement  $(m - \frac{1}{2})$  pair ou impaire voir Fig 3.2. Donc, les coefficients  $c_{jm}^\lambda$  sont réels. Le développement des orbites du renversement du temps  $|\tilde{\lambda}\rangle$  est donné par :

$$|\tilde{\lambda}\rangle = \sum_{jm} c_{jm}^\lambda (-1)^{l+j-m} |nlj - m\rangle \quad (3.26)$$

### 30 Chapitre 3. Le champ moyen déformé dans la base du modèle en couches

FIGURE 3.2 – Exemple la sélection de base de couche sd : la première ligne est la base complète utilisée dans le modèle en couches, la deuxième ligne est la base de Hartree-Fock et utilisée pour développer l'orbite  $|\lambda\rangle$  l'Eq. (3.9) et la dernière ligne est la base pour développer l'orbite du renversement du temps  $|\tilde{\lambda}\rangle$  l'Eq. (3.26), les chiffres dans la boîte sont les valeurs de  $2m$  (par exemple  $-5=2m$ )



- la parité : la parité est un bon nombre quantique, le développement de chaque orbite l'Eq. (3.9) des états  $(nljm)$  tels que  $l$  ait une parité donnée. La solution Hartree-Fock, elle conserve la parité, on va voir par exemple dans le cas du  $^{140}\text{Sm}$  de chapitre 4, les occupations des orbites sphérique de l'état intruse  $1h_{1/2}$  sont un nombre pair, il n'y a pas de mélange avec les autres orbites voir dans la Tab. 4.5.
- la symétrie axiale : le développement d'orbite  $|\lambda\rangle$  dans l'Eq. (3.9) a toujours des solutions à symétrie axiale, le développement l'Eq. (3.9) de chaque orbite sera limiter à des états qui ont la même valeur de  $m$
- la symétrie ellipsoïdale : pour les noyaux pair-pair, les solutions qui n'ont pas de symétrie axiale peuvent avoir la symétrie ellipsoïdale, c'est-à-dire la symétrie par rapport à une réflexion dans le plan  $(xy)$ ,  $(yz)$  et  $(zx)$  [28, 29]. Une solution avec symétrie ellipsoïdale est invariant par rapport au renversement du temps, les orbites  $|\lambda\rangle$  et  $|\tilde{\lambda}\rangle$  sont orthogonaux et il suffit que ces orbites soient occupées dans  $|\Phi\rangle$ .

Le choix des orbites de Nilsson l'Eq. (3.18) est très important car la solution finale Hartree-Fock va dépendre des caractères des états initiaux et de leurs symétries, c'est-à-dire que les symétries des états initiaux sont conservées. Dans l'Eq. (3.18), les paramètres  $\alpha_{20}$ ,  $\alpha_{22}$  caractérisent les symétries axiales et triaxiales respectivement. Ces deux paramètres nous permettent de contrôler les orientations du noyau dans les calculs Hartree-Fock. Le dernier terme de l'Eq. (3.18) permet lui de mélanger les parités. Pour les applications dans un espace de valence constitué d'une couche majeure d'oscil-



lateur harmonique (noyaux légers), ce terme ne joue pas puisque la parité des couches est identique. Dans des espaces pour les noyaux plus lourds, différents types de parité sont présents dans l'espace de valence, mais le minimum Hartree-Fock est toujours une solution Hartree-Fock, qui conserve la parité. On envisage dans la future d'étudier les déformations octupolaire et la projection sur la parité. Cependant on ne donne pas la définition et les propriétés des ces opérateurs.

### 3.6 Solution Hartree-Fock

Une première application a été faite pour les noyaux légers ( $N = Z$ ) de la couche  $sd$  avec l'interaction effective USD, dont l'ensemble des éléments de matrice peut se trouver dans la référence [46]. Les résultats sont présentés dans la table 3.1.

TABLE 3.1 – Solutions Hartree-Fock déformées avec l'interaction USD pour les noyaux  $N = Z$  de la couche  $sd$ . Les énergies sont en MeV, les moments quadrupolaires en  $eb^2$  et  $\gamma$  est en degrés.

Noyaux	$E_{HF}$	$\langle \hat{Q} \rangle$	$\gamma$	$E_{SM}$
$^{20}\text{Ne}$	-36.38	15.36	0	-40.49
$^{24}\text{Mg}$	-80.61	19.10	13.67	-87.09
$^{28}\text{Si}$	-129.61	20.28	60	-135.94
$^{32}\text{S}$	-175.48	15.06	24.7	-182.63
$^{36}\text{Ar}$	-256.56	13.53	60	-230.14

Nos valeurs concordent avec celles de la réf. [43] qui utilise la même approximation et la même interaction. l'un des noyaux particulièrement intéressant est le  $^{28}\text{Si}$ , il est situé au milieu du remplissage de la couche  $sd$ , entre les noyaux à couches fermées  $^{16}\text{O}$  et  $^{40}\text{Ca}$ . Trois solutions comme état intrinsèque sont possibles : sphérique (le point en vert), oblate (le point en bleu), et prolata (le point en rouge). La solution prolata se situe très haut en énergie (voir Fig. 3.3). On voit que la solution de plus basse en énergie est la solution oblate, dont la structure correspond à celle de la diagonalisation du modèle en couche.

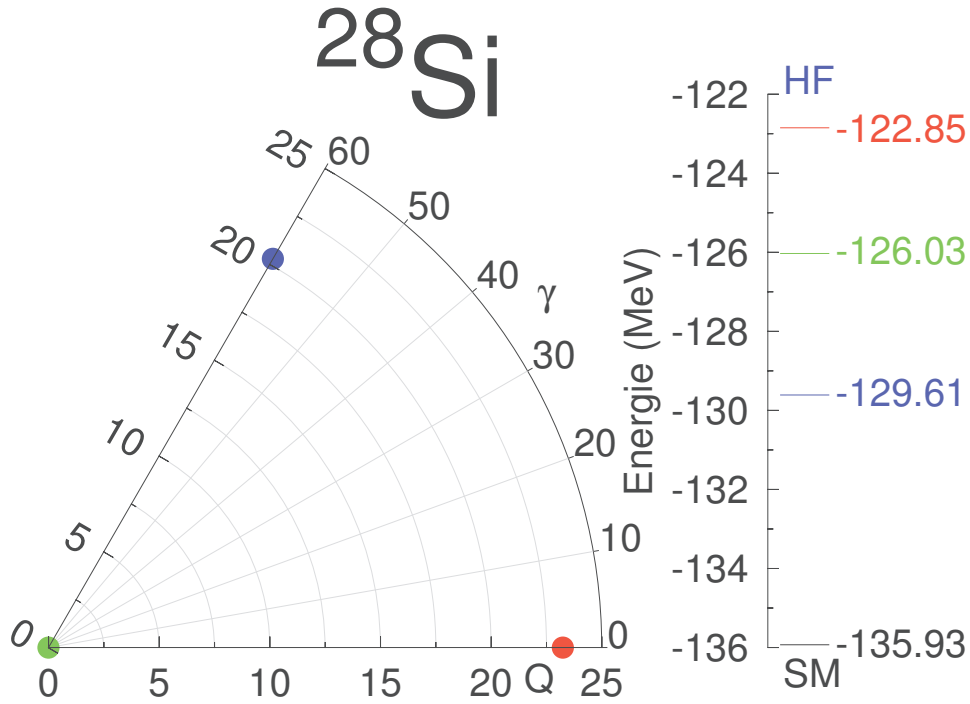


FIGURE 3.3 – Comparaison des solutions de calculs Hartree-Fock et la diagonalisation du modèle en couches dans  $^{28}\text{Si}$  avec interaction effective USD.

Pour ce faire, nous avons calculé les occupations des orbites sphériques  $N_j$  des états  $(nlj)$  en utilisant la formule de la réf. [47] :

$$N_j = \sum_m \langle \Phi(q) | c_{jm}^\dagger c_{jm} | \Phi(q) \rangle \quad (3.27)$$

Les occupations des orbites sphériques du champ moyen et du modèle en couches du  $^{28}\text{Si}$  sont présentées dans la table (3.2).

TABLE 3.2 – Occupations des orbites sphériques du  $^{28}\text{Si}$  pour les calculs Hartree-Fock déformés (état axial prolate) et la diagonalisation du modèle en couches.

p,n	$1d_{\frac{5}{2}}$	$2s_{\frac{1}{2}}$	$1d_{\frac{3}{2}}$
HF	4.210	0.998	0.791
SM	4.252	0.977	0.770

La différence en énergie entre l'état fondamental ( $0^+$ ) de la diagonalisation du modèle en couches et le minimum Hartree-Fock est de l'ordre 6 MeV (voir table (3.1)). On pense que cette différence en énergie est due aux corrélations d'appariements ainsi qu'à la restauration du moment angulaire total. On va étudier en détail cette énergie dans les chapitres suivants par la méthode des coordonnées génératrices (GCM) au chapitre 6 et la restauration du moment angulaire total au chapitre 5.

Théoriquement on s'attend à gagner encore une quantité d'énergie par la méthode de GCM de l'ordre 0.5 – 1 MeV et de l'ordre 2 – 4 MeV par la méthode de projection sur le moment angulaire total.

Pour continuer à tester le code et cette approximation, nous avons calculé les moments quadrupolaires de masse avec le modèle  $SU(3)$  (une référence récente sur l'utilité de ce modèle peut se trouver dans la réf. [45]). Les résultats sont présentés dans Tab. 3.3. La colonne 3 est le résultat des calculs Hartree-Fock déformés des moments quadrupolaires des masses avec une interaction  $SU(3)$  et la dernière colonne est le moment quadrupolaire de masse exact modèle  $SU(3)$  voir dans réf. [45]. L'accord avec une vraie interaction quadrupole-quadrupole est probant et évidemment nos résultats retrouvent aussi ceux des calculs de modèle en couches. A noter aussi, le respect de la règle de conjugaison particule-trou dans la cas, par exemple de  $^{20}\text{Ne}$  et  $^{36}\text{Ar}$  où la fonction d'onde est identique à la conjugaison particule-trou, c'est-à-dire que les moments quadrupolaires sont égaux en valeur absolue mais de signes opposés voir dans réf. [45].

TABLE 3.3 – Solution Hartree-Fock déformée avec interaction  $SU(3)$  pour les noyaux  $N = Z$ , l'énergie est en MeV, le moment quadrupolaires est en  $eb^2$

Noyaux	$E_{HF}$	$\langle \hat{Q} \rangle$	$Q$
$^{20}\text{Ne}$	-163.11	15.96	16
$^{24}\text{Mg}$	-234.09	21.14	20
$^{28}\text{Si}$	-213.07	-23.98	-24
$^{32}\text{S}$	-80.09	-21.14	-20
$^{36}\text{Ar}$	144.88	-15.96	-16

Dans la minimisation du champ moyen Hartree-Fock déformé, on trouve que la

plupart les noyaux de la couche  $sd$  sont déformés à symétrie axiale, et que quelques noyaux sont déformés à symétrie triaxiale (voir Fig. 3.4). Pour le  $^{32}\text{S}$  est sphérique, mais on trouve une solution à symétrie triaxiale avec l'énergie plus basse que l'énergie sphérique voir Tab. 3.1. Le  $^{24}\text{Mg}$  est déformé à symétrie triaxiale avec l'énergie plus basse que la solution à symétrie axiale prolate de l'ordre 300 KeV.

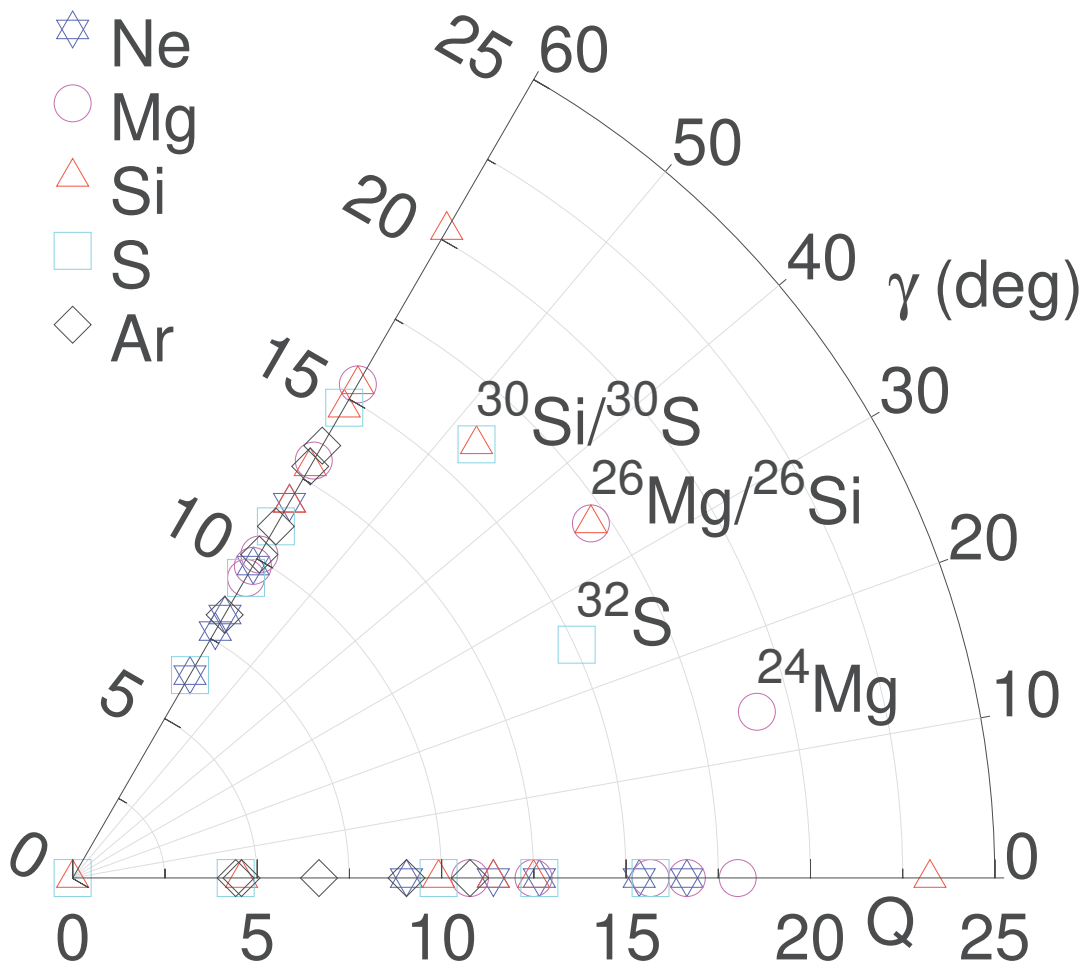


FIGURE 3.4 – Déformations des noyaux pair-pair de la couche  $sd$  pour  $10 \leq Z, N \leq 18$ , avec l'interaction USD.

## Chapitre 4

### Calculs sous contraintes



La procédure Hartree-Fock nous donne un seul point minimum local. Pour étudier le comportement statique du noyau en dehors de son fondamental, on doit modifier l'Hamiltonien nucléaire en rajoutant certaines déformations extérieures, que nous appellerons contraintes. Les déformations considérées dans notre cas sont des déformations quadrupolaires axiales et non axiales (triaxiales). Comme indiqué dans le chapitre précédent, les équations Hartree-Fock se résolvent de manière itérative, et si on veut tracer une courbe ou une surface d'énergie potentielle  $E(q)$  en fonction des paramètres des déformations  $q = (Q_{20}, Q_{22})$  (voir Eq. (3.23)), on va chercher à minimiser l'énergie totale sans contrainte  $E'(q)$ , le minimum de  $E'(q)$  sans contrainte correspondant à l'énergie avec contrainte  $q$  de  $E(q)$ .

Plusieurs types de contraintes sont possibles. Nous avons essayé successivement les contraintes linéaires, quadratiques et la méthode du lagrangien augmenté. Ces méthodes vont être résumées dans les sections suivantes :

## 4.1 Contrainte linéaire

La contrainte linéaire est utilisée souvent dans l'approximation de Hartree Fock Bogolioubov (HFB) comme contrainte sur le nombre de particules, la description de cette méthode peut se trouver dans plusieurs sources [31, 48], dans la contrainte sur des déformations multipolaires de masses, cette méthode est moins utilisée parcequ'elle peut décrire seulement des déformations autour du minimum. Soit  $Q_{20}$  et  $Q_{22}$  les moments quadrupolaires de masse axiales et triaxiales définies dans Eq. (3.23). Pour simplifier

nous allons utiliser la notation  $q$  avec :

$$q = Q_{20} \quad \text{ou} \quad q = (Q_{20}, Q_{22})$$

Si on veut calculer l'énergie du système au point  $(q_0, E(q_0))$ , l'énergie totale du système à minimiser Eq. (3.7) se modifie alors comme :

$$E'(q) = E(q) - \lambda_0(q - q_0) \quad (4.1)$$

où  $\lambda_0$  est le multiplicateur de lagrange. Après la procédure de dérivation on obtient l'Haltonien à un corps :

$$h' = h - \lambda_0 \hat{Q} \quad (4.2)$$

La minimisation sans contrainte  $E'(q)$  nous donne un minimum local dans le système de rotation d'un angle  $\alpha$  ( $\tan(\alpha) = -\lambda_0 = \frac{dE}{dq}(q_0)$ ). Donc, la minimisation sous contrainte  $E(q)$  est obtenue par la minimisation sans contrainte de  $E'(q)$ . Pour résoudre l'équation Eq. (4.2) on se donne les valeurs différentes de  $\lambda_0$ . Lorsque la concavité de la courbe énergie potentielle en fonction de la déformation change vers le haut ou vers le bas par exemple dans la zone jaune de la Fig 4.1 (a), cette méthode n'est plus valable parce qu'autour du point maximum, les solutions ne sont pas stables. Pour éviter ce problème, nous sommes ensuite passé à l'utilisation d'une contrainte quadratique.

## 4.2 Contrainte quadratique

La contrainte quadratique peut être utilisée comme contrainte sur les déformations multipolaires de masse [31, 48, 49]. L'expression Eq. (4.1) est remplacée par :

$$E'(q) = E(q) - \frac{c}{2}(q - q_0)^2 \quad (4.3)$$

où  $c$  est un paramètre dont on ajuste la valeur de manière à obtenir la valeur de  $q$  la plus proche possible de  $q_0$ . Le résultat de la dérivation de l'équation Eq. (4.3) est :

$$h' = h - c(q - q_0)\hat{Q} \quad (4.4)$$

Pour résoudre l'équation Eq. (4.4), on peut :



- fixer le paramètre  $c$  et faire varier  $q_0$ ,
- fixer  $q_0$  et faire varier  $c$ ,
- faire varier  $c$  et  $q_0$ .

Dans le calcul pratique, cette méthode est délicate parce que le paramètre  $c$  joue un rôle important. Si l'on prend  $c$  petit, on obtient des résultats assez loin de la valeur que l'on impose. Et si l'on prend  $c$  assez grand, la minimisation ne converge pas. En général, il est difficile d'obtenir la valeur exacte de contrainte imposée voir Fig 4.1 (b). Mais lorsqu'on sépare les termes linéaires et termes quadratiques, le résultat est plus précis que la méthode standard de contrainte quadratique [49, 50].

### 4.3 Méthode lagrangien augmenté

La méthode lagrangien augmenté est obtenue par combinaison des deux méthodes de contrainte linéaire et de contrainte quadratique [51]. L'énergie du système s'écrit comme :

$$E'(q) = E(q) - \lambda(q - q_0) - \frac{c}{2}(q - q_0)^2 \quad (4.5)$$

Après la procédure de la dérivation, on obtient l'Hamiltonien à un corps :

$$h' = h - c(q - q_0(\lambda))\hat{Q} \quad (4.6)$$

où

$$q_0(\lambda) = q_0 - \frac{\lambda}{c}$$

l'expression Eq. (4.6) est la même forme que celle Eq. (4.4) où l'on remplace  $q_0$  de l'expression Eq. (4.4) par  $q_0(\lambda)$  et l'on fait varier  $\lambda$  à chaque itération :

$$\lambda_{k+1} = \lambda_k + c(q - q_0) \quad (4.7)$$

avec l'initialisation  $\lambda_0 = 0$ .

Cette méthode est plus efficace que la contrainte quadratique voir Fig. 4.1 (c). En général, la minimisation sous contrainte va nécessiter plus d'itérations (donc plus de temps) qu'une minimisation normale. Pour des applications à des calculs de surfaces d'énergie potentielle des noyaux, on a besoin parfois d'accélérer de la convergence. L'équation Eq. (4.6) est avantageuse d'utiliser la procédure de réf. [52, 53, 54].

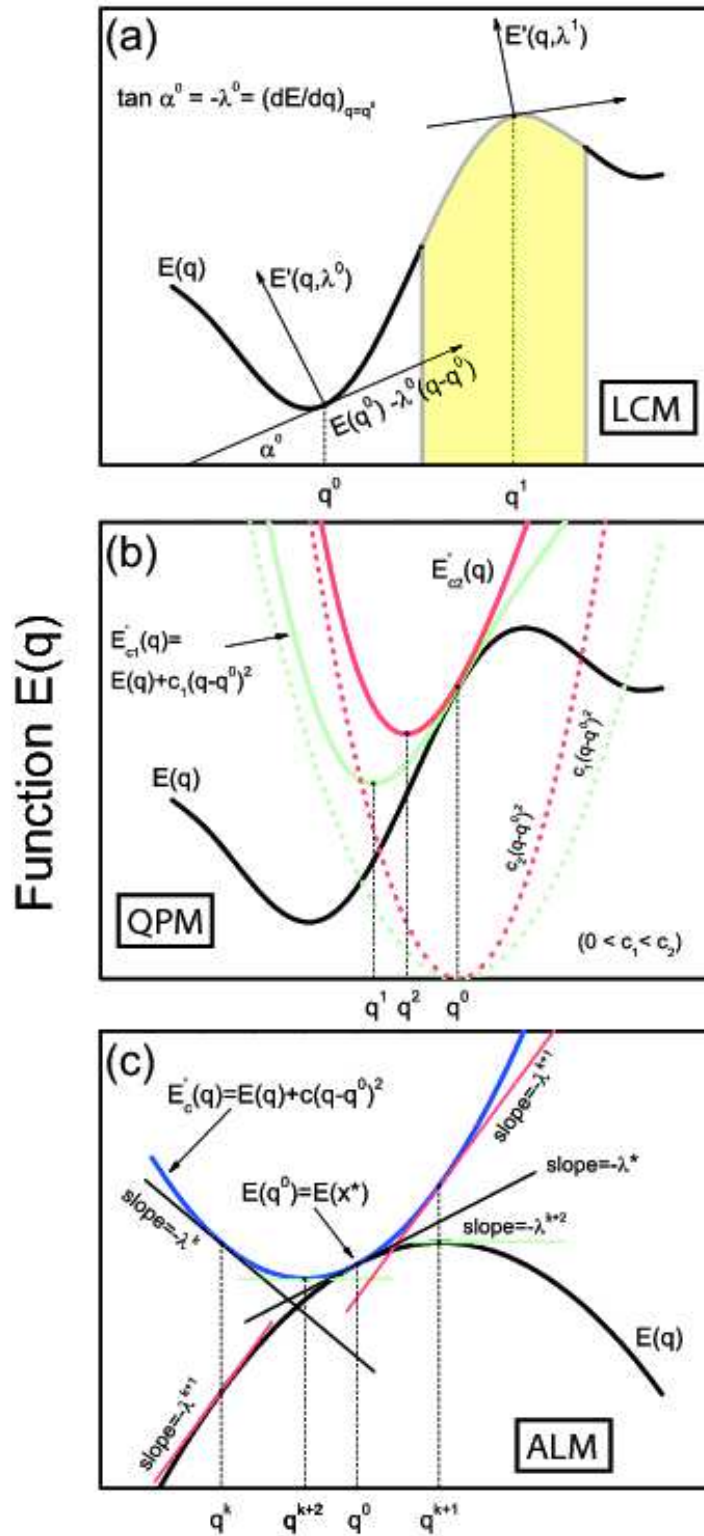


FIGURE 4.1 – Image de l'interprétation des contraintes linéaire (a), quadratique (b), et de la méthode du lagrangien augmenté (c). La figure est tirée de la réf. [51].

## 4.4 Accélération de la convergence

La minimisation Hartree-Fock sous contraintes peut osciller dans certaines régions loin du point minimum, à cause de la dégénérescence des niveaux. Dans ce cas la solution de Hartree-Fock est dite divergente. Pour éviter le problème des oscillations de la solution Hartree-Fock, on peut parfois mélanger les solutions Hartree-Fock c'est-à-dire que l'on va prendre quelques pourcents de solution Hartree-Fock de l'itération  $(k - 1)$  que l'on mélange avec la solution de l'itération  $(k)$  pour la prochaine itération  $(k + 1)$ .

Dans ce paragraphe, nous allons discuter des conditions de convergences et de la méthode pour accélérer la convergence. Plusieurs critères peuvent s'appliquer dans les calculs Hartree-Fock pour imposer une convergence. Par exemple sur l'énergie totale, si l'énergie totale entre deux itérations varie d'une quantité plus petite qu'un nombre donné  $\xi$ , la solution est alors considérée comme convergée. Pour les noyaux légers, la précision des calculs est  $10^{-6}$  MeV (ou  $\xi = 10^{-6}$ ) et pour les noyaux plus lourds, on va prendre  $\xi = 10^{-4}$  ou  $\xi = 10^{-5}$ .

Soit  $\rho_{in}$  la matrice densité initiale, et  $\rho_{out}$  la matrice densité après résolution des équations Hartree-Fock. Si l'on considère ces deux matrices comme deux vecteurs  $|\rho_{in}\rangle$  et  $|\rho_{out}\rangle$  et que l'on définit  $|F\rangle$  par

$$|F\rangle = |\rho_{out}\rangle - |\rho_{in}\rangle \quad (4.8)$$

Si  $|F| = 0$  ou  $|F| < \xi$ , la condition de convergence est satisfaite. Mais en général les équations Hartree-Fock étant non linéaires,  $|F| \neq 0$ .

Pour éviter le problème d'instabilité dans les calculs Hartree-Fock et pour accélérer de la convergence, on minimise  $|F\rangle$ , en remplaçant la matrice densité à l'itération  $(k + 1)$  par :

$$|\rho_{in}^{(k+1)}\rangle = |\rho_{in}^{(k)}\rangle + \alpha |F^{(k)}\rangle \quad (4.9)$$

où  $\alpha$  est un paramètre de mélange et on prend  $\alpha \in [0; 1]$  et on appelle l'expression Eq. (4.9) « un mélange simple ». Si l'on peut déterminer le paramètre  $\alpha$  dans Eq. (4.9) tel que la condition ( $|F| = 0$ ) soit vérifiée, le calcul est terminé.

Dans le cas contraire, plusieurs stratégies concernant  $\alpha$  sont possibles :

- on prend une valeur fixe  $\alpha = 0.5$ , c'est à dire que l'on impose 50% de mélange entre deux itérations
- on prend une valeur variable de  $\alpha$  de 0.1 à 1 en augmentant  $\alpha$  de 11.13% (valeur recommandée dans la réf. [54]) à chaque itération jusqu'à convergence (si  $\alpha$  atteint 1, on redémarre de  $\alpha = 0.1$ ).

Cette méthode est très efficace pour les noyaux légers, mais pour les noyaux plus lourds la convergence peut s'avérer trop lente.

Pour accélérer de la convergence dans la résolution des équations non linéaires, plusieurs méthodes proposées dans la littérature comme par exemple la méthode du mélange de Anderson [53], ou la méthode de multidimension de Newton-Raphson en remplaçant  $\alpha$  par l'inverse de la matrice Jacobienne  $G^{(k)}$ . L'inverse de la matrice Jacobienne reste quelque fois est difficile à traiter. La méthode de Broyden qui suit, est plus adaptée pour accélérer de la convergence dans le calcul la surface d'énergie potentielle des noyaux. Il propose d'utiliser la formule de Sherman-Morrison pour remplacer directement la matrice inverse  $G^{(k)}$ , et l'on va résumer les formules nécessaires (la description détaillée de cette méthode se trouve dans réf. [52, 54]).

$$|\rho_{in}^{(k+1)}\rangle = |\rho_{in}^{(k)}\rangle + G^{(k)}|F^{(k)}\rangle \quad (4.10)$$

Soit

$$|\Delta\rho^{(k)}\rangle = \frac{|\rho_{in}^{(k+1)}\rangle - |\rho_{in}^{(k)}\rangle}{\|F^{(k+1)}\rangle - \|F^{(k)}\rangle} \quad (4.11)$$

$$|\Delta F^{(k)}\rangle = \frac{|F^{(k+1)}\rangle - |F^{(k)}\rangle}{\|F^{(k+1)}\rangle - \|F^{(k)}\rangle} \quad (4.12)$$

On remplace la matrice  $G$  par :

$$G^{(k+1)} = G^{(k)} - (|\Delta\rho^{(k)}\rangle + G^{(k)}|\Delta F^{(k)}\rangle)\langle\Delta F^{(k)}| \quad (4.13)$$

on initialise  $G$  par :

$$G^{(0)} = \alpha I$$

où  $I$  est une matrice unitaire

**Remarques :**

- nous lisons les informations de l'itération précédente de manière arbitraire.
- cette méthode peut s'appliquer après un certain nombre d'itérations, après l'utilisation d'un mélange simple

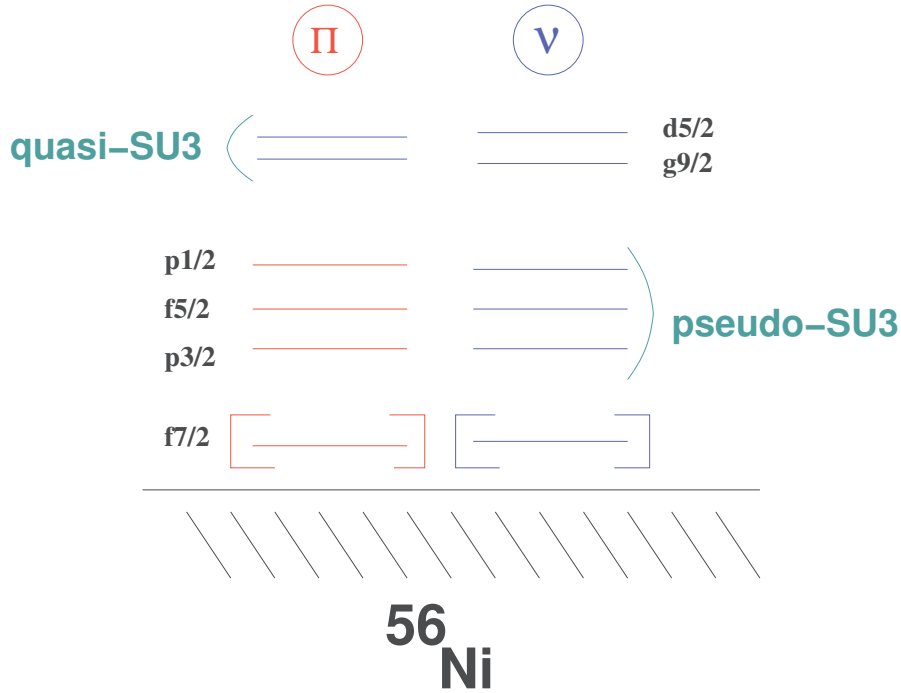
- il peut arriver que si la convergence se produit avec difficultés, par exemple si l'énergie varie trop rapidement, il faille revenir au mélange simple Eq. (4.9).

Nous allons passer maintenant à quelques applications des outils développés jusqu'à présent dans diverses régions de masse et divers espaces de valence.

## 4.5 Surface d'énergie potentielle des noyaux $N = Z$ : $^{72}\text{Kr}$ , $^{76}\text{Sr}$ et $^{80}\text{Zr}$

L'une des régions de masses moyenne où la collectivité se développe et qui échappe aux diagonalisations exactes actuelles est la région de masse  $A \sim 80$  pour les noyaux  $N \sim Z$ . La physique reste cependant accessible à une interprétation en termes de modèles algébriques de type  $SU(3)$  ainsi que de ses variantes, dont l'étude détaillée a récemment été publiée dans la réf. [45].

Pour cette étude, pour nous allons prolonger l'espace de valence et l'interaction effective définis avec grand succès pour la description des noyaux riches en neutrons à  $N = 40$  et l'îlot d'inversion autour du  $^{64}\text{Cr}$  [55] en considérant à la fois pour les protons et neutrons les orbites suivantes :  $2p_{\frac{3}{2}}, 1f_{\frac{5}{2}}, 2p_{\frac{1}{2}}, 1g_{\frac{9}{2}}, 2d_{\frac{5}{2}}$ . Cet espace a l'avantage de contenir les degrés de liberté minimaux et essentiels au développement d'une forte collectivité le long de la ligne  $N = Z$ . L'Hamiltonien effectif correspondant a été dénommé **JUN45.LNPS**. Les surfaces d'énergie potentielle du  $^{72}\text{Kr}$ ,  $^{76}\text{Sr}$  et  $^{80}\text{Zr}$  sont présentées dans Fig. 4.3. Ces trois noyaux sont très déformés avec le paramètre de déformation  $\beta \sim 0.41$ . Le noyau  $^{72}\text{Kr}$  est déformé à symétrie triaxiale avec le paramètre de déformation  $\gamma \sim 8.2^\circ$ . Les  $^{76}\text{Sr}$  et  $^{80}\text{Zr}$  sont quant à eux déformés à symétrie axiale de forme prolate. L'inspection des fonctions d'onde au travers des occupations sphériques est assez intéressante dans la mesure où elle révèle des structures Nparticules - Ntrous claires pour chacun des trois isotopes considérés :  $8p - 16t$  pour le  $^{72}\text{Kr}$ ,  $8p - 12t$  pour le  $^{76}\text{Sr}$  et  $12p - 12t$  pour le  $^{80}\text{Zr}$ .

FIGURE 4.2 – Espace de valence pour la description des noyaux  $N = Z$ .TABLE 4.1 – Occupations des orbites sphériques du  $^{72}\text{Kr}$ ,  $^{76}\text{Sr}$  et  $^{80}\text{Zr}$ , pour les calculs Hartree-Fock déformés avec l’Hamiltonien effectif JUN45.LNPS.

	p,n	$2p_{\frac{5}{2}}$	$1f_{\frac{5}{2}}$	$2p_{\frac{1}{2}}$	$1g_{\frac{9}{2}}$	$2d_{\frac{5}{2}}$
$^{72}\text{Kr}$	8	1.32	2.23	0.45	2.78	1.22
$^{76}\text{Sr}$	10	2.17	3.28	0.55	2.70	1.30
$^{80}\text{Zr}$	12	2.02	3.44	0.54	4.62	1.38

Expérimentalement, ces noyaux sont marqués par de forts taux de transition E2 entre leur deux premiers états BE2( $2^+_1 \rightarrow 0^+_1$ ).

Dans la limite du modèle rotationnel de Bohr-Motellson, on peut relier cette quantité au moment quadrupolaire intrinsèque obtenu au cours de la minimisation Hartree-Fock déformée ( $Q_i = Q$  voir Eq. (3.24)).

$$B(E2, J \rightarrow J-2)_{rot.} = \frac{5}{16\pi} e^2 |\langle JK20 | J-2, K \rangle|^2 Q_i^2 \quad (4.14)$$

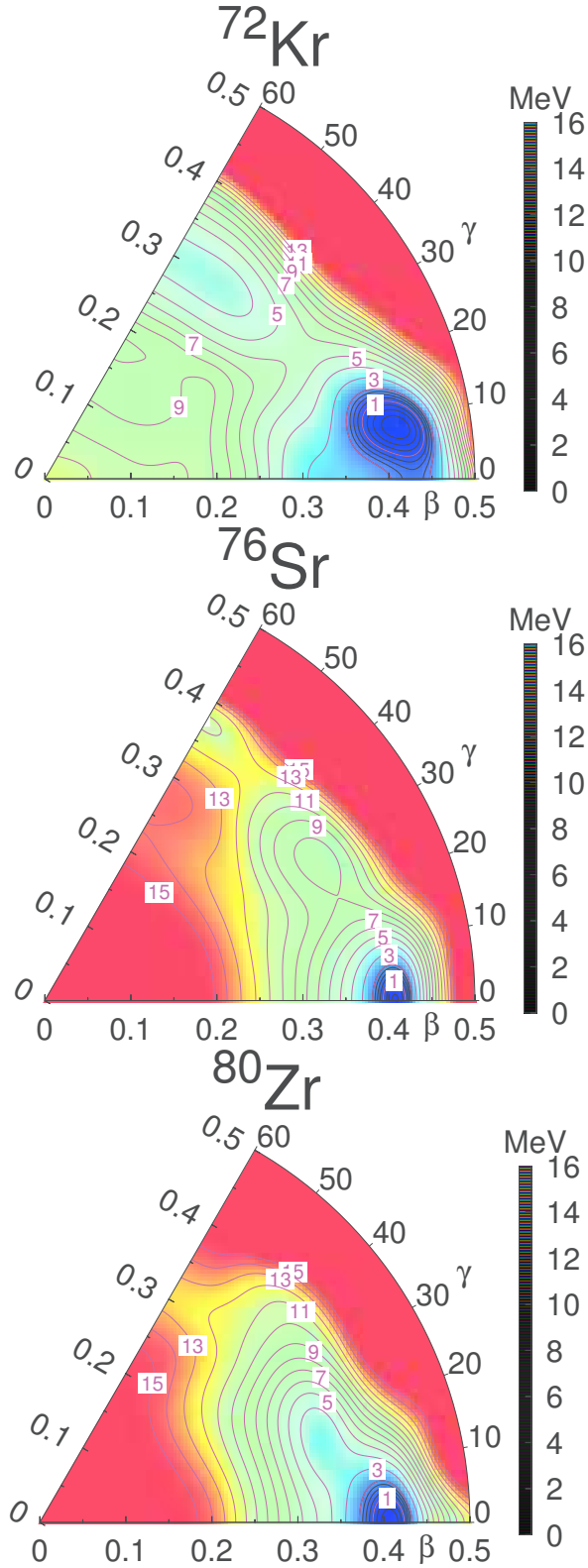
#### 4.5. Surface d'énergie potentielle des noyaux $N = Z$ : $^{72}\text{Kr}$ , $^{76}\text{Sr}$ et $^{80}\text{Zr}$ 45

où  $J$  est le moment angulaire total et  $K$  est la projection de  $J$  sur l'axe ( $OZ$ ) du repère intrinsèque. Cette formule est bien adaptée pour les noyaux déformés à symétrie axiale et si le déterminant de Slater Hartre-Fock est invariant par renversement du temps,  $K$  est un bon nombre quantique et  $K = 0$ , dans le cas des noyaux déformés à triaxiales  $K$  n'est pas un bon nombre quantique. Les ordres de grandeurs théoriques sont respectés. Le cas du  $^{72}\text{Kr}$  est un peu particulier puisque expérimentalement deux bandes coexistent et des effets de mélanges qui ne sont évidemment pas pris en compte pour l'instant, peuvent se produire [56]. Nous reviendrons lors du prochain chapitre sur la structure de ces noyaux avec un calcul microscopique du taux de transition entre les états obtenus après restauration du moment angulaire.

TABLE 4.2 – Taux de transitions E2 estimés entre les deux premiers états des isotopes du  $^{72}\text{Kr}$ ,  $^{76}\text{Sr}$  et  $^{80}\text{Zr}$ . Les  $B(E2)$  sont exprimés en  $\text{e}^2\text{fm}^4$ , les valeurs expérimentales sont tirées des réf. [56, 57].

	$B(E2)_{\text{exp.}}$	$B(E2)_{\text{rot.}}$
$^{72}\text{Kr}$	932	1566
$^{76}\text{Sr}$	2220	1883
$^{80}\text{Zr}$	-	2245

FIGURE 4.3 – Surface d'énergie potentielle des noyaux  $N = Z$  :  $^{72}\text{Kr}$ ,  $^{76}\text{Sr}$  et  $^{80}\text{Zr}$ , la séparation des lignes du contour est 1 MeV, 0.25 MeV pour les lignes pointillées.





## 4.6 Déformation pour les noyaux riches en neutrons en $N = 46, 48, 50$

Les récentes études expérimentales de régions de noyaux riches en neutrons ont récemment révélé l'existence d'une situation de coexistence de forme à  $N = 40$  dans le  $^{68}\text{Ni}$  ainsi qu'une nouvelle région de déformation ou îlot d'inversion autour du noyau  $^{64}\text{Cr}$  [55, 58]. Les calculs de modèle en couches à grande échelle ont d'abord prédit, puis décrit en détails cette situation [59, 60]. Il a été en particulier mis en évidence la forte similitude entre les mécanismes de disparition de fermeture de couches à  $N = 40$  et  $N = 20$ . D'autre part, une autre découverte expérimentale et théorique est la fusion des îlots d'inversions à  $N = 20$  et à  $N = 28$ . A cause de la forte similitude entre les régions riches en neutrons à  $N = 20$  et  $N = 40$ , on peut alors se demander si un même phénomène peut se reproduire entre  $N = 40$  et  $N = 50$  c'est-à-dire l'extension de la région de déformation depuis  $N = 40$  jusqu'à  $N = 50$ . Récemment, de nouvelles mesures expérimentales dans les isotopes de chromes et fers jusqu'à  $N = 42$  et  $N = 46$  respectivement semblent confirmer cette supposition.

Pour étudier la physique des noyaux autour du  $^{78}\text{Ni}$ , il faut définir un espace de valence suffisamment étendu pour pouvoir décrire simultanément une richesse de phénomènes tels que la sphéricité et la déformation. Pour que les configurations intruses puissent produire de la coexistence de forme dans  $^{78}\text{Ni}$  et des états fondamentaux déformés dans  $^{76}\text{Fe}$  et  $^{74}\text{Cr}$  il s'agit d'un équilibre délicat entre le champ moyen sphérique et les corrélations quadrupole-quadrupole. En particulier les corrélations quadrupolaires peuvent se développer à la fois pour les protons et les neutrons dans des espaces complet d'oscillateur harmonique où la symétrie  $SU3$  ainsi que ses formes dérivées *Quasi-SU3* et *Pseudo-SU3* sont actives. L'espace naturel apparaît comme celui composé de la couche  $pf$  pour la protons et de la couche  $sdg$  pour les neutrons au dessus d'un coeur virtuel de  $^{60}\text{Ca}$  voir Fig 4.4. Dans la pratique, l'interaction effective utilisée comporte tous les éléments de matrice de l'espace complet  $pf$ - $sdg$  mais les neutrons de la couche  $pf$  seront dans un premier temps toujours bloqués. L'interaction effective utilisée est basée sur le potentiel nucléon-nucléon de la référence [17] et régularisée et renormalisée avec les techniques de la référence [61]. La partie monopolaire a été modifiée de manière

à reproduire les évolutions des gaps à l'intérieur de notre espace de valence. L'Hamiltonien monopolaire peut s'illustrer au travers des énergies individuelles effectives (ESPE) qui peuvent être considérées comme l'évolution du champ moyen sphérique dans l'espace de valence. Sur la Fig. 4.5, le fait le plus marquant à  $N = 50$  est la réduction du gap neutron entre  $Z = 28$  ( $^{78}\text{Ni}$ ) et  $Z = 20$  ( $^{70}\text{Ca}$ ). Les calculs sous contraintes et les surfaces d'énergie potentielle correspondantes sont présentées dans la Fig. 4.6 pour les isotopes de nickels, dans la Fig. 4.7 pour les isotopes de fers et dans la Fig. 4.8 pour les isotopes de chromes.

Les isotopes de nickels sont caractérisés par des minima sphériques, et le noyau  $^{78}\text{Ni}$  en particulier est prédit comme doublement magique. On peut néanmoins remarquer la présence à la fois pour le  $^{76}\text{Ni}$  et le  $^{78}\text{Ni}$  de minima excités déformés. En revanche, les isotopes de fers et de chrome sont tous prédits déformés. Les isotopes de chromes montrent des minima fortement déformés ( $\beta \sim 0.3 - 0.35$ ) à symétrie axiale prolate. Les isotopes de fers ont quant à eux des surfaces d'énergie potentielle plus complexes, dans la mesure où ils se situent à la transition entre le régime sphérique des nickels et celui très clairement rotationnel des chromes. Le  $^{76}\text{Fe}$  en particulier présente deux minima, un oblate et un prolate reliés par le degré de liberté triaxial  $\gamma$  [62].

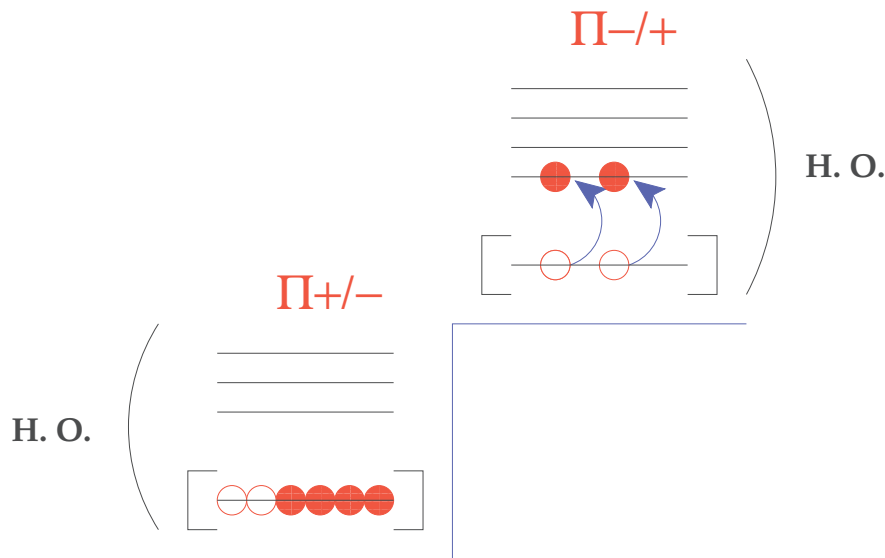


FIGURE 4.4 – Espace de valence  $pf$ - $sdg$ .

4.6. Déformation pour les noyaux riches en neutrons en  $N = 46, 48, 50$  49

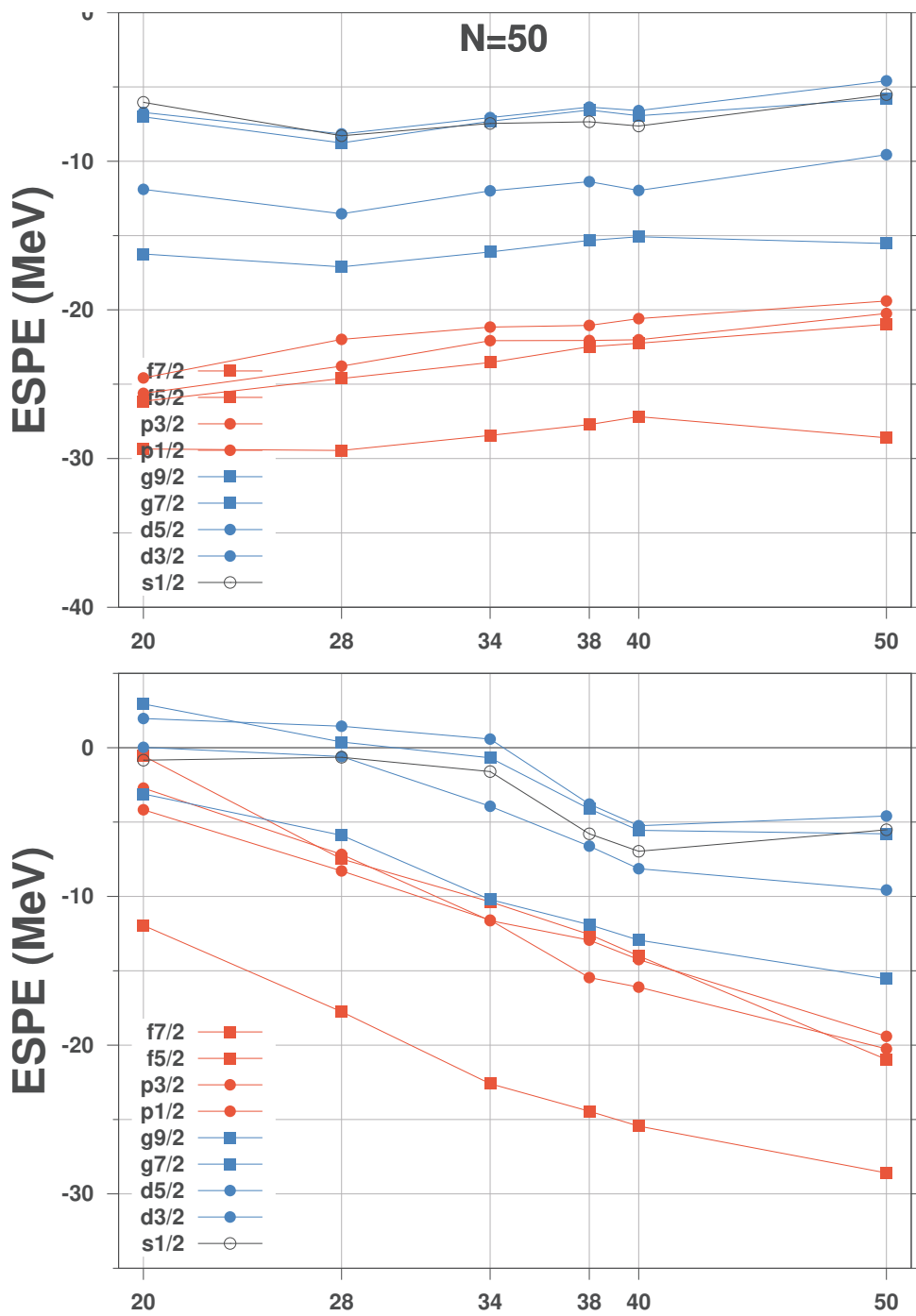
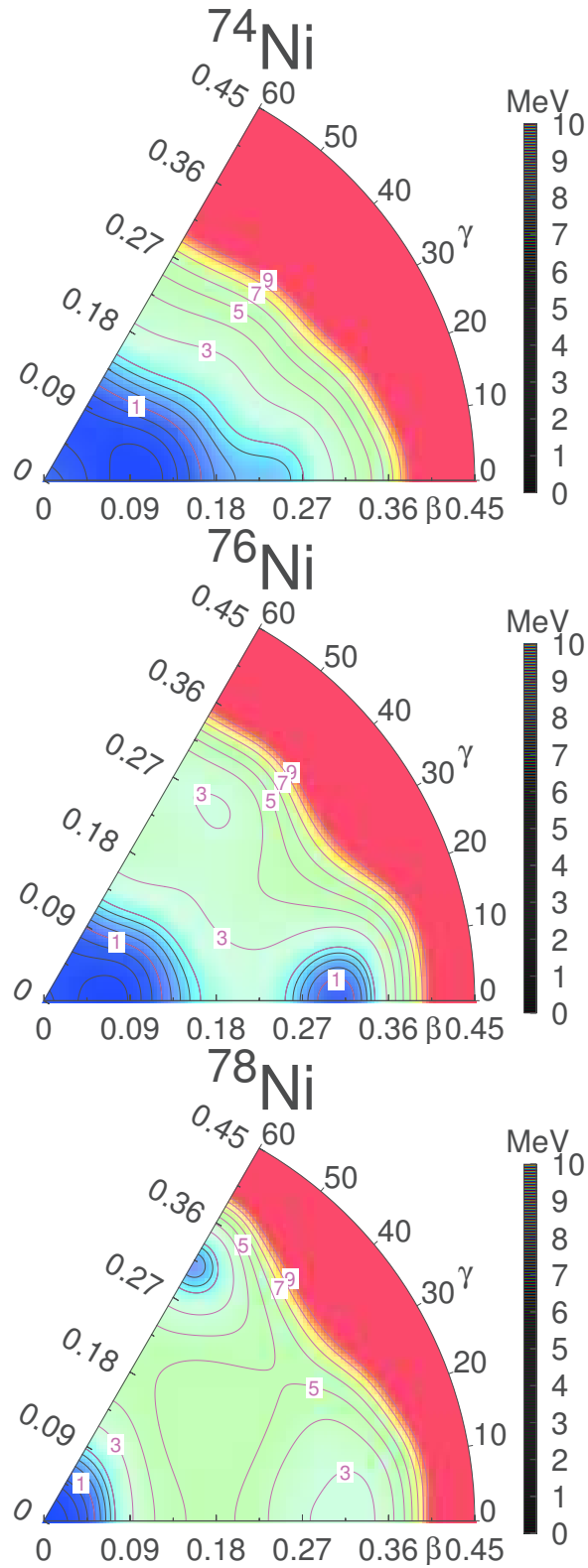


FIGURE 4.5 – Energies Individuelles Effectives proton (en haut) et neutron (en bas) à  $N=50$

FIGURE 4.6 – Surfaces d'énergie potentielle pour les isotopes de nickel, la séparation des lignes du contour est 1 MeV, 0.25 MeV pour les lignes pointillées, [62].



#### 4.6. Déformation pour les noyaux riches en neutrons en $N = 46, 48, 50$ 51

FIGURE 4.7 – Surfaces d'énergie potentielle pour les isotopes de fer, la séparation des lignes du contour est 1 MeV, 0.25 MeV pour les lignes pointillées, [62].

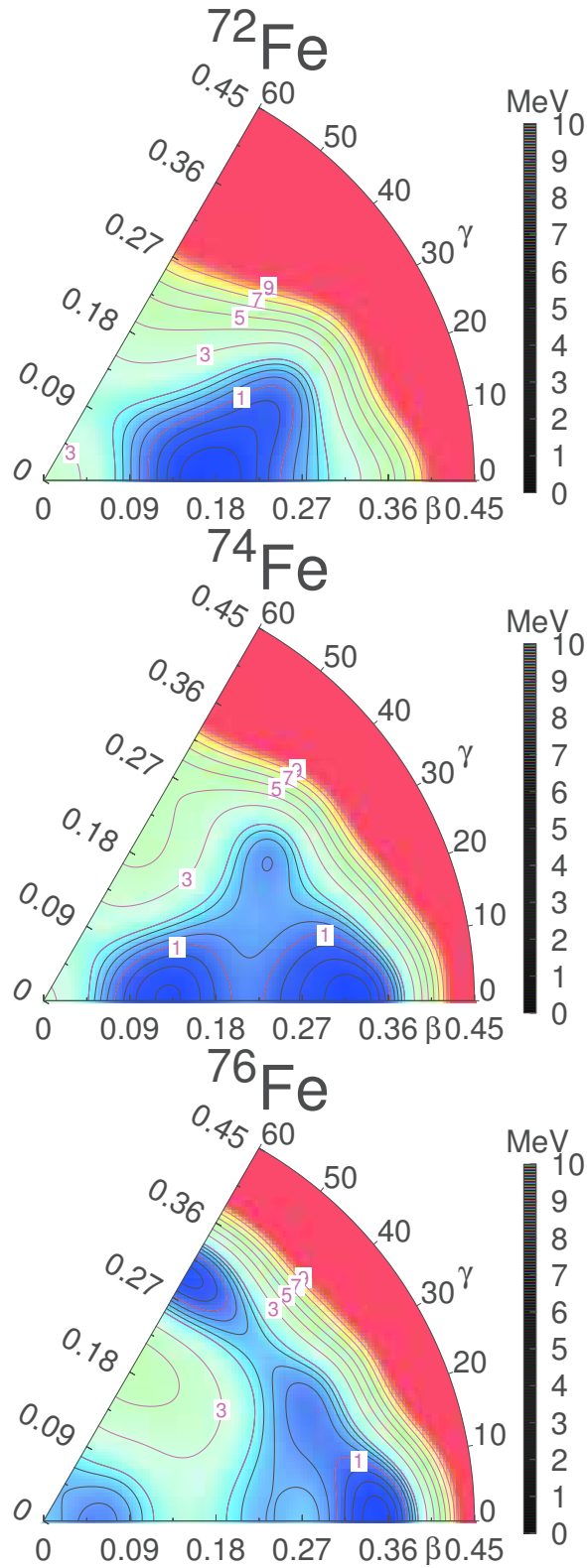
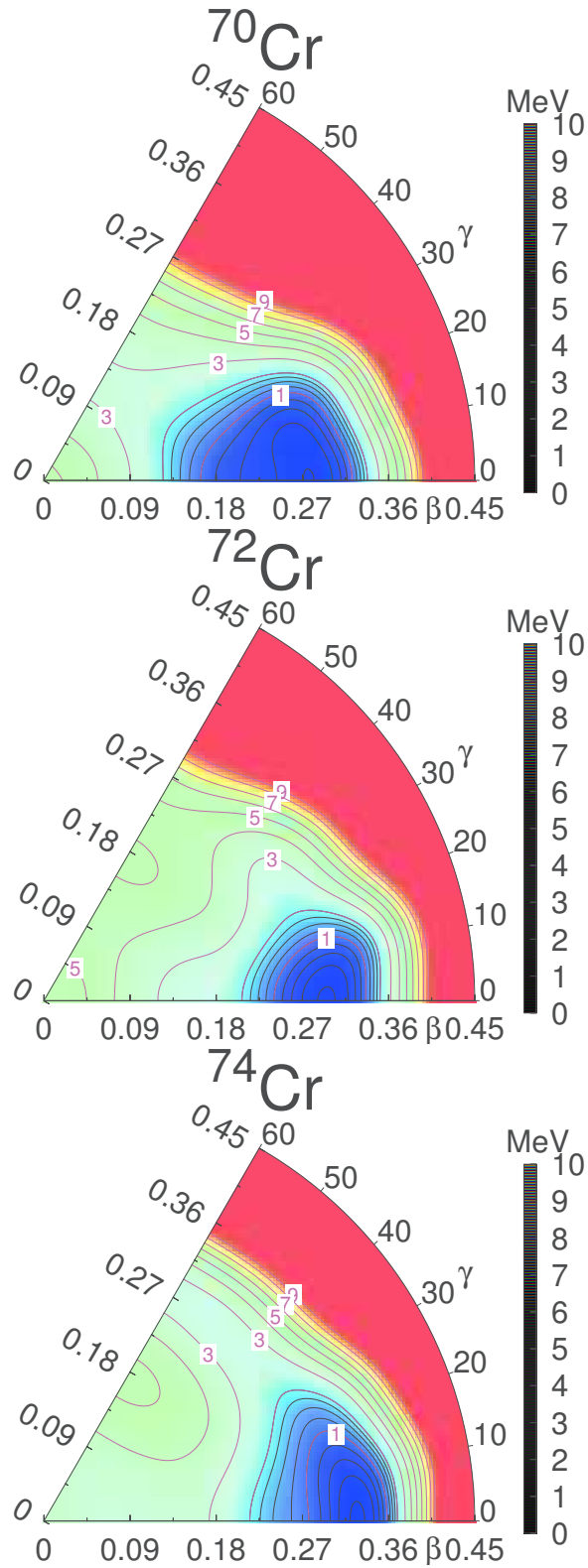


FIGURE 4.8 – Surfaces d'énergie potentielle pour les isotopes de chrome, la séparation des lignes du contour est 1 MeV, 0.25 MeV pour les lignes pointillées, [62].



#### 4.6. Déformation pour les noyaux riches en neutrons en $N = 46, 48, 50$ 53

Nous passons maintenant à la comparaison avec les diagonalisations exactes du modèle en couches. Pour maintenir des tailles de matrices qui restent accessibles numériquement nous avons dans certains cas, adopté un schéma de troncation de l'espace de valence en termes d'excitations particule-trou au travers des gaps  $Z = 28$  et  $N = 50$ . Typiquement, les résultats obtenus sont convergés à partir de 8 excitations particule-trou. Néanmoins les isotopes de chromes ont été calculés dans la base complète. Les résultats spectroscopiques sont indiqués dans la Tab. 4.3. Pour pouvoir interpréter ces résultats mais aussi comparer aux calculs Hatree-Fock déformés, il est habituel dans le contexte du modèle en couches, de passer de la description dans le repère du laboratoire au repère intrinsèque au travers des relations Eq. (4.14) avec :

$$Q_i = \frac{(J+1)(2J+3)}{3K^2 - J(J+1)} Q_s(J), \quad K \neq 1, \quad (4.15)$$

Pour ces cas déformés,  $\overline{Q_i^m}$  est la moyenne des moments intrinsèque obtenus de la transition B(E2) et du moment quadrupolaire spectroscopique  $Q_s$ .

TABLE 4.3 – Propriétés E2 calculées des états Yrast des isotopes  $N = 46 - 50$ . Les paramètres de déformations obtenues par minimisation Hartree-Fock voir Fig. 4.8, Fig. 4.7

	$E^*(2_1^+)$ (MeV)	$Q_s$ (e.fm <sup>2</sup> )	BE2↓ (e <sup>2</sup> .fm <sup>4</sup> )	$\overline{Q_i^m}$ (e.fm <sup>2</sup> )	$\beta^m$
<sup>70</sup> Cr	0.30	-41	420	340	0.26
<sup>72</sup> Cr	0.23	-48	549	407	0.30
<b><sup>74</sup>Cr</b>	<b>0.24</b>	<b>-51</b>	<b>630</b>	<b>552</b>	<b>0.39</b>
<sup>72</sup> Fe	0.44	-36	316	289	0.21
<sup>74</sup> Fe	0.47	-39	330	308	0.22
<sup>76</sup> Fe	0.35	-39	346	320	0.25

## 4.7 Structure des états de basse excitation du noyau

### $^{140}\text{Sm}$

Des calculs modèle en couches ont été réalisés dans l'espace de valence  $1g_{7/2}$ ,  $2d_{5/2}$ ,  $2d_{3/2}$ ,  $3s_{1/2}$  et  $1h_{11/2}$  à la fois pour les protons and neutrons, au dessus d'un coeur inerte de  $^{100}\text{Sn}$ . L'interaction effective **GCN5082** [63] est une interaction réaliste obtenue à partir d'une matrice G renormalisée et corrigée avec des contraintes phénoménologiques monopolaires et utilisée dans des travaux précédents [64, 65, 66], Pour la description des états de base excitation pour les noyaux  $50 \leq N, Z \leq 82$ . Le système considéré avec 12 protons et 4 trous neutrons constitue un challenge numérique pour une diagonalisation directe avec des dimensions de base en schéma-m  $\sim O(186.10^9)$ , à la limite de nos capacités numériques actuelles. Pour réduire les dimensions des matrices à traiter, nous introduisons un schéma de troncation par rapport aux excitations vers l'orbitale  $1h_{11/2}$ , et incluons toutes les excitations neutron et 4 protons maximales vers l'orbitale  $1h_{11/2}$ . La figure Fig. 4.9 représente le spectre de basses excitations calculé et comparé aux nouvelles données expérimentales obtenues récemment par excitation coulombienne par le groupe d'Oslo d'Andreas Görger auprès de REX-ISOLDE au CERN [8].

Un bon accord est obtenu à la fois pour les états Yrast et Yrare, notamment la présence d'une second état excité  $2^+$  à basse énergie d'excitation. Les taux de transitions E2 calculés avec une charge effective de polarisation de  $0.65e$  sont indiqués dans la Tab. 4.4 et en très bon accord avec les données expérimentales. Plusieurs propriétés caractéristiques peuvent être relevée pour les états  $2_2^+$  et  $3_1^+$  qui supportent l'interprétation d'une bande  $K = 2$  vibrationnelle  $\gamma$  :

- le moment quadrupolaire  $Q_s(2_1^+)$  est plus ou moins égal et de signe opposé à  $Q_s(2_{+2})$ ,
- le moment quadrupolaire  $Q_s(3_1^+) \simeq 0$ ,
- l'état  $3_1^+$  est connecté par une large transtion à l'état  $2_2^+$

Comme dans la section précédente, nous reions les observables du modèle en couches dans le laboratoire au repère intrinsèque au travers des relations Eq. (4.14) et Eq. (4.15).

Ces relations ne permettent pas de caractériser une déformation quadrupolaire axiale caractérisée par un bon nombre quantique  $K$ . Ceci se traduit par une forte



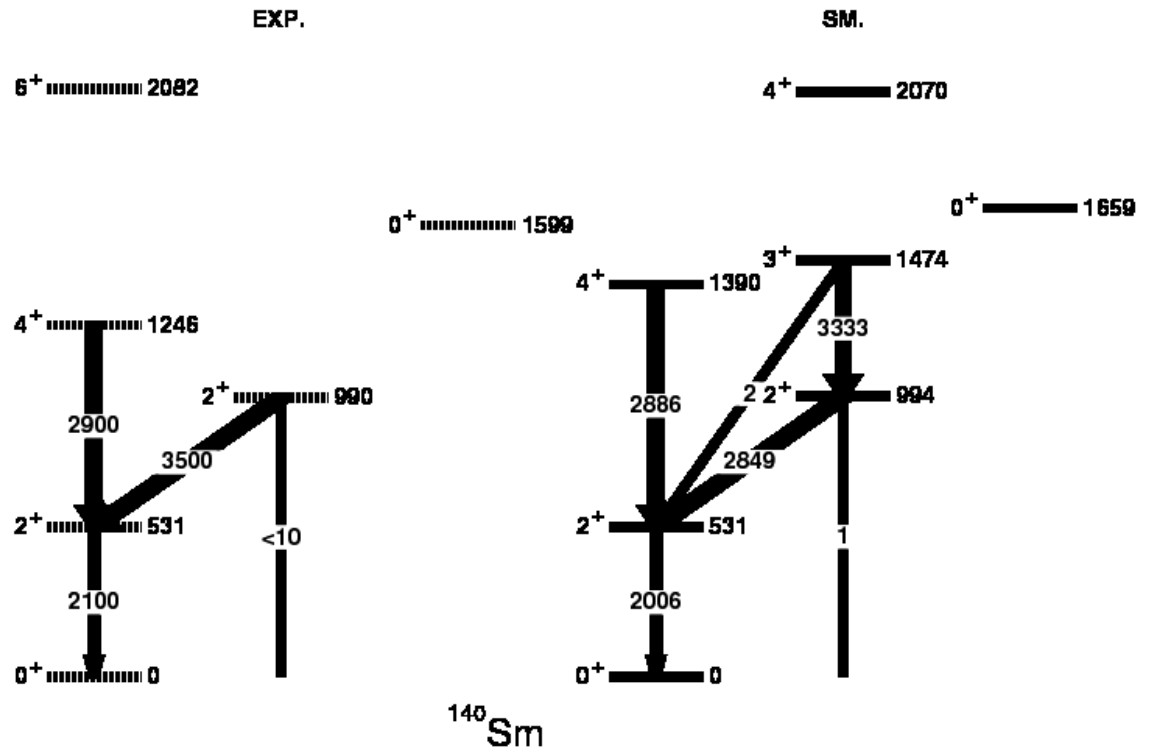


FIGURE 4.9 – Calcul modèle en couches des énergies des bandes Yrast et Yrare (MeV) et taux de transition E2 en ( $e^2\text{fm}^4$ ) pour le  $^{140}\text{Sm}$  [8].

transition E2 entre les deux états  $2_1^+$  et  $2_2^+$ . Les calculs Hartree-Fock contraints réalisés avec le même Hamiltonien confirment la présence d'un minimum triaxial pour  $\beta \sim 0.17$  et  $\gamma \sim 26.5^\circ$ , correspondant à un moment quadrupolaire intrinsèque  $Q_i = 383 \text{ efm}^2$  voir Fig. 4.10, les occupations des orbites sphériques voir dans Tab. 4.5 et comme on a discuté dans chapitre 3, le minimum Hartree-Fock est un minimum absolu, la parité est un bon nombre quantique. Une estimation du degré de triaxialité peut se faire avec le modèle du rotateur triaxial de Davydov et Filippov [67] au travers du rapport des

TABLE 4.4 – Propriétés de déformation du  $^{140}\text{Sm}$ .

$J^\pi$	$2_1^+$	$4_1^+$
$E^*(\text{MeV})\text{exp.}$	0.47	1.25
$E^*(\text{MeV})\text{th.}$	0.53	1.39
$\text{BE2}\downarrow(\text{e.fm}^2)\text{ th.}$	2006	2886
$Q_s(\text{e.fm}^2)$	-10.3	-10.3
$Q_i(\text{e.fm}^2)\text{ from }Q_s$	36	28
$Q_i(\text{e.fm}^2)\text{ from }B(E2)$	138	319

TABLE 4.5 – Occupations des orbites sphériques par rapport à la diagonalisation du modèle en couches

		$2d_{\frac{5}{2}}$	$1g_{\frac{7}{2}}$	$3s_{\frac{1}{2}}$	$2d_{\frac{3}{2}}$	$1h_{\frac{11}{2}}$
HF	p(12)	3.43	5.06	0.49	1.02	2.00
	n(28)	5.87	7.66	1.70	2.79	10.00
SM	p(12)	3.54	5.31	0.46	0.92	1.77
	n(28)	5.29	7.55	1.55	2.70	10.58

transitions  $BE2(2_2^+ \rightarrow 2_1^+)$  et  $BE2(2_2^+ \rightarrow 0_1^+)$ . Dans le cas présent,

$$\frac{BE2(2_2^+ \rightarrow 2_1^+)}{BE2(2_2^+ \rightarrow 0_1^+)} = 1872.5, \text{ ce qui correspond à } \gamma \sim 29.4^\circ \quad (4.16)$$

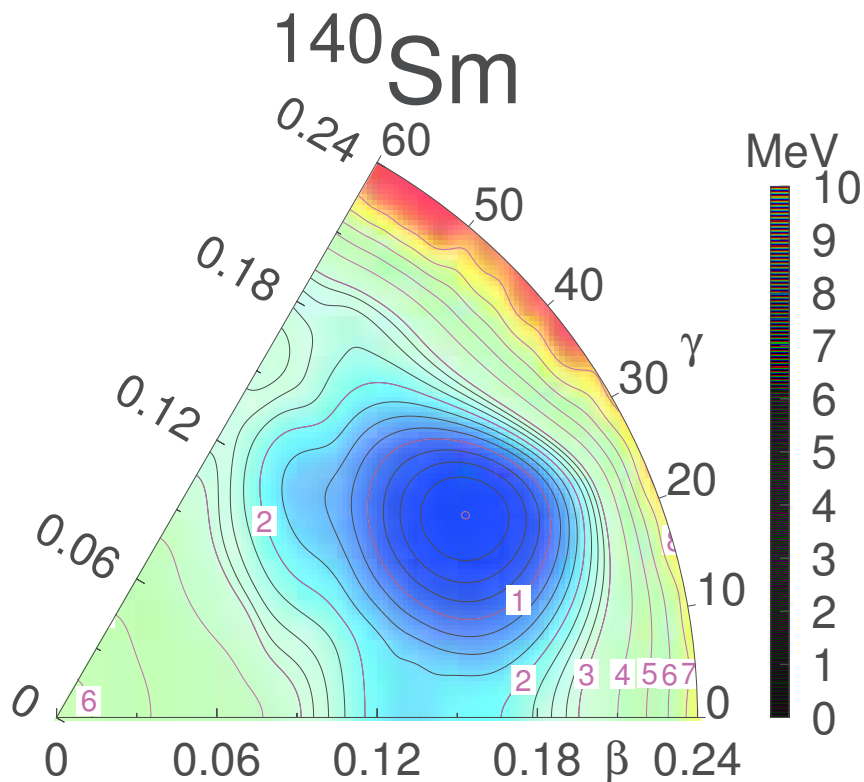


FIGURE 4.10 – Surface d'énergie potentielle de la minimisation Hartree-Fock avec contrainte dans la base du modèle en couches, la séparation des lignes du contour est 1 MeV, 0.25 MeV pour les lignes pointillées.

## 4.8 Collectivité et triaxialité dans $^{42}\text{Ca}$

La première expérience réalisée avec le multidétecteur gamma AGATA concerne l'excitation coulombienne et la recherche de superdéformation dans le noyau  $^{42}\text{Ca}$  auprès du Laboratoire National de Legnaro en Italie [7]. Les données expérimentales ont permis la mise en évidence de deux structures qui coexistent : la bande Yrast sphérique et une bande à basse énergie d'excitation, déformée. Les paramètres de déformation de ces deux bandes ont été extraits des éléments de matrice E2 des transitions entre les premiers états excités.

Dans la continuité de la description des états sphériques, déformés, et superdéformés dans le  $^{40}\text{Ca}$  [68], nous avons entrepris des calculs de modèle en couches dans l'espace constitué des couches :  $2s_{1/2}$ ,  $1d_{3/2}$ ,  $1f_{7/2}$ ,  $2p_{3/2}$ ,  $2p_{1/2}$  et  $1f_{5/2}$  à la fois pour les protons

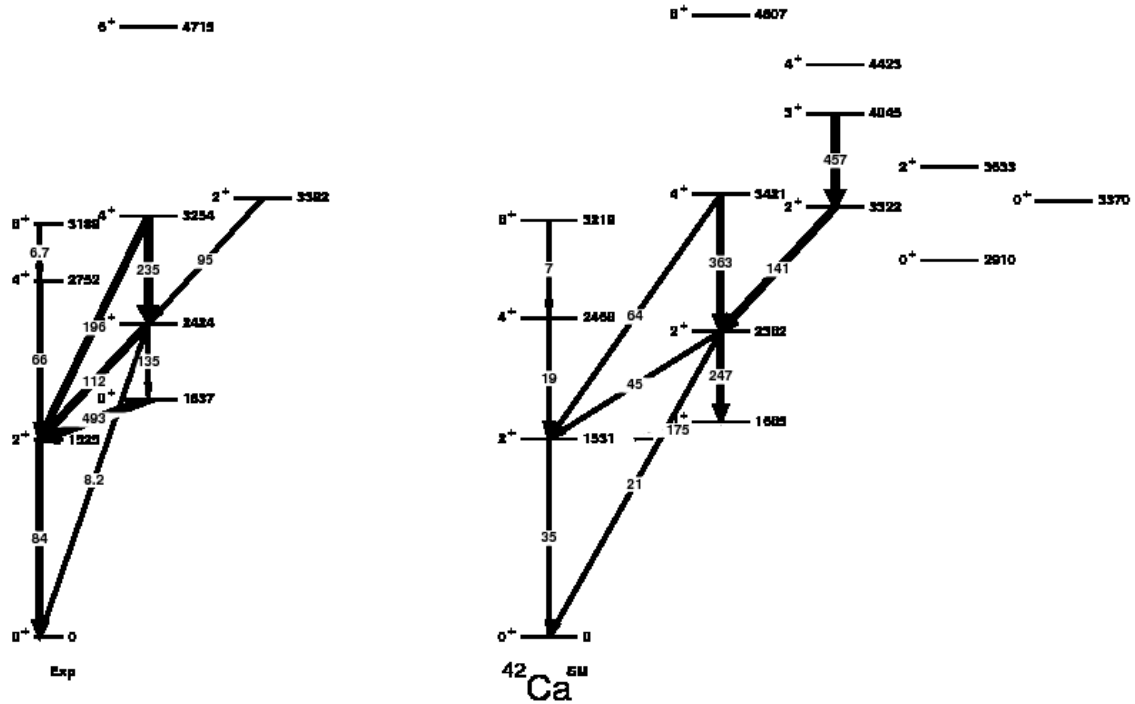


FIGURE 4.11 – Spectres et taux de transition E2 du  $^{42}\text{Ca}$  de l'expérimentale et de la diagonalisation du modèle en couches [7].

and neutrons, au dessus d'un coeur inerte de  $^{28}\text{Si}$ . La surface d'énergie potentielle est représentée dans la Fig. 4.12. Elle montre un premier minimum sphérique puis un second minimum triaxial à  $\beta \sim 0.41$  et  $\gamma \sim 20^\circ$ . Ils correspondent à des configurations 2 particules - 0 trou et 6 particules - 4 trous respectivement. La diagonalisation exacte confirme la nature de ces deux bandes Fig. 4.11, et la présence d'une bande  $\gamma$  bâtie sur l'état  $2_3^+$  et dont la signature est également la présence de l'état  $3_1^+$  reliés par une forte transition E2 entre eux ( $B(E2; 3_1^+ \rightarrow 2_3^+) = 372 \text{ e}^2\text{fm}^4$ ).

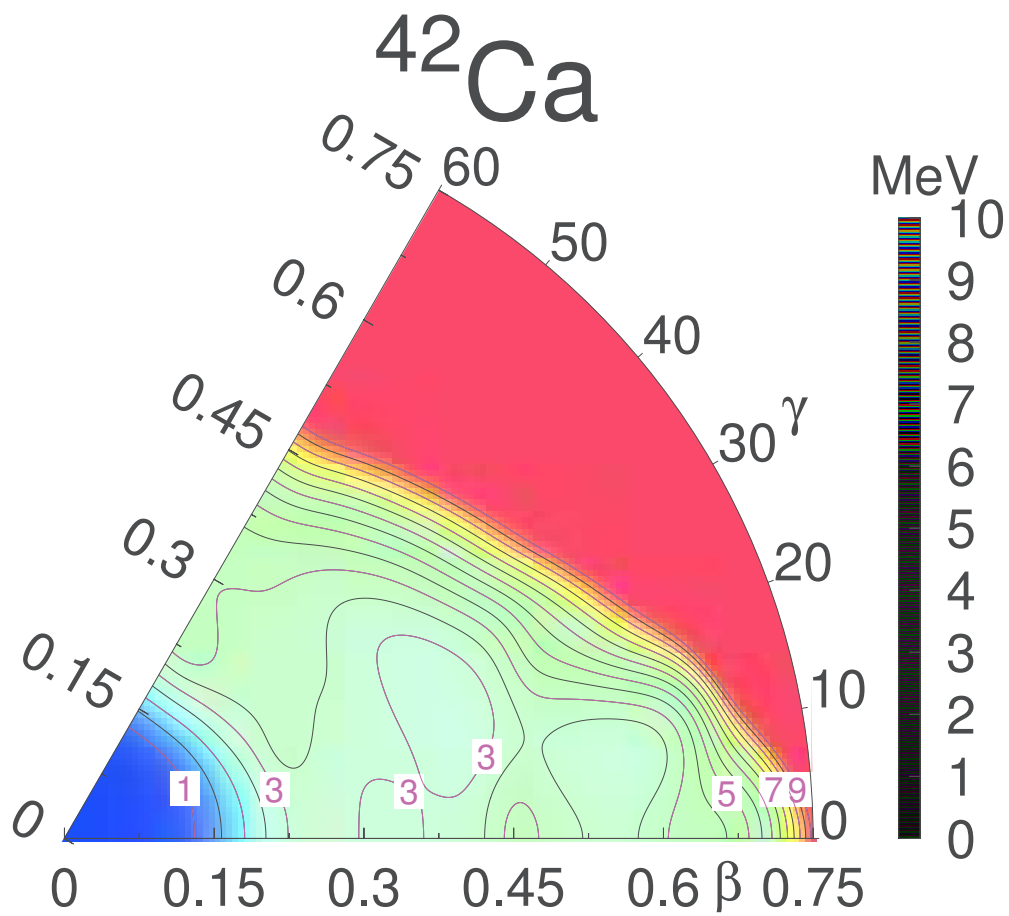


FIGURE 4.12 – Surface d'énergie potentielle de  $^{42}\text{Ca}$ , la séparation des lignes du contour est 1 MeV, 0.5 MeV pour les lignes pointillées [7].



## Chapitre 5

# Restauration du moment angulaire total





Dans ce chapitre, nous allons exposer la méthode de la restauration du moment angulaire total. Les formalismes nécessaires et ainsi que quelques applications pour les noyaux déformés à symétrie axiale seront présentés.

## 5.1 Opérateurs de projection et éléments de matrice

Le déterminant de Slater déformé obtenu par la procédure de Hartree-Fock ne correspond pas à un état physique, mais juste un état pour décrire les états intrinsèques du noyau. La solution de Hartree-Fock brise certaines symétries comme par exemple l'invariance par une rotation dans l'espace : elle n'est pas invariante par une rotation, c'est-à-dire qu'elle n'est pas un état propre des opérateurs  $J^2$  ni de la projection de cet opérateur sur un axe de symétrie.

La méthode de restauration du moment angulaire total est un cas particulier de la méthode des coordonnées génératrices (GCM) [31, 32] et cette méthode sera présentée dans le chapitre 6. Pour avoir un état propre du moment angulaire total  $J$ , on va distinguer deux composants, soient  $M$  la projection du moment angulaire total  $J$  sur le troisième axe de symétrie du système du laboratoire et  $K$  la projection de  $J$  sur l'axe de symétrie ( $OZ$ ) du système intrinsèque.

Partons d'un état intrinsèque déformé  $|\Phi\rangle$ . Cet état n'a pas bon du moment angulaire total, mais on peut extraire de cet état les composantes à un bon moment angulaire total  $J$  et sa projection  $M$  :

$$|\psi_{MK}^J\rangle = \mathcal{P}_{MK}^J|\Phi\rangle \quad (5.1)$$

où  $\mathcal{P}_{MK}^J$  est un opérateur de projection, la définition de cette opérateur peut se trouver dans plusieurs ouvrages par exemple dans [31, 69]

$$\mathcal{P}_{MK}^J = \frac{2J+1}{8\pi^2} \int d\Omega D_{MK}^{J*}(\Omega) \mathcal{R}(\Omega) \quad (5.2)$$

où

- $\Omega = (\phi, \theta, \varphi)$  sont les angles Euler,
- $d\Omega = d\phi \sin\theta d\theta d\varphi$ ,
- $\mathcal{R}(\Omega)$  est l'opérateur de rotation (voir l'appendice Eq. (A.4))
- et  $D_{MK}^J(\Omega)$  est la matrice représentation  $D$  de Wigner (ou la matrice de rotation) voir dans l'appendice Eq. (A.6) [70, 71, 72].

L'opérateur  $\mathcal{P}_{MK}^J$  a les propriétés suivantes :

$$\mathcal{P}_{MK}^J \mathcal{P}_{M'K'}^{J'} = \delta_{JJ'} \delta_{M'K} \mathcal{P}_{MK}^J \quad (5.3)$$

$$(\mathcal{P}_{MK}^J)^\dagger = \mathcal{P}_{KM}^J \quad (5.4)$$

Pour chaque  $J$ , l'énergie totale du système est la valeur moyenne de l'Hamiltonien et définie par :

$$E^J = \frac{\langle \Phi | \mathcal{H} \mathcal{P}_{MK}^J | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \mathcal{P}_{MK}^J | \Phi \rangle} \quad (5.5)$$

- Si  $|\Phi\rangle$  est déterminée par minimisation l'énergie totale Eq. (3.7), on appelle la restauration du moment angulaire par « **Projection Après Varition (PAV)** » [31, 73]
- Si  $|\Phi\rangle$  est déterminée par minimisation l'énergie totale Eq. (5.5), on appelle la restauration du moment angulaire par « **Varition Après Projection (VAP)** » [31, 73, 74, 75], la fonction d'onde  $|\Phi\rangle$  dans Eq. (5.5) est encore un déterminant de Slater, en principe la dernière est plus bonne, mais le calcul est un peu compliqué.

En général le nombre quantique  $K$  n'est pas conservé (par exemple si le déterminant de Slater  $|\Phi\rangle$  est symétrie à triaxiale), et la fonction d'onde peut se définir comme un état de mélange de tous des  $K$  :

$$|\Psi^{JM}\rangle = \sum_K f^{JK} |\psi_{MK}^J\rangle \quad (5.6)$$

On voit que l'Eq. (5.6) est la superposition des fonctions d'onde non-orthogonales de l'Eq. (5.1).

Les coefficients  $f^{JK}$  dans l'Eq. (5.6), quelque fois appelés « poids », sont obtenus par minimisation l'énergie totale du système :

$$\delta E^J = \delta \frac{\langle \Psi^{JM} | H | \Psi^{JM} \rangle}{\langle \Psi^{JM} | \Psi^{JM} \rangle} = 0 \quad (5.7)$$

qui correspond à l'équation générale aux valeurs propres (équation d'intégrale de Hill-Wheeler-Griffin [32, 33]) et lorsque  $\mathcal{P}_{MK}^J$  est l'opérateur de projection et il ne dépend pas du  $M$  voir réf. [69] et l'Hamiltonien  $\mathcal{H}$  est commute avec  $\mathcal{P}_{MK}^J$  et  $\mathcal{R}(\Omega)$

$$\sum_{K'=-J}^J \left( \mathcal{H}_{K'K}^J - E^J \mathcal{N}_{K'K}^J \right) f^{JK'} = 0 \quad (5.8)$$

Pour chaque moment angulaire total  $J$ , les éléments de matrice du recouvrement (ou norme) et de l'Hamiltonien s'écrivent comme :

$$\mathcal{N}_{K'K}^J = \langle \Phi | \mathcal{P}_{K'K}^J | \Phi \rangle = \frac{2J+1}{8\pi^2} \int d\Omega D_{K'K}^{J*}(\Omega) n(\Omega) \quad (5.9)$$

$$\mathcal{H}_{K'K}^J = \langle \Phi | \mathcal{H} \mathcal{P}_{K'K}^J | \Phi \rangle = \frac{2J+1}{8\pi^2} \int d\Omega D_{K'K}^{J*}(\Omega) h(\Omega) \quad (5.10)$$

On utilise la formule générale de Per Olov Löwdin [76, 77] pour calculer la fonction de recouvrement  $n(\Omega)$  et l'Hamiltonien  $h(\Omega)$  dans Eq. (5.9) et Eq. (5.10). Ces deux fonctions doivent se calculer en chaque point de  $\Omega$ . C'est la partie du calcul qui consomme le plus de temps. Les expressions sont les suivantes :

$$n(\Omega) = \langle \Phi | \mathcal{R}(\Omega) | \Phi \rangle = \det(N(\Omega)) \quad (5.11)$$

où la matrice de dimension  $(A \times A)$  de  $N$  est calculée par :

$$[N(\Omega)]_{ij} = [D^\dagger \cdot R(\Omega) \cdot D]_{ij} \quad (5.12)$$

où  $D$  est une matrice rectangulaire dont la colonne est l'ensemble des coefficients  $c_{jm}^\lambda$  (Eq. (3.9)) des orbitales occupées dans  $|\Phi\rangle$  [59, 78] et  $R(\Omega)$  est la matrice de rotation ([70, 71, 72] et voir dans l'appendice A.2) :

$$[R(\Omega)]_{ab} = \delta_{n_a l_a j_a; n_b l_b j_b} D_{m_a m_b}^{j_a}(\Omega) \quad (5.13)$$

où la matrice  $D_{m_a m_b}^{j_a}(\Omega)$  est définie dans l'appendice Eq. (A.6)

$$h(\Omega) = \langle \Phi | \mathcal{H} \mathcal{R}(\Omega) | \Phi \rangle = n(\Omega) \left[ \sum_{ab} \left( t_{ab} + \frac{1}{2} \sum_{cd} \tilde{v}_{acbd} \bar{\rho}_{dc} \right) \bar{\rho}_{ba} \right] \quad (5.14)$$

où la matrice de densité transition ou « mixte »  $\bar{\rho}_{ba}$  s'exprime :

$$\bar{\rho}_{ba} = R(\Omega) \cdot D \cdot N(\Omega)^{-1} \cdot D^\dagger \quad (5.15)$$

le symbole «  $\cdot$  » utilisé dans Eq. (5.12) et Eq. (5.15) indique le produit matriciel.

## 5.2 Réduction d'intervalle des intégrations

En général la dimension de  $\mathcal{N}_{KK'}^J$  et  $\mathcal{H}_{KK'}^J$  est  $(2J + 1)$ . Si l'on tient compte les symétries de l'état intrinsèque (par exemple la symétrie axiale sur l'axe ( $OZ$ ) ou la symétrie par renversement du sens du temps), la dimension de  $\mathcal{N}_{KK'}^J$  et  $\mathcal{H}_{KK'}^J$  sera réduite à  $(J + 1)$ , pour le système des noyaux pair-pair, les valeurs de  $K$  et  $K'$  varient seulement les nombres pairs :  $0, \pm 2, \pm 4, \dots, \pm(J - 1)$  ou  $\pm J$ .

Cas particulier : si  $J$  est impair, ni  $K = 0$  ni  $K' = 0$  ne sont permis, et on ne peut pas projeter l'état  $J = 1$  à partir de ces états intrinsèques [79].

L'intervalle d'intégration sera réduite si on respecte certaines symétries de déterminant de Slater intrinsèque. Par exemple :

les auteurs des réf. [80, 81] qui imposent la symétrie par renversement du temps et la symétrie du group ( $D_2$ ) dans les états intrinsèques, l'intervalle d'intégration est réduite à  $[0, \pi]$  pour  $\phi, \theta$  et  $\varphi$ .

les auteurs des réf. [40, 82, 83, 84] qui imposent la symétrie du renversement du temps et la symétrie symplex dans les états intrinsèques, l'intervalle d'intégration sur  $\phi, \theta$  et  $\varphi$  est réduite à  $[0, \frac{\pi}{2}]$ ,  $[0, \frac{\pi}{2}]$  et  $[0, \pi]$  respectivement.

Dans le calcul numérique, on utilise la quadrature de Gauss-Legendre pour intégrer le recouvrement et l'Hamiltonien Eq. (5.9) et Eq. (5.10). Les nombres des points pour intégration est :  $N_\Omega \geq J_{max} - 1$ , et  $J_{max}$  est le moment angulaire total maximum contenu dans l'état intrinsèque  $|\Phi\rangle$ , [80, 85]. A priori on ne connaît pas  $J_{max}$  mais on peut tester les relations circulaires :

$$1 = \sum_{JK} \langle JKK | JKK \rangle = \sum_{JK} \frac{2J + 1}{8\pi^2} \int d\Omega D_{KK}^{J*}(\Omega) n(\Omega) \quad (5.16)$$

$$E_{HF} = \langle \Phi | \mathcal{H} | \Phi \rangle = \sum_{JK} \langle JKK | \mathcal{H} | JKK \rangle = \sum_{JK} \frac{2J+1}{8\pi^2} \int d\Omega D_{KK}^{J*}(\Omega) h(\Omega) \quad (5.17)$$

Pour les états de grands  $J$ , il peut être nécessaire de doubler le nombre des points  $N_\Omega$ .

### 5.3 Restauration du moment angulaire dans le cas axial

La plupart des noyaux sont déformés à symétrie axiale, c'est un cas qui a été traité fréquemment pour la projection dans l'approximation du champ moyen [28, 29, 31, 86, 87, 88, 89]. Dans ce cas les intégrales sur trois dimensions dans Eq. (5.9) et Eq. (5.10) se réduisent à une dimension sur  $\theta$ , les intégrales sur  $\phi$ ,  $\varphi$  ne jouent pas parce que  $K$  est un bon nombre quantique et  $K = 0$ . En appliquant la symétrie de l'état intrinsèque (symétrie sur l'axe ( $OZ$ ) et symétrie par renversement du temps) et la symétrie de la fonction d de Wigner, l'intervalle d'intégration varie seulement sur  $[0, \frac{\pi}{2}]$

$$\mathcal{N}_{00}^J = \langle \Phi | \mathcal{P}_{00}^J | \Phi \rangle = (2J+1) \int_0^{\frac{\pi}{2}} \sin \theta d\theta d_{00}^{J*}(\theta) n(\theta) \quad (5.18)$$

$$\mathcal{H}_{00}^J = \langle \Phi | \mathcal{H} \mathcal{P}_{00}^J | \Phi \rangle = (2J+1) \int_0^{\frac{\pi}{2}} \sin \theta d\theta d_{00}^{J*}(\theta) h(\theta) \quad (5.19)$$

$$n(\theta) = \langle \Phi | e^{-i\theta \hat{J}_y} | \Phi \rangle \quad (5.20)$$

$$h(\theta) = \langle \Phi | \mathcal{H} e^{-i\theta \hat{J}_y} | \Phi \rangle \quad (5.21)$$

Le coefficient  $f^{J0}$  de l'Eq. (5.6) est calculé par  $f^{J0} = \frac{1}{\sqrt{N_{00}^J}}$  et l'énergie projeté est :

$$E^J = \frac{\int_0^{\frac{\pi}{2}} \sin \theta d\theta d_{00}^{J*}(\theta) h(\theta)}{\int_0^{\frac{\pi}{2}} \sin \theta d\theta d_{00}^{J*}(\theta) n(\theta)} \quad (5.22)$$

### 5.4 Opérateurs de transitions électromagnétiques

Le poids  $f^{JK}$  défini dans Eq. (5.6) donne (pour l'instant  $K = 0$ ) :  $f^J = \frac{1}{\sqrt{N_{00}^J}}$ , lorsque le poids  $f^J$  est déterminé, on peut appliquer pour calculer la probabilité de

transition  $B(E2)$  de l'état initial ( $J_i$ ) à l'état final ( $J_f$ ) et le moment quadrupolaire spectroscopique.

$$B(E2 : J_i \rightarrow J_f) = \frac{e^2}{2J_i + 1} \left| f^{J_f^*} f^{J_i} \langle J_f || \hat{Q}_2 || J_i \rangle \right|^2 \quad (5.23)$$

où  $\langle J_f || \hat{Q}_2 || J_i \rangle$  sont les éléments de matrice réduites de l'opérateur du moment quadrupolaire [88, 89]

$$\langle J_f || \hat{Q}_2 || J_i \rangle = \sqrt{2J_i + 1} \langle J_i 0 2 0 | J_f 0 \rangle Q_{20} \quad (5.24)$$

$$Q_{20} = (2J_i + 1) \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin \theta d_{00}^{J_i}(\theta) \langle \Phi | \hat{Q}_{20} e^{-i\theta \hat{J}_y} | \Phi \rangle \quad (5.25)$$

et le moment quadrupolaire spectroscopique des états  $J$  ( $J_i = J_f$ ) :

$$Q_s(J) = \sqrt{\frac{16\pi}{5}} \frac{\langle J J 2 0 | J J \rangle}{\sqrt{2J + 1}} \left( f^{J^*} \langle J || \hat{Q}_2 || J \rangle f^J \right) \quad (5.26)$$

## 5.5 Applications

### 5.5.1 Spectres des noyaux déformés axiaux de la couche sd

La première application de la restauration du moment angulaire a été faite pour étudier les propriétés de la bande Yrast des noyaux déformés à symétrie axiale de la couche sd :  $^{20}\text{Ne}$ ,  $^{28}\text{Si}$  et  $^{36}\text{Ar}$ . Les résultats des calculs Hartree-Fock avec projection d'un déterminant de Slater Hartree-Fock (état déformé à symétrie axiale) sont présentés dans la Tab. 5.1. On présente dans la même Tab. 5.1, les énergies du minimum Hartree-Fock et de la diagonalisation du modèle en couches, avec l'interaction  $SU(3)$  et USD. Les colonnes 5 et 9 sont les différences en énergies entre l'état fondamental ( $J = 0^+$ ) des calculs Hartree-Fock avec projection et de la diagonalisation du modèle en couches  $\Delta E = |E_{SM} - E_{PHF}|$ . On trouve que l'énergie Hartree-Fock avec projection est très proche de l'énergie de la diagonalisation exacte du modèle en couches. Par exemple, avec l'interaction effective USD, l'énergie totale Hartree-Fock avec projection du  $^{28}\text{Si}$  est plus basse que l'énergie Hartree-Fock sans projection de l'ordre 3.82 MeV et elle est au-dessus l'énergie de la diagonalisation du modèle en couches de l'ordre 2.51 MeV. On pense que la différence en énergie (le dernier chiffre 2.51 MeV) est l'énergie

provient des autres corrélations au-delà du champ moyen sphérique et des corrélations quadrupolaires, c'est-à-dire l'énergie des corrélations d'appariement, et éventuellement pour ce cas  $N = Z$ , de l'effet de brisure d'isospin à l'approximation Hartree-Fock. Les spectres et les probabilité de transition  $B(E2)$  sont présentés dans la Fig. 5.1, les valeurs d'expérimentales sont tirées de la référence [91] et [92]. On constate néanmoins que les corrélations d'appariement agissent de manière perturbative puisque la fonction est correcte et reproduit l'ordre de grandeur des transitions E2.

TABLE 5.1 –  $E_{HF}$  est l'énergie Hartree-Fock déformée,  $E_{PHF}$  est l'énergie Hartree-Fock avec projection ( $J = 0$ ) de l'état axial et  $E_{SM}$  est l'énergie de la diagonalisation du modèle en couches. Les énergies sont en MeV.

Noyaux	$SU(3)$				USD				
	$E_{HF}$	$E_{PHF}$	$E_{SM}$	$\Delta E$	$E_{HF}$	$E_{PHF}$	$E_{SM}$	$\Delta E$	$E_{PHF}^a$
$^{20}\text{Ne}$	-163.11	-166.81	-166.99	0.18	-36.38	-39.56	-40.49	0.93	-39.86
$^{28}\text{Si}$	-213.07	-218.91	-218.99	0.08	-129.61	-133.43	-135.94	2.51	-133.64
$^{36}\text{Ar}$	144.88	141.18	140.99	0.19	-256.56	-228.99	-230.51	1.52	-229.78

<sup>a</sup> résultat de la référence [90]

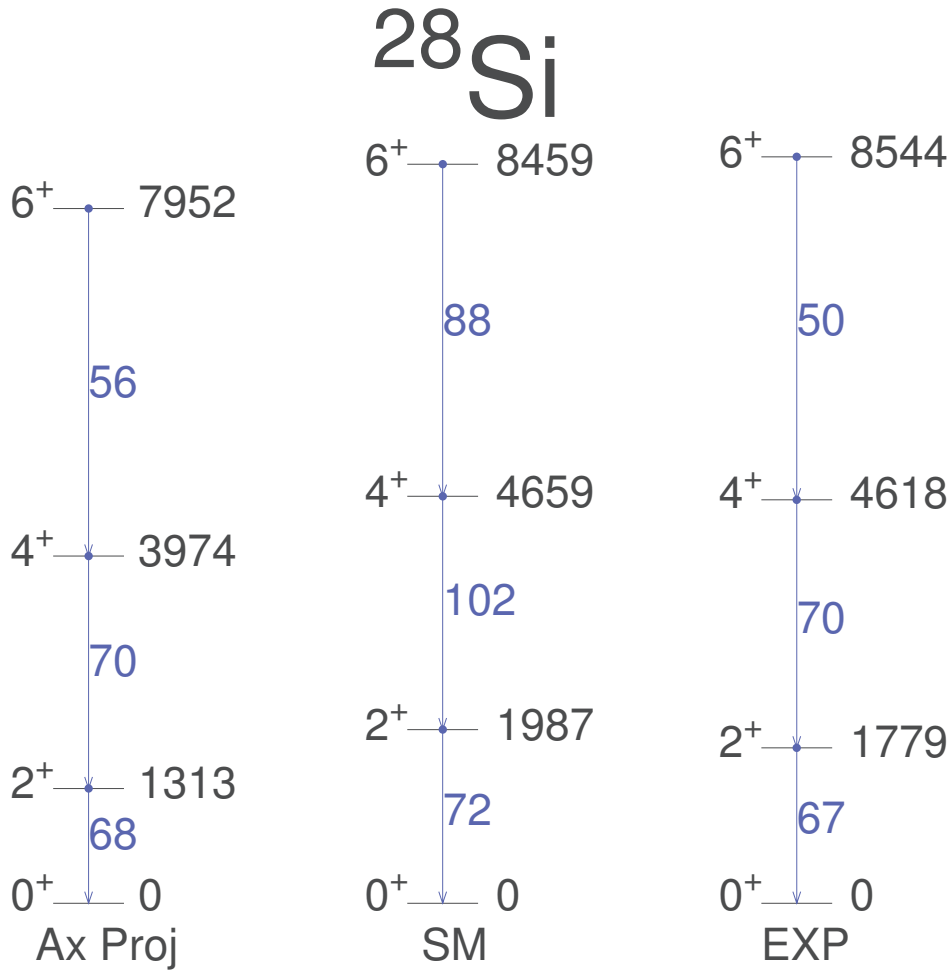


FIGURE 5.1 – Spectre du  $^{28}\text{Si}$  obtenu par projeté d'un état axial (oblate) de Hartree-Fock et la diagonalisation du modèle en couche avec interaction effective USD, l'énergie est en keV et  $B(E2)$  est en  $\text{e}^2\text{fm}^4$ , les valeurs d'expérimentales sont tirés de ref. [91, 92]

### 5.5.2 Bande rotationnelle du $^{20}\text{Ne}$

L'énergie pour les états projetés  $J = 0^+, 2^+, 4^+, 6^+$  et  $8^+$  du  $^{20}\text{Ne}$  avec les interactions  $SU(3)$  et USD sont présentés dans la Fig. 5.2 et comparées avec le résultat de la diagonalisation du modèle en couches. Avec l'interaction USD révèle les mêmes caractéristiques que celui du cas précédent du  $^{28}\text{Si}$ .

Dans la Fig. 5.3, nous avons présenté les courbes d'énergie potentielles des différents  $J$  en fonction des paramètres de déformations de Nilsson  $\alpha_{20}$  ou d'un calcul Hartree-



Fock sous contraintes  $\beta$ . Les résultats dans la Fig. 5.3 nous apprennent deux choses intéressantes : le minimum de chaque  $J$  est différent en fonction des paramètres de déformations d'une part, d'autre part en plus l'énergie est plus liée que l'énergie obtenue par projection d'un minimum de Hartree-Fock [73, 74, 75]. Nous ferons un commentaire un peu plus précis sur ces deux courbes lorsque nous aborderons le cas du  $^{74}\text{Cr}$ .

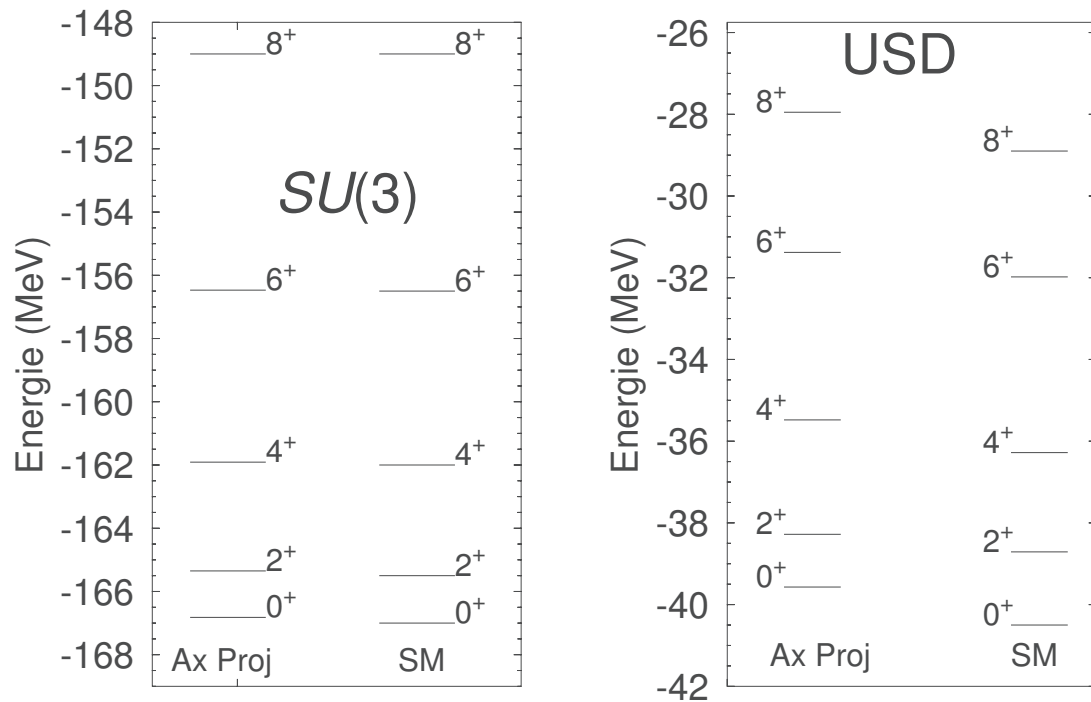


FIGURE 5.2 – Energies du  $^{20}\text{Ne}$  obtenues par les calculs Hartree-Fock avec projection sur  $J^+$  d'un état axial (prolate) et la diagonalisation complète du modèle en couches avec l'interaction  $SU(3)$  et USD.

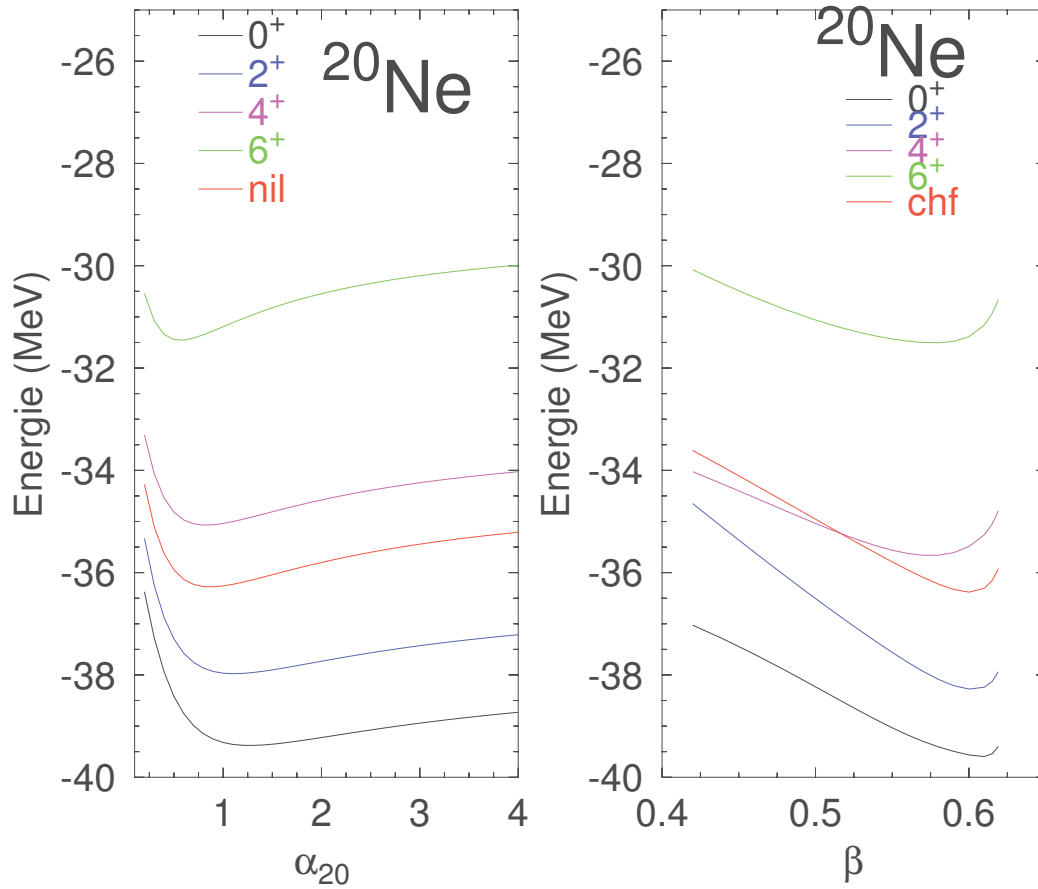


FIGURE 5.3 – Courbe d'énergie potentielle des moments angulaires totaux :  $0^+$ ,  $2^+$ ,  $4^+$ ,  $6^+$  du  $^{20}\text{Ne}$ . Les énergies sont en MeV

### 5.5.3 Bande rotationnelle du $^{74}\text{Cr}$

Après l'étude détaillée de l'îlot d'inversion à  $N = 50$  au chapitre précédent, nous pouvons maintenant projeter l'état Hartree-Fock déformé présenté alors. L'énergie des calculs Hartree-Fock avec projection des états  $J = 0^+$ ,  $2^+$ ,  $4^+$ ,  $6^+$  est présenté dans la Fig. 5.4, comparée à la diagonalisation exacte dans l'espace complet. L'énergie de l'état fondamental est au-dessus de la diagonalisation exacte du modèle en couches seulement 2.3 MeV et on a un beau résultat pour le spectre et les probabilités de transitions. Jusqu'au présent les valeurs expérimentales dans ce noyau n'ont pas encore été observées.

Nous pouvons à présent observer la courbe d'énergie potentielle des états  $J=0^+$ ,  $2^+$ ,  $4^+$ ,  $6^+$  en fonction des paramètres de déformations  $\beta$  dans la Fig. 5.5. Ces courbes sont obtenues par minimisation l'énergie totale de chaque  $J$  avec contrainte. A contrario du cas précédent dans le  $^{20}\text{Ne}$ , le minimum des chaque  $J$  se trouve au même point. Le cas du  $^{74}\text{Cr}$  s'apparente à celui de la limite de très forte déformation où le cas de Variation Après Projection (expression 11.91 de la référence [31]) peut s'approximer à celui de la Projection après Variation (expression 11.92 de la référence [31]).

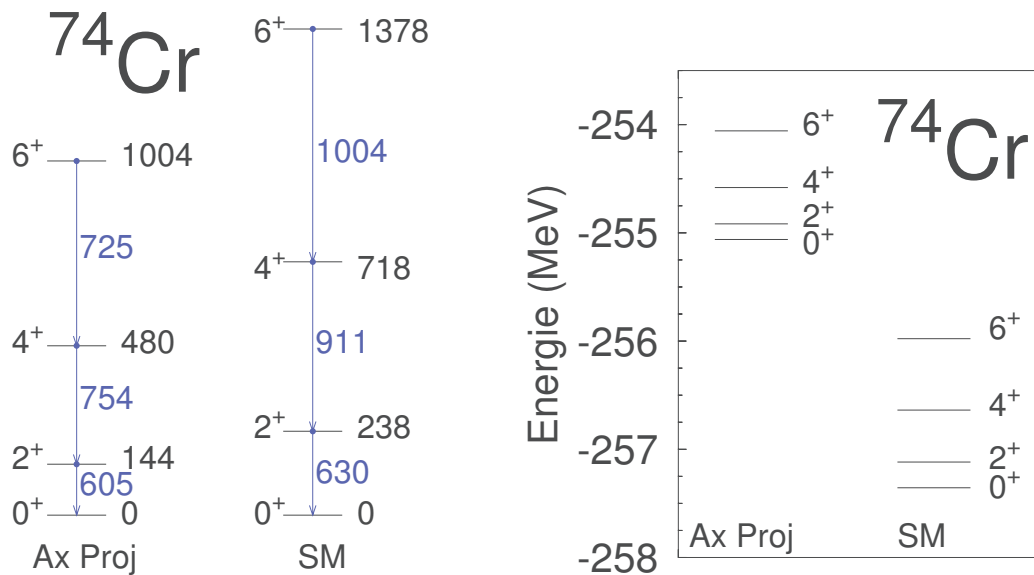


FIGURE 5.4 – Energie et spectre du  $^{74}\text{Cr}$  obtenue par projeté l'état de la symétrie axiale (prolate voir Fig. 4.8) de Hartree-Fock et la diagonalisation du modèle en couches, énergie est en keV et  $B(E2)$  est en  $e^2\text{fm}^4$ .

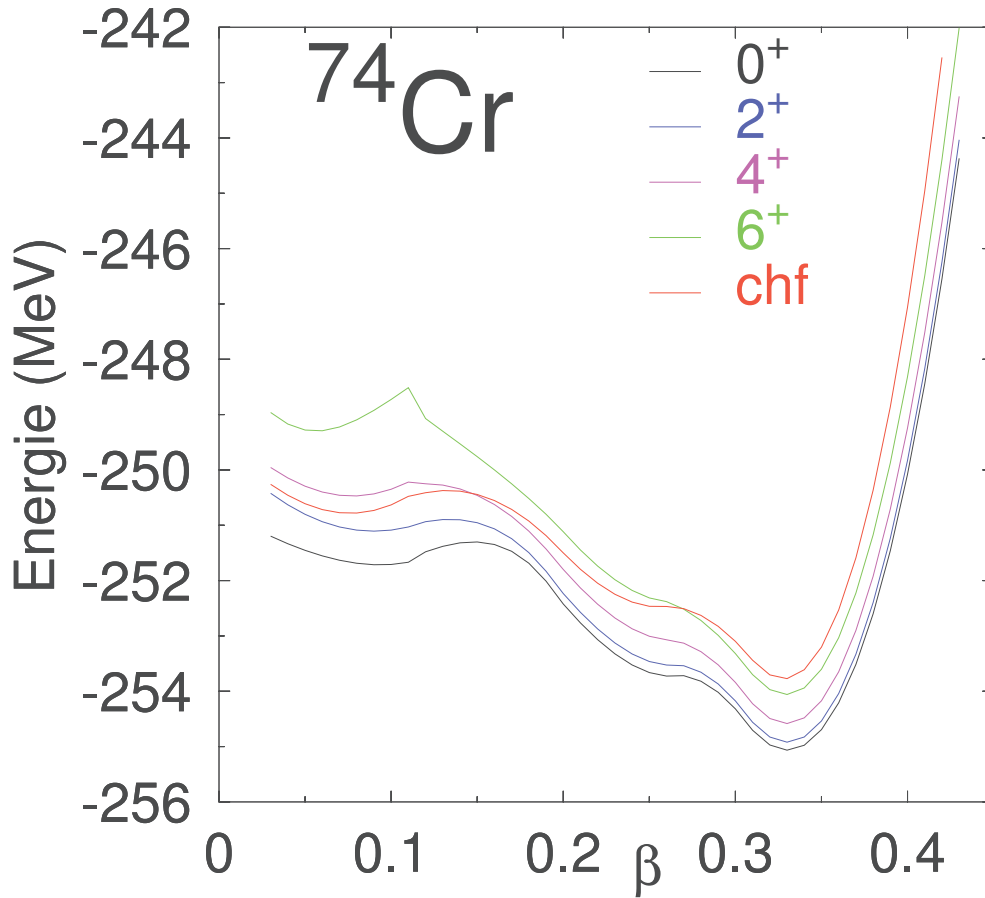


FIGURE 5.5 – Courbe d'énergie potentielle des moments angulaires totaux  $J^\pi$  :  $0^+$ ,  $2^+$ ,  $4^+$ ,  $6^+$  et du champs moyen Hartree-Fock en fonction des paramètres des déformations  $\beta$  du  $^{74}\text{Cr}$ .

#### 5.5.4 Spectres rotationnels de $^{76}\text{Sr}$ et $^{80}\text{Zr}$

Nous présentons maintenant les spectres du  $^{76}\text{Sr}$  et du  $^{80}\text{Zr}$  avec  $J$  pair de 0 à 10. Comme il a été vu dans les surfaces d'énergies potentielles de ces noyaux au chapitre précédent dans la Fig. 4.3, la solution de plus basse en énergie est déformée à symétrie axiale (prolate), les spectres et les probabilités de transitions obtenues par la projection de ces états sont présentés dans la Fig. 5.6 et on a l'occasion de comparer avec les valeurs expérimentales de la référence [57, 92].

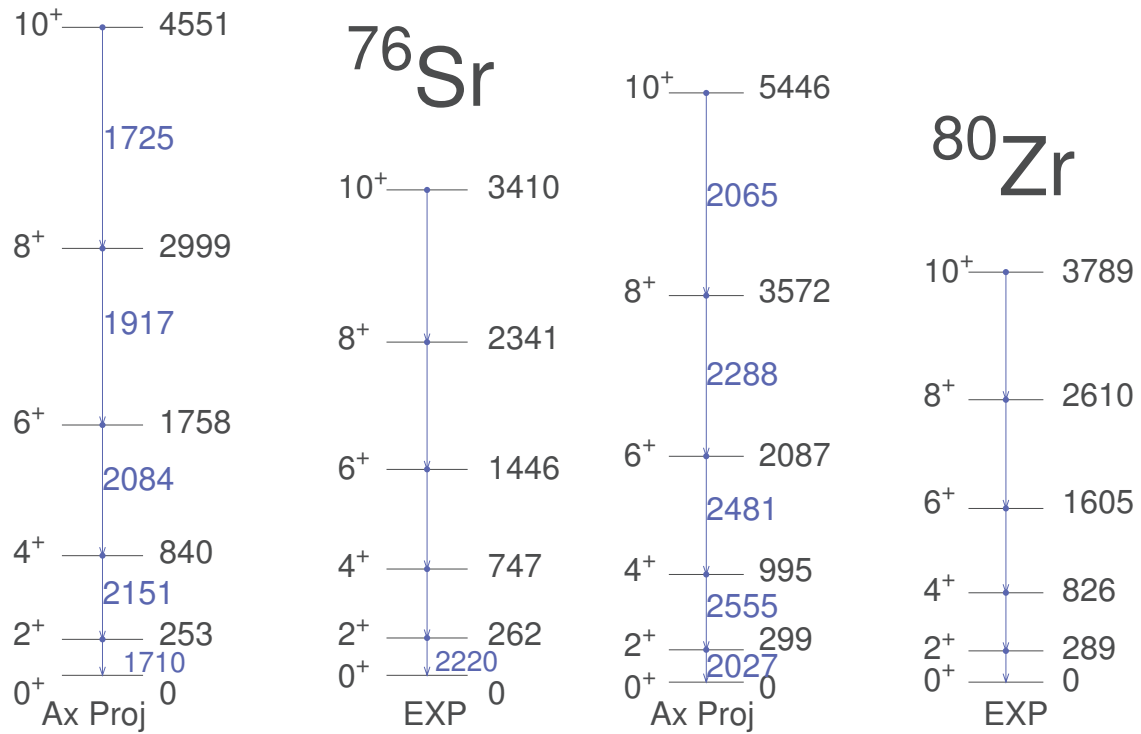


FIGURE 5.6 – Spectres du  $^{76}\text{Sr}$  et  $^{80}\text{Zr}$  obtenue par projeté l'état axial (prolate) de Hartre-Fock avec interaction JUN45.LNPS et les valeurs d'expérimentales sont tirées de [57, 92], énergie est en KeV et  $B(E2)$  est en  $e^2\text{fm}^4$

### 5.5.5 Application dans la région de terres rares

Dans cette section, on va appliquer sur les noyaux plus lourds, qui sont inaccessibles aux diagonalisations exactes du modèle en couches, notamment dans la région de terres rares qui échappent actuellement à toute description de type modèle en couches. Nous utilisons l'espace de valence au-dessus d'un cœur de  $^{132}\text{Sn}$  constitué des couches  $1g_{7/2}$ ,  $2d_{5/2}$ ,  $2d_{3/2}$ ,  $3s_{1/2}$  et  $1h_{11/2}$  pour les protons et des couches  $2f_{7/2}$ ,  $3p_{3/2}$ ,  $1h_{9/2}$ ,  $3p_{1/2}$ ,  $2f_{5/2}$  et  $1h_{13/2}$  pour les neutrons. L'interaction effective est basée sur l'interaction chirale N3LO [93, 94] renormalisée à cet espace de valence et avec contraintes monopolaires phénoménologiques prenant en compte l'influence des forces à trois corps. L'interaction a été utilisée avec succès dans des calculs modèle en couches classiques pour des noyaux proches de  $^{132}\text{Sn}$  jusqu'à la masse  $A \sim 134-146$  [95, 96].

Le premier est celui du  $^{164}\text{Dy}$  présenté dans la Fig. 5.7 et 5.8. Avec 16 protons et 16 neutrons de valence dans l'espace, la base en schéma m correspondrait à plus de  $4.15 \cdot 10^{18}$  déterminants de Slater. Le spectre obtenu est en très bon accord avec les valeurs expérimentales de la bande rotationnelle de la réf. [92, 97, 98]. Cela confirme d'une part le caractère axial de la bande de rotation du  $^{164}\text{Dy}$ , d'autre part que les corrélations d'appariement sont relativement moins importantes dans les noyaux à très forte déformation de masse lourde pour lesquelles les corrélations quadrupolaires dominant.

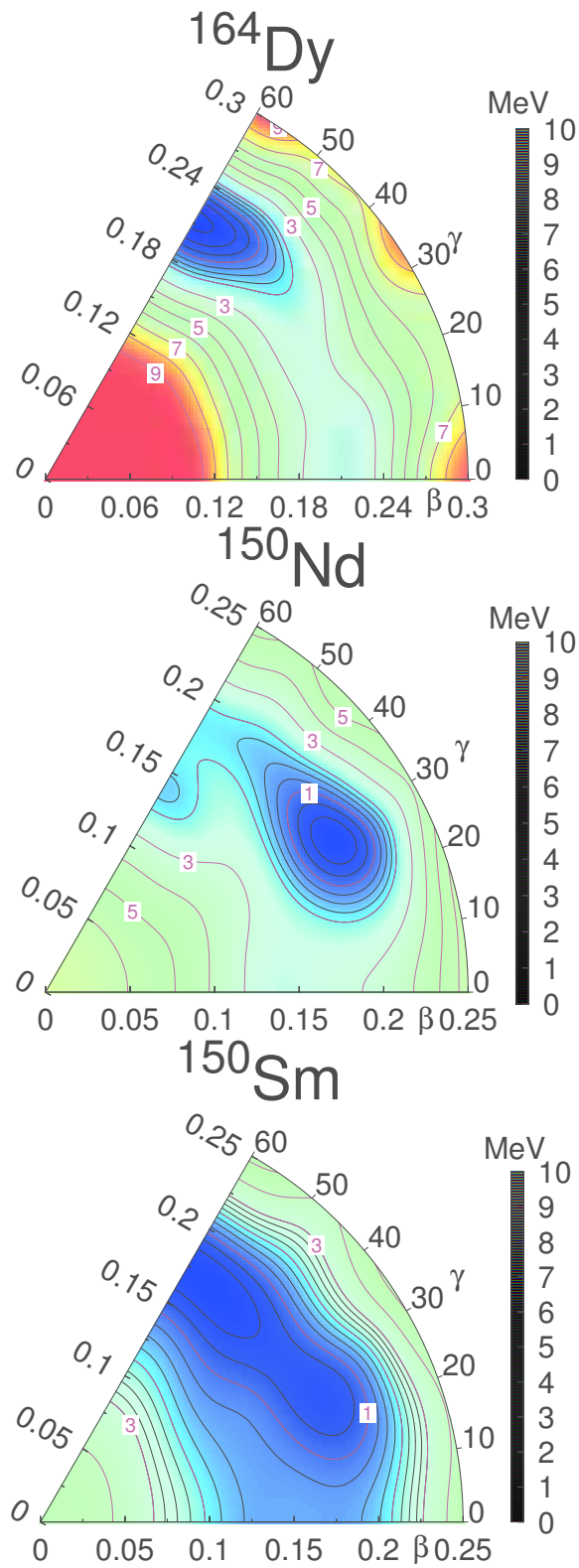


FIGURE 5.7 – Surfaces d'énergies potentielles du  $^{164}\text{Dy}$ ,  $^{150}\text{Nd}$  et  $^{150}\text{Sm}$  avec l'interaction N3LO. La séparation des lignes du contour est 1 MeV, 0.25 MeV pour les lignes pointillées.

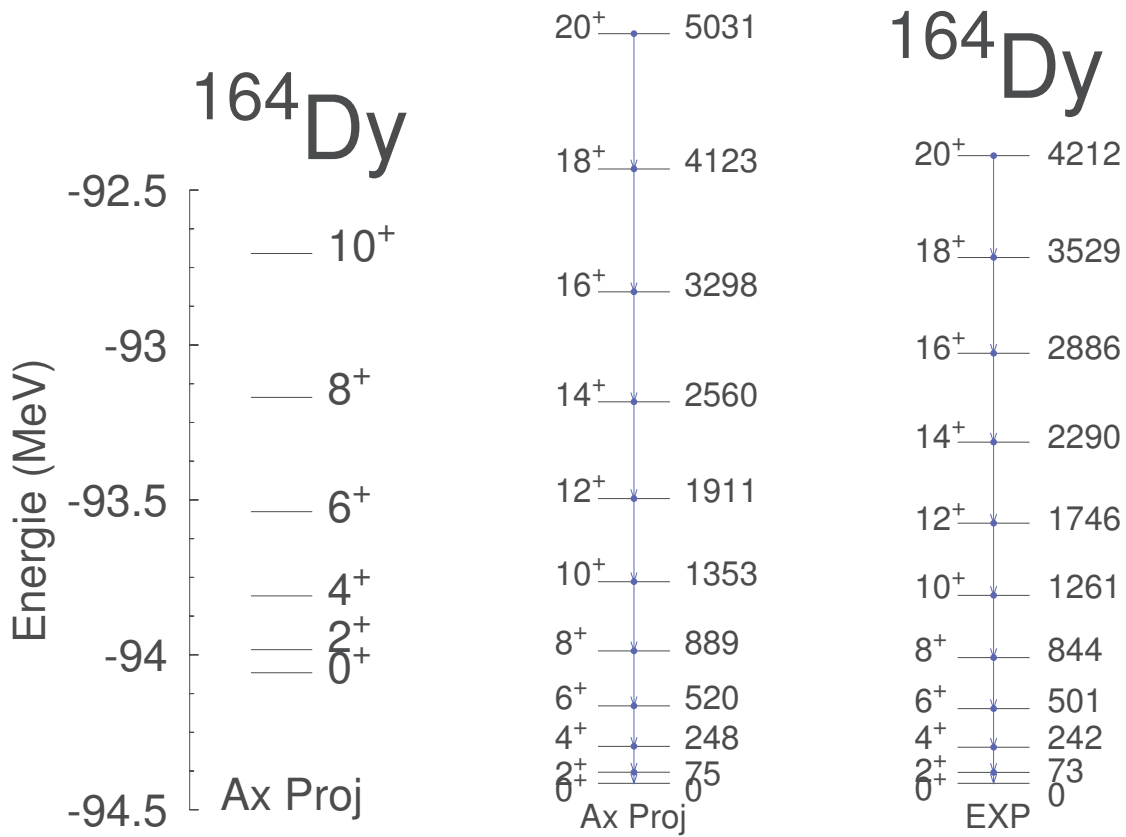


FIGURE 5.8 – Energie absolu projetée de l'état axial Hartree-Fock et spectres du noyau  $^{164}\text{Dy}$ . Les énergies sont en keV, les valeurs expérimentales ont pris de [92, 97, 98].

Les deux derniers cas présentés dans le même espace dont ceux du  $^{150}\text{Nd}$  et du  $^{150}\text{Sm}$  d'un intérêt majeur puisqu'il s'agit des noyaux père et fils du processus  $\beta\beta$ , processus actuellement d'intérêt majeur en physique des particules et en physique du neutrino [99]. Les deux surfaces d'énergies potentielles et spectres obtenus sont présentés dans les Fig. 5.7, 5.9 et 5.10. Les spectres rotationnels calculés montrent un cas relatif avec les spectres expérimentaux :

- dans le cas du  $^{150}\text{Nd}$ , le minimum Hartree-Fock contraint est triaxial Fig. 5.7 et donc la description du spectre devra se faire au-delà du cas axial,
- dans le cas du  $^{150}\text{Sm}$ , le minimum Hartree-Fock contraint est oblate



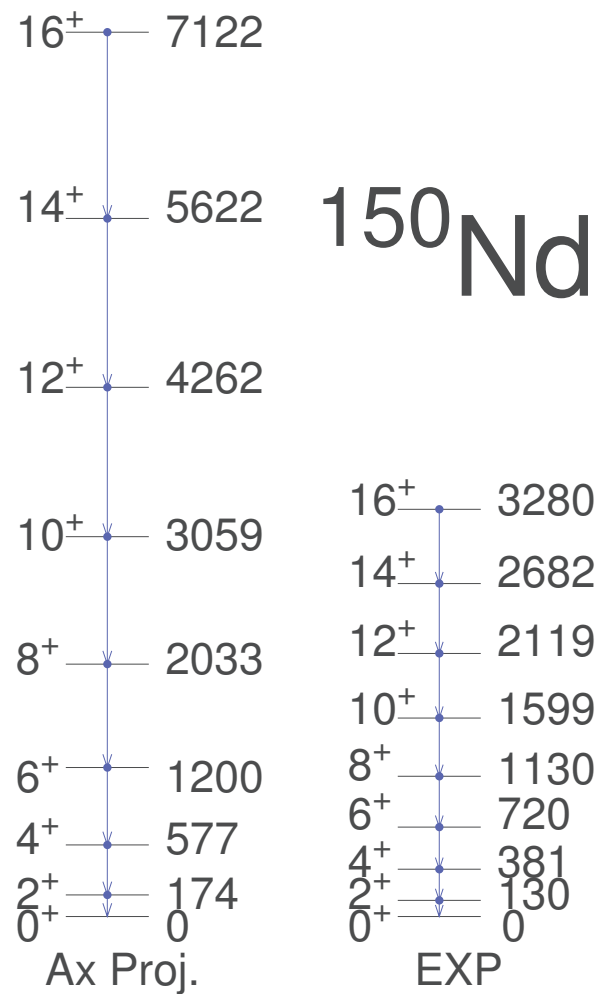


FIGURE 5.9 – Spectres du noyau  $^{150}\text{Nd}$ . Les énergies sont en keV, les valeurs expérimentales ont pris de réf. [92, 100].

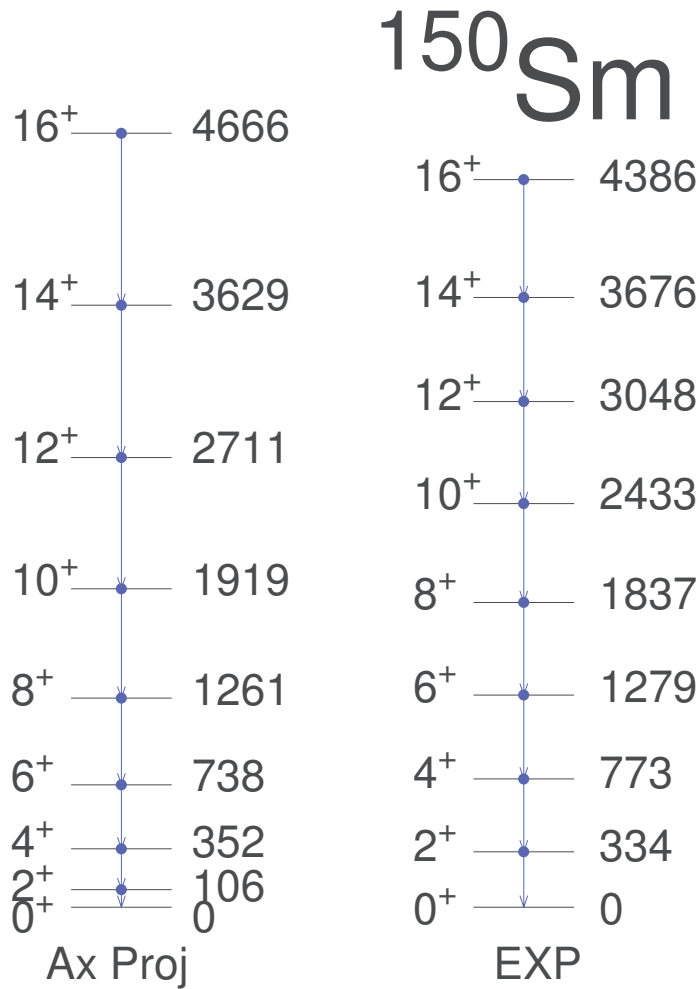


FIGURE 5.10 – Spectres du noyau  $^{150}\text{Sm}$ . Les énergies sont en keV, les valeurs expérimentales ont pris de réf. [92, 99].

### 5.5.6 Application dans la région des noyaux superlourdes

Dans cette section, on va appliquer aux noyaux de la région superlourds qui sont inaccessibles par une diagonalisation exacte du modèle en couches.

Plusieurs études théoriques prédisent la disparition de fermeture de couches pour  $Z = 92$  [101] ainsi qu'un gap assez grand pour les noyaux  $Z = 114$  ou  $Z = 120$  voir Fig. 5.11. Dans la minimisation Hartree-Fock déformée, on prend le  $^{208}\text{Pb}$  comme un cœur inert et l'espace de valence es composé pour les protons :  $1h_{\frac{9}{2}}$ ,  $1i_{\frac{13}{2}}$ ,  $2f_{\frac{7}{2}}$ ,  $2f_{\frac{5}{2}}$ ,  $3p_{\frac{3}{2}}$ ,  $3p_{\frac{1}{2}}$

et pour les neutrons :  $1i_{\frac{11}{2}}$ ,  $1j_{\frac{15}{2}}$ ,  $2g_{\frac{9}{2}}$ ,  $2g_{\frac{7}{2}}$ ,  $3d_{\frac{5}{2}}$ ,  $3d_{\frac{3}{2}}$ ,  $4s_{\frac{1}{2}}$ . L'interaction effective est l'interaction réaliste Kuo-Herling modifiée par Brown et Wildenthal [101, 102, 103].

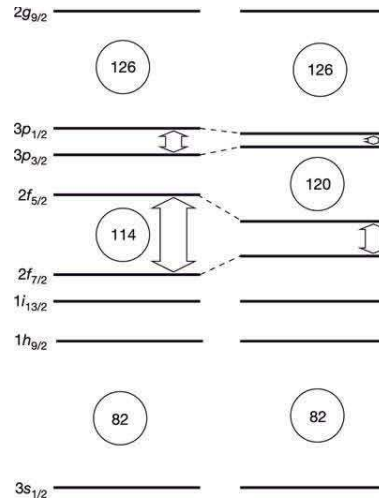


FIGURE 5.11 – Prédiction des positions des orbites sphériques dans la région des noyaux superlourds avec un gap assez grand pour  $Z = 114$  ou  $Z = 120$ . Ce schéma est tiré de [104].

### Bande rotationnelle du $^{254}\text{No}$

Ce noyau est inaccessible par la diagonalisation exacte du modèle en couche. La bande rotationnelle et les états isomériques sont observés expérimentalement voir réf. [104, 105]. Dans son état intrinsèque, le minimum absolu obtenu par les calculs Hartree-Fock est déformé à symétrie axiale de forme prolata avec un paramètre de déformation  $\beta \sim 0.2$ . Notre résultat est bien d'accord avec l'autres calculs du champ moyen réaliste (Self-consistent Realistic Hartree-Fock Bogoliubov) avec l'interaction DD-PC1, qui prédisent un paramètre de déformation  $\beta \sim 0.3$  (voir réf. [106]). Les occupations des orbites sphériques sont présentées dans la table 5.2. On constate que le remplissage des couches se fait principalement pour les trois premiers couches proton et neutron. La surface d'énergie potentielle du  $^{254}\text{No}$  obtenue par les calculs Hartree-Fok sous contrainte est présentée dans la Fig. 5.12, et les spectres rotationnels obtenus par calcul Hartree-Fock avec projection sur l'état axial (prolate) sont présentés dans la figure 5.13. Les valeurs expérimentales sont tirées de la référence [104, 105].

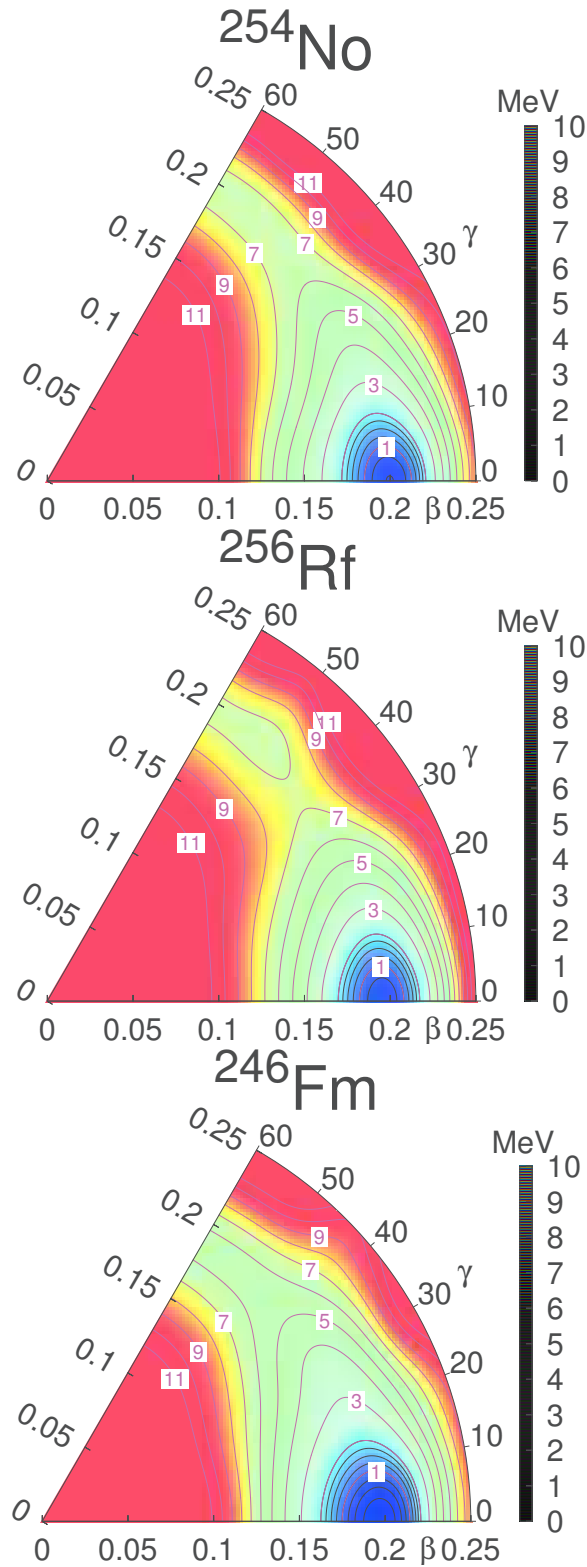


FIGURE 5.12 – Surface d'énergie potentielle du  $^{254}\text{No}$ ,  $^{256}\text{Rf}$  et  $^{246}\text{Fm}$  calculé avec l'interaction effective Kuo-Herling [102, 103], la séparation des lignes du contour est 1 MeV, 0.25 MeV pour les lignes pointillées.

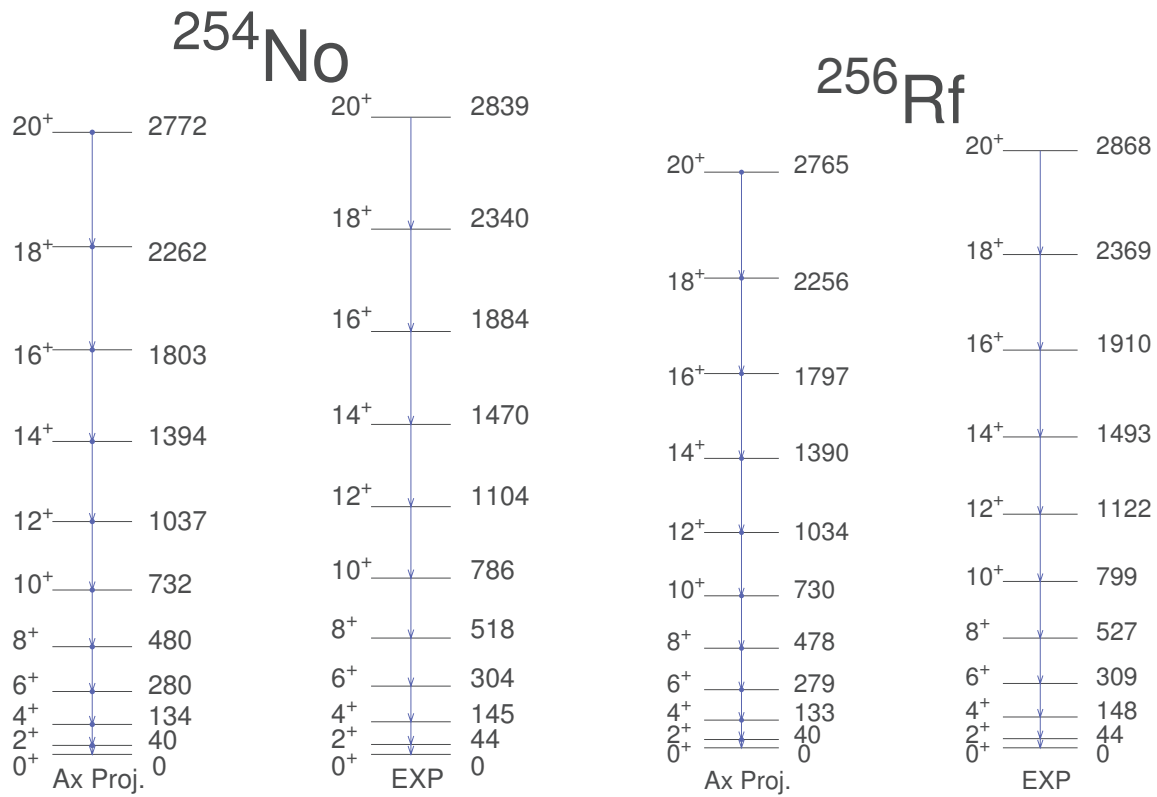


FIGURE 5.13 – Spectres rotationnelles des noyaux  $^{254}\text{No}$  et  $^{256}\text{Rf}$ , obtenus par calculs Hartree-Fock avec projection sur l'état axial prolata, énergie est en KeV, les valeurs expérimentales sont tirées de ref. [104, 105, 107].

### Bande rotationnelle du $^{256}\text{Rf}$

Le  $^{256}\text{Rf}$  est un noyau qui a la structure très similaire à celui du  $^{254}\text{No}$ , la surface d'énergie potentielle et les spectres rotationnelles sont présentés dans la Fig. 5.12 et Fig. 5.13. On voit que les occupations des orbitales sphériques sont remplies principalement les trois premières couches pour protons et neutrons voir Tab. 5.2.

TABLE 5.2 – Occupations des orbites sphériques du minimum Hartree-Fock des noyaux  $^{246}\text{Fm}$ ,  $^{254}\text{No}$  et  $^{256}\text{Rf}$

		$^{246}\text{Fm}$	$^{254}\text{No}$	$^{256}\text{Rf}$
	$1h_{\frac{9}{2}}$	5.62	5.65	7.61
	$1i_{\frac{13}{2}}$	6	8	8
p	$2f_{\frac{7}{2}}$	3.25	3.42	3.46
	$2f_{\frac{5}{2}}$	1.57	1.60	1.59
	$3p_{\frac{3}{2}}$	0.75	0.78	0.77
	$3p_{\frac{1}{2}}$	0.53	0.56	0.56
	$1i_{\frac{11}{2}}$	5.46	7.28	7.30
	$1j_{\frac{15}{2}}$	6	10	10
	$2g_{\frac{9}{2}}$	5.20	5.36	5.43
n	$2g_{\frac{7}{2}}$	1.00	1.01	0.96
	$3d_{\frac{5}{2}}$	1.09	1.10	1.09
	$3d_{\frac{3}{2}}$	0.80	0.83	0.79
	$4s_{\frac{1}{2}}$	0.43	0.42	0.43

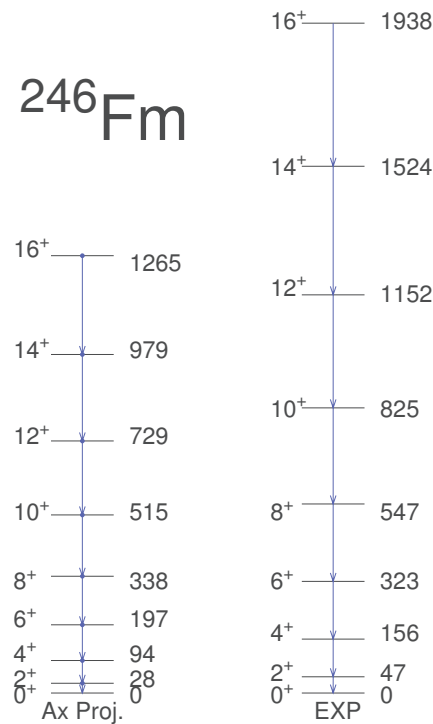


FIGURE 5.14 – Spectres rotationnelles du  $^{246}\text{Fm}$  obtenus par calculs Hartree-Fock avec projection sur l'état axial prolata, énergie est en KeV, les valeurs expérimentales sont tirées de ref. [108].

### Bande rotationnelle du $^{246}\text{Fm}$

Une autre application a été faite pour le noyau  $^{246}\text{Fm}$  avec la même interaction effective et le même espace de valence, la surface d'énergie potentielle et spectres de la bande rotationnelle est présentés dans la figure 5.12 et la figure 5.14. Les occupations des orbitales sphériques sont présentées dans la table 5.2. Les valeurs expérimentales sont tirées de la référence [105, 108].

### Prédiction de la stabilité à $N=184$

Avec l'interaction de Kuo-Herling présente, nous voyons donc qu'il est possible de décrire à la fois les noyaux semi-magiques à  $N=126$  [109] ainsi que les bandes rotationnelles déformées à  $N=152$ . Nous allons maintenant effectuer un calcul systématique des noyaux paires-paires à  $N=184$  de notre espace de valence. L'analyse des énergies indivi-

duelles effectives présentées dans la figure 5.15 indique que l'on s'attend à une double magie pour l'isotope  $Z=114$ . A contrario des isotopes  $N=124$ , à  $N=184$ , l'énergie d'excitation du premier état  $2^+$  est particulièrement haute, par rapport aux isotones avoisinants. Ceci est reflété par l'observation des occupations des orbites individuelles proton qui montre un remplissage complet des couches  $1h_{9/2}$ ,  $2f_{7/2}$  et  $1i_{13/2}$  (voir figures 5.16, 5.17 et la table 5.3).

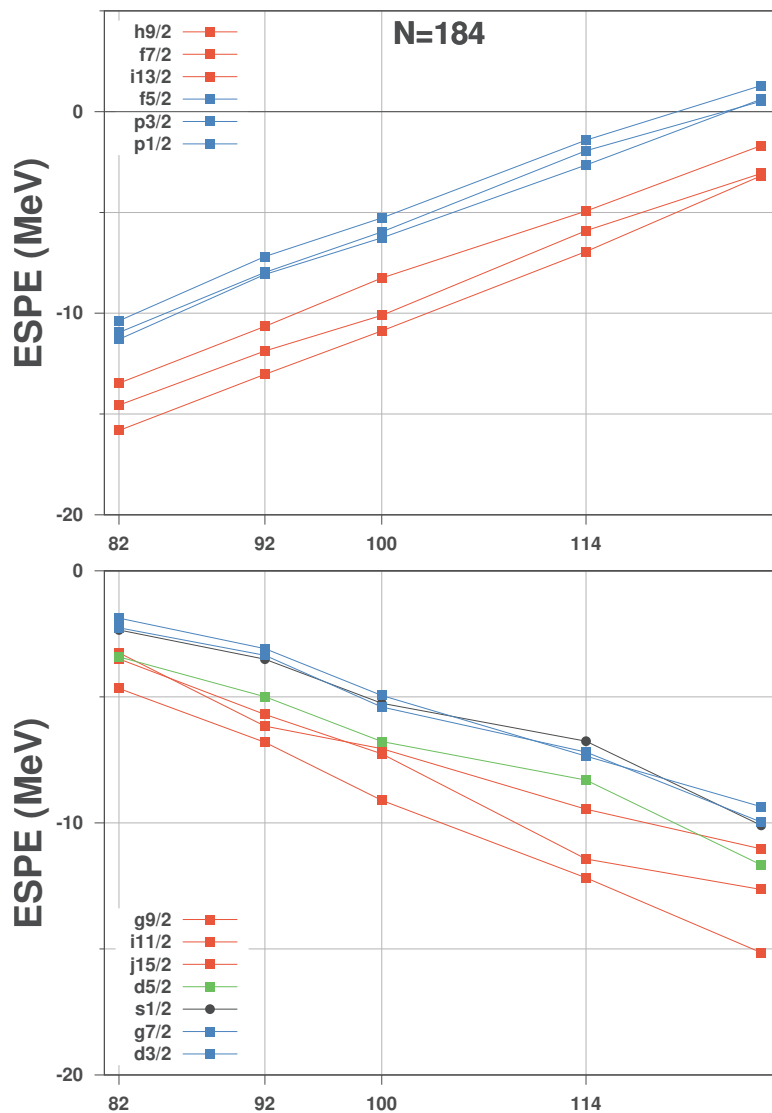
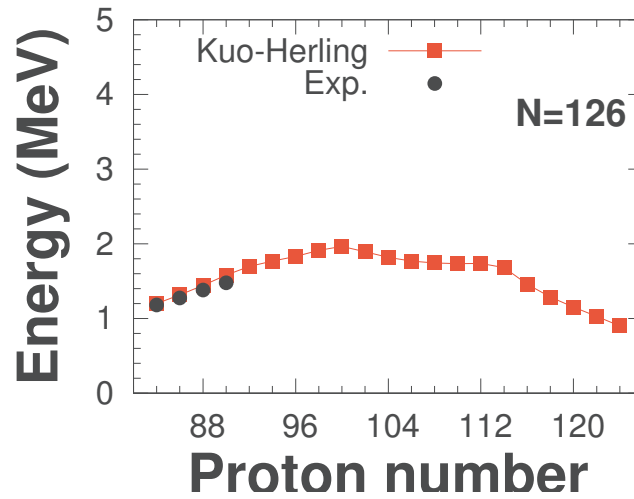
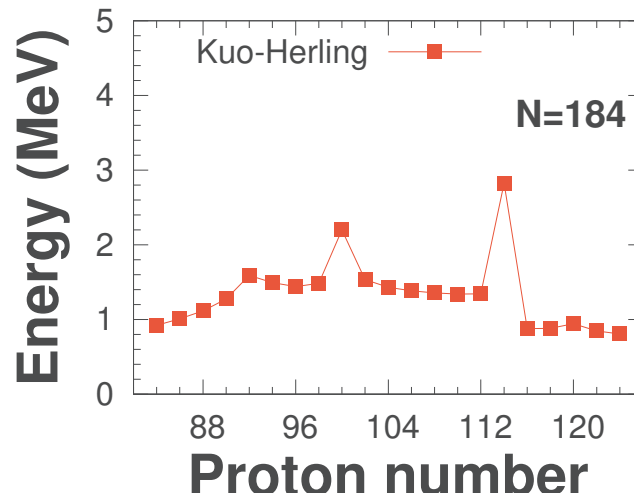


FIGURE 5.15 – Energies Individuelles Effectives proton (en haut) et neutron (en bas) à  $N=184$ .



FIGURE 5.16 – Energies du premier état excité  $2^+$  des isotones  $N=126$  .FIGURE 5.17 – Energies du premier état excité  $2^+$  des isotones  $N=184$  .TABLE 5.3 – Occupations des orbites sphériques de l'état fondamental du noyau  $Z=114/N=184$  avec l'interaction de Kuo-Herling

$1h_{\frac{9}{2}}$	$2f_{\frac{7}{2}}$	$1i_{\frac{13}{2}}$
9.92	7.82	13.58

## 5.6 Restauration du moment angulaire dans le cas triaxial

Comme présenté dans les sections précédentes, la restauration du moment angulaire dans le cas triaxial est plus complexe. Nous avons développé les procédures pour ces calculs également mais la mise au point finale n'est pas encore terminée. Nous avons encore quelques erreurs de programmation à identifier et aucun résultat concernant ces cas ne seront par conséquent présentés.

## Chapitre 6

# Méthodes des coordonnées génératrices



Dans ce chapitre, nous allons présenter la méthode des coordonnées génératrices. Cette méthode est très utile pour étudier les propriétés du noyaux, notamment dans le cas si on applique avec la restauration du moment angulaire, le résultat va s'approcher au résultat de la diagonalisation du modèle en couches.

## 6.1 Formalisme

Le formalisme général de la méthode des coordonnées génératrices se trouve dans [31, 32, 33]. Le principe de cette méthode est de construire l'état collectif  $|\Psi\rangle$  par superposition d'un nombre fini de déterminants de Slater non-orthogonaux  $|\Phi(q)\rangle$  (en générale  $\langle\Phi(q')|\Phi(q)\rangle \neq 0$ , si  $q \neq q'$ ) avec la fonction génératrice ( $q = (Q_{20}, Q_{22})$ ) :

$$|\Psi\rangle = \sum_q f(q)|\Phi(q)\rangle, \quad (6.1)$$

$|\Phi(q)\rangle$  est le déterminant de Slater Eq. (3.6) obtenu par les calculs Hartree-Fock sous contraintes ou par la diagonalisation de l'Hamiltonien à un corps type Nilsson déformé et les coefficients  $f(q)$  sont les poids, ils sont déterminés par la minimisation de l'énergie totale du système :

$$\delta \frac{\langle\Psi|\mathcal{H}|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle} = 0 \quad (6.2)$$

qui correspond à l'équation de Hill-Wheeler-Griffin [32, 33] pour la valeur discrète de  $q$  :

$$\sum_{q'} \left( H(q', q) - EN(q', q) \right) f(q') = 0 \quad (6.3)$$

où  $H(q', q)$  et  $N(q', q)$  sont les matrices de l'Hamiltonien et du recouvrement (ou norme) définis par :

$$N(q', q) = \langle \Phi(q') | \Phi(q) \rangle \quad (6.4)$$

$$H(q', q) = \langle \Phi(q') | \mathcal{H} | \Phi(q) \rangle \quad (6.5)$$

On utilise la formule générale de Per Olov Löwdin [76, 77], reformulée dans [110] pour calculer la fonction de recouvrement et l'Hamiltonian Eq. (6.4) et Eq. (6.5). On utilise la notation  $D$  une matrice rectangulaire dont les colonnes sont l'ensemble des coefficients des orbitales  $|\lambda\rangle$  occupées dans  $|\Phi(q)\rangle$  (voir chapitre précédent) :

$$N(q', q) = \det(D(q')^\dagger \cdot D(q)) \quad (6.6)$$

$$H(q', q) = N(q', q) \left[ \sum_{l_1 l_3} \left( t_{l_1 l_3} + \frac{1}{2} \sum_{l_2 l_4} \rho_{l_4 l_2} \bar{v}_{l_1 l_3, l_2 l_4} \right) \rho_{l_3 l_1} \right] \quad (6.7)$$

où  $\rho_{uv}$  est la matrice densité transition ou « mixte » définie par :

$$\rho_{uv} = \frac{\langle \Phi(q') | c_l^\dagger c_l | \Phi \rangle}{\langle \Phi(q') | \Phi(q) \rangle}$$

$$\rho = D(q) \cdot \left( D(q')^\dagger \cdot D(q) \right)^{-1} \cdot D(q')^\dagger$$

Pour résoudre les équations de coordonnées génératrices Eq. (6.3), d'abord, on construit et diagonalise la matrice de normes  $N(q'; q)$  :

$$\sum_{q'} N(q', q) u_k(q') = n_k u_k(q) \quad (6.8)$$

Lorsque les déterminants de Slater  $|\Phi(q)\rangle$  sont nonlinéaires indépendants, l'équation (6.8) possède une ou plusieurs valeurs propres  $n_k$  négatives ou nulles (les états de valeurs propres  $n_k$  négatives sont mal construites) et ces valeurs propres ont le moins de signification physique et on peut les éliminer en présente un critère  $\xi$  (dans nos calculs  $\xi = 10^{-5}$ ) :

$$\frac{n_k}{n_{max}} > \xi$$

où  $n_{max}$  est la valeur maximale de  $n_k$ .

## 6.2. Restauration du moment angulaire total et mélanges des configurations 93

Après élimination des états non physiques, on construit une nouvelle base orthonormée  $|k\rangle$  qui contient toutes les propriétés physiques :

$$|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_k}} \sum_q u_k(q) |\Phi(q)\rangle \quad (6.9)$$

Finalemment on construit et diagonalise l'Hamiltonien collective  $\mathcal{H}$  dans un sous-espace de  $|k\rangle$  :

$$\mathcal{H}_{kl} = \frac{1}{\sqrt{n_k n_l}} \sum_{qq'} u_k^*(q') H(q', q) u_l(q) \quad (6.10)$$

$$\sum_{kl} \mathcal{H}_{kl} g_l = E g_k \quad (6.11)$$

Le résultat de l'Eq. (6.11) nous donne l'énergie collective et les poids à construire les états  $|\Psi\rangle$  dans sous espace des  $|k\rangle$  :

$$|\Psi\rangle = \sum_k g_k |k\rangle \quad (6.12)$$

et

$$f(q) = \sum_k \frac{g_k}{\sqrt{n_k}} u_k(q) \quad (6.13)$$

Ces dernières équations peuvent s'appliquer pour décrire les propriétés des noyaux, les moments quadrupolaires et les probabilités de transitions.

**Remarque** : les éléments diagonaux de l'Eq. (6.7) sont les énergies Hartree-Fock, les termes non diagonaux qui diffèrent des énergies Hartree-Fock jouent un rôle important. Comme on a vu dans le chapitre des restaurations du moment angulaire total, l'important est le choix des états à A corps  $|\Phi(q)\rangle$ .

## 6.2 Restauration du moment angulaire total et mélanges des configurations

La restauration du moment angulaire total avec la méthode des coordonnées génératrices est une des méthodes de plus utilisée dans les calculs du champ moyen, il y a plusieurs applications dans les années passés on va citer quelques unes, dans le cas

axial [88, 89, 111, 112] et dans cas triaxial [40, 80, 81, 82, 90, 113]. L'état collectif  $|\Psi\rangle$  voir l'Eq. (5.6) et l'Eq. (6.1) devient :

$$|\Psi_\alpha^{JM}\rangle = \sum_{Kq} f_\alpha^{JK}(q) |\Phi(q)\rangle \quad (6.14)$$

où  $\alpha = 1, 2, \dots$  sont les différentes valeurs propres dans un même état (par exemple pour l'état fondamental si on mélange de plusieurs déterminants de Slater, on peut avoir :  $0_1, 0_2, \dots$ ). Les coefficients  $f_\alpha^{JK}(q)$  sont les solution des équations intégrales de Hill-Wheeler-Griffin :

$$\sum_{K'q'} (H_{K'K}^J(q', q) - E_\alpha^J N_{K'K}^J(q', q)) f_\alpha^{JK'}(q') = 0 \quad (6.15)$$

Dans le cas où le déterminant de Slater est symétrie axial ( $K = 0, q = Q_{20}$ ), l'Eq. (6.15) devient :

$$\sum_{q'} (H_{00}^J(q', q) - E_\alpha^J N_{00}^J(q', q)) f_\alpha^{J0}(q') = 0 \quad (6.16)$$

où

$$N_{00}^J(q', q) = (2J + 1) \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin \theta d_{00}^{J*}(\theta) n(\theta) \quad (6.17)$$

$$H_{00}^J(q', q) = (2J + 1) \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin \theta d_{00}^{J*}(\theta) h(\theta) \quad (6.18)$$

$n(\theta)$  et  $h(\theta)$  sont calculés en utilisant les Eq. (5.20), (5.21) mais avec  $\Phi(q')$  et  $\Phi(q)$  réf. [114]. La résolution de l'Eq. (6.16) est utilisée la procédure décrite dans la section précédente et les coefficients  $f_\alpha^{J0}(q)$  sont calculés finalement

$$f_\alpha^{J0}(q) = \sum_k \frac{g_k^{J0,\alpha}}{\sqrt{n_k^J}} u_k^*(q) \quad (6.19)$$

La probabilité de transition entre l'état initial  $(J_i, \alpha_i)$  l'état final  $(J_f, \alpha_f)$  :

$$B(E2, J_i \alpha_i \rightarrow J_f \alpha_f) = \frac{e^2}{2J_i + 1} \left| \sum_{q_i q_f} f^{*J_f \alpha_f}(q_f) \langle J_f q_f || \hat{Q}_2 || I_i q_i \rangle f^{J_i \alpha_i}(q_i) \right|^2 \quad (6.20)$$

et le moment quadrupolaire spectroscopique pour  $(J \geq 2, \alpha)$  :

$$Q_s^{J\alpha} = \sqrt{\frac{16\pi}{5}} \frac{\langle JJ20 || JJ \rangle}{\sqrt{2J + 1}} \sum_{q_i q_f} f^{*J\alpha}(q_f) \langle J q_f || \hat{Q}_2 || J q_i \rangle f^{J\alpha}(q_i) \quad (6.21)$$

où  $\langle J q_f || \hat{Q}_2 || J q_i \rangle$  sont calculés en utilisant la relation l'Eq. (5.26) mais avec  $q_i$  et  $q_f$ .



## 6.3 Applications

### 6.3.1 Application au cas du $^{28}\text{Si}$ dans la couche $sd$

Comme il a été expliqué au chapitre précédent, la finalisation de la restauration du moment angulaire dans la cas général n'est pas encore terminée ce qui a limité le champ d'application de ce chapitre. Nous présentons ici néanmoins le cas du  $^{28}\text{Si}$  où nous avons mélangé différentes solutions axiales oblates pour obtenir le spectre à la Fig. 6.1. Ceci a permis de mélanger la solution oblate la plus liée avec la solution sphérique « couche fermée ». Le spectre est nettement amélioré mais reste un peu plus comprimé que la diagonalisation exacte. Bien évidemment, des états axiaux prolates n'ont pas pu être incorporés dans cette fonction d'onde car les mélanges auraient nécessité d'inclure des cas triaxiaux.

### 6.3.2 Bande rotationnelle du $^{48}\text{Cr}$ et $^{50}\text{Cr}$

Le noyau  $^{48}\text{Cr}$  est dans la couche  $pf$ , l'exemple du rotateur étudié en détails expérimentalement et théoriquement. La surface d'énergie potentielle et le spectre rotationnel de la bande Yrast du  $^{48}\text{Cr}$  est présenté à la Fig. 6.2 et Fig. 6.3. Les calculs Hartree-Fock projeté ont été réalisés dans l'espace de valence constitué de la couche  $pf$  pour les protons et les neutrons, et avec l'interaction effective KB3 [115]. Comme dans le cas précédent de la couche  $sd$  du  $^{20}\text{Ne}$ , le spectre bien que rotationnel apparaît trop comprimé. Dans la Fig. 6.5, nous avons représenté les énergies des transitions de la bande  $E(J) - E(J - 2)$  en fonction de  $J$  (plus exactement l'inverse). La linéarité de la courbe est caractéristique d'un rotateur dont le spectre d'énergies d'excitations varie en  $J(J + 1)$ . La projection de la solution Hartree-Fock déformée axiale respecte la linéarité parfaite du rotateur. Ce résultat n'est pas suprenant et confirme que cette approximation revient à se restreindre aux corrélations quadrupolaires. Le spectre est identique à celui de la diagonalisation d'interaction quadrupolaire pure comme étudié en détails dans la référence [116]. En conséquence, le moment d'inertie apparaît également trop grand, du fait de l'absence des corrélations d'appariement. Cet effet des corrélations d'appariement sur le moment d'inertie a également été étudié en détails dans la référence [117]. Lorsqu'on discrétise les paramètres de déformations  $\beta \in [0, 0.4]$

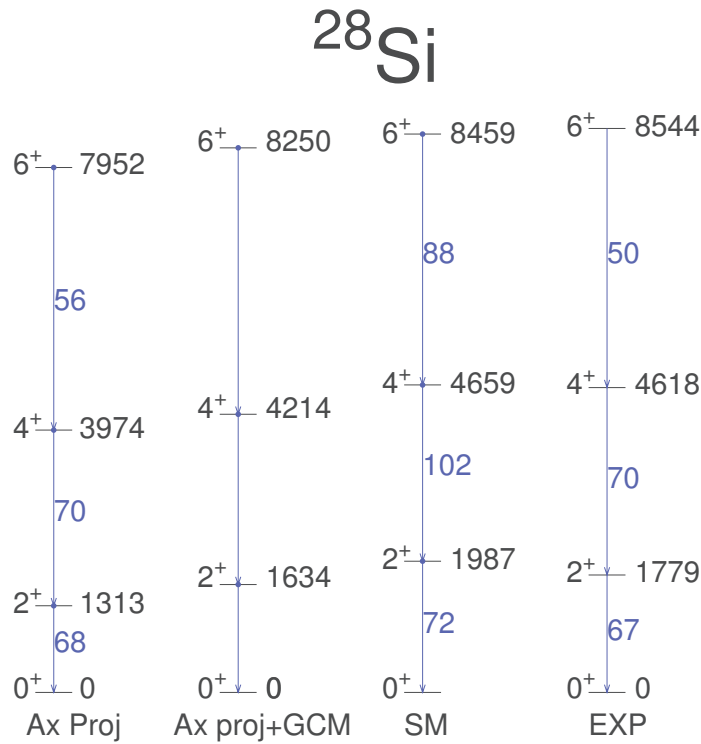


FIGURE 6.1 – Spectre du  $^{28}\text{Si}$  obtenue par projeté l'état de la symétrie axial de Hartree-Fock, par mélange des déterminants de Slater (on discrétise le paramètre  $\beta \in [0, 0.54]$  avec un pas 0.01 et  $\gamma = 180^\circ$ ) et diagonalisation du modèle en couche avec interaction USD. Les énergies sont en keV et les  $B(E2)$  en  $e^2\text{fm}^4$ . Les valeurs d'expérimentales sont tirées de [91] et [92]

avec un pas de 0.02 et puis on se mélange ces déterminants de Slater, les spectres et le Backbending sont présentés dans la Fig. 6.3 et Fig. 6.5.

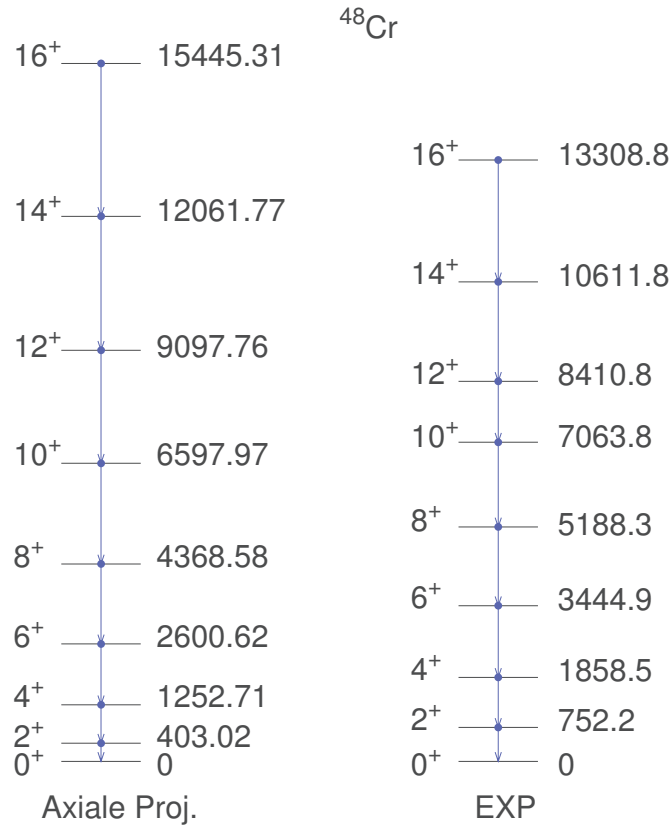


FIGURE 6.3 – Spectre du  $^{48}\text{Cr}$ , obtenu par calcul Hartree-Fock avec projecté sur létat axial (prolate), par mélange les différences solutions axiales de Hartree-Fock (discrétisation de  $\beta \in [0, 0.4]$  avec un pas 0.02 et  $\gamma = 0$ ), par la diagonalisation du modèle en couches [118] avec l'interaction KB3 [115] dans la couche  $pf$ , la valeurs expérimentales tirées de [92, 119].

Pour le  $^{50}\text{Cr}$  le seconde Backbending est observé expérimentalement [120], dans nos calculs, les résultats sont présentés dans la Fig. 6.2, la Fig. 6.4 et la Fig. 6.5

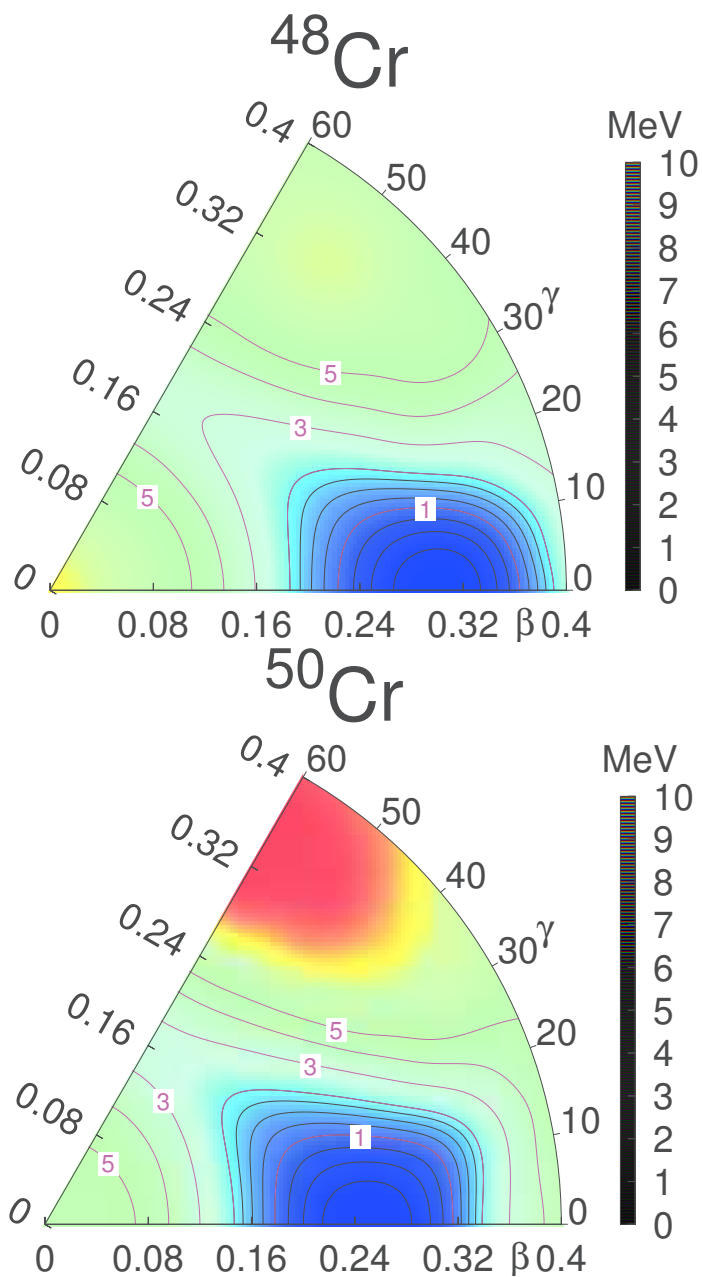


FIGURE 6.2 – Surfaces d'énergies potentielles du  $^{48}\text{Cr}$  et  $^{50}\text{Cr}$ , calculs avec interaction effective KB3 [115]

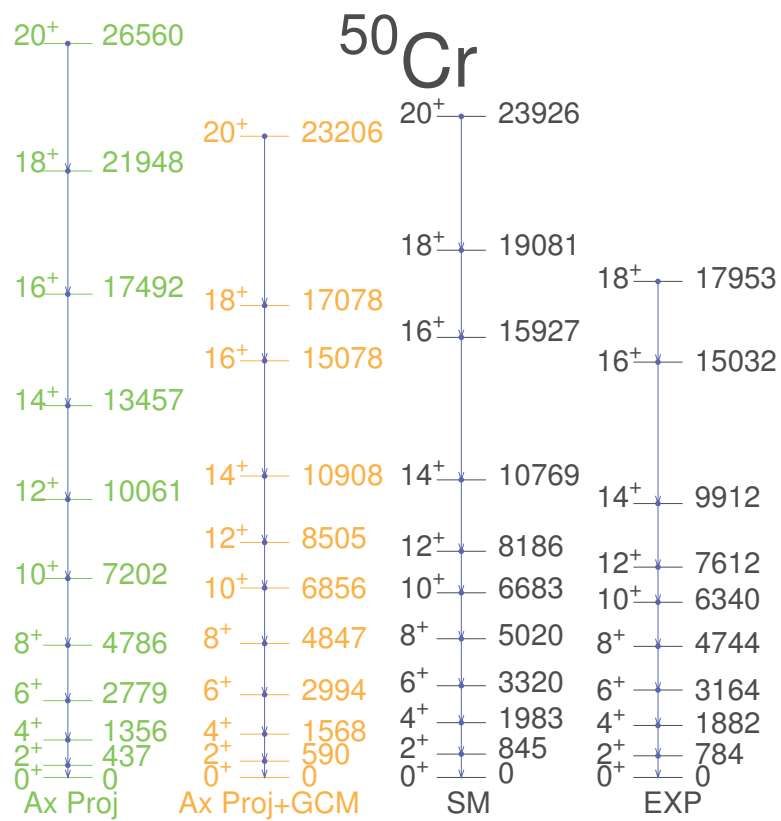
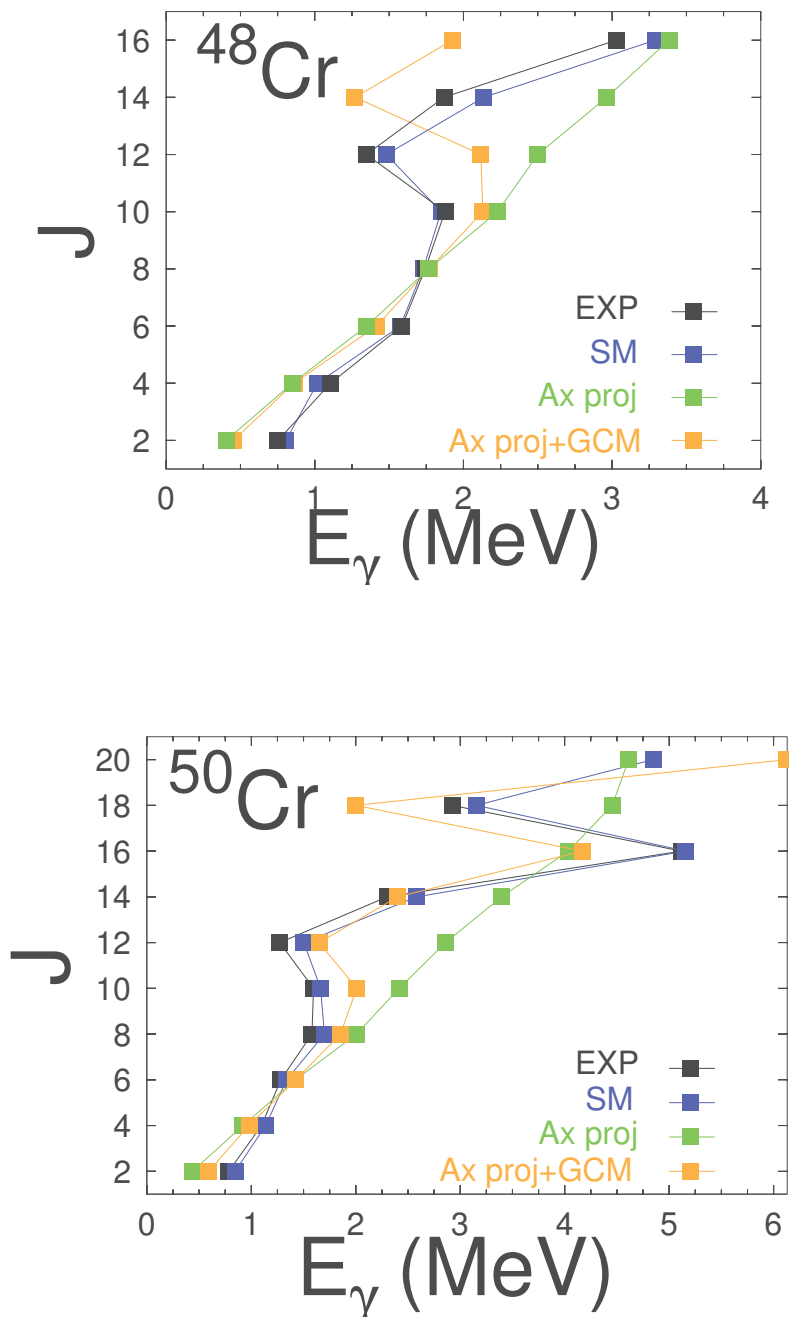


FIGURE 6.4 – Spectres rotationnelles du  $^{50}\text{Cr}$ , les énergies sont en KeV et les valeurs expérimentales sont tirées de [92, 120].

FIGURE 6.5 – Energie de transition de la bande Yrast du  $^{48}\text{Cr}$  et  $^{50}\text{Cr}$

Chapitre 7

Conclusion





Le but de ce travail était de présenter des calculs alternatifs aux méthodes de diagonalisations exactes du modèle en couches et de les appliquer à divers types de calculs microscopiques.

Nous avons d'abord présenté la réalisation d'un code Hartree-Fock déformé dans la base du modèle en couches initialisé par des fonctions d'ondes de Nilsson obtenues par diagonalisations des opérateurs quadrupolaires et octupolaires. Nous avons pu tester ce code dans le cas d'un Hamiltonien schématique  $SU(3)$  soluble analytiquement ainsi que par comparaison avec des calculs identiques dans la couche  $sd$  avec l'interaction effective USD.

Ensuite, nous avons étendu ce type de calculs à des calculs avec contraintes sur le moment quadrupolaire de manière à obtenir les surfaces de niveaux en énergie en fonction des degrés de liberté  $Q_{20}$  et  $Q_{22}$ . Différents types de contraintes ont été utilisées (linéaires, quadratiques, méthode du lagrangien augmenté) et la méthode du lagrangien augmenté qui ajuste le multiplicateur à chaque itération s'est avérée la plus efficace, notamment face aux instabilités numériques provenant de la forte dégénérescence de niveaux à l'approximation Hartree-Fock. Ce type de surface s'est avéré très utile pour l'interprétation des résultats dans le laboratoire des diagonalisations exactes.

Ainsi, nous avons pu caractériser la structure triaxiale des noyaux  $^{42}\text{Ca}$  et  $^{140}\text{Sm}$  en complément de diagonalisations dans les espaces de valence  $sd - pf$ , et  $r4h$  respectivement.

De même, l'étude systématique de noyaux riches en neutrons proches de  $N=50$ , réalisée dans l'espace de valence  $(pf)^\pi(sdg)^\nu$  a permis de caractériser une nouvelle zone d'îlot de déformation pour les isotopes de Chrome et de Fer, et d'une situation

de coexistence de formes sphérique/déformé dans le cas du  $^{78}\text{Ni}$ .

Enfin, l'étude des noyaux  $N = Z$  à l'interface entre les couches  $pf$  et  $sdg$  dans la région de masse  $A \sim 80$  a révélé des structures N particules - N trous bien caractérisées de type  $4p4t$  pour le  $^{72}\text{Kr}$ ,  $8p8t$  pour le  $^{76}\text{Sr}$  et  $12p12t$  pour le  $^{80}\text{Zr}$ . Les moments quadrupolaires calculés sont compatibles, dans le cadre du modèle collectif de Bohr-Mottelson avec les taux de transitions  $B(E2)$  observés pour ces isotopes.

La restauration du moment angulaire par la méthode des projections a permis d'évaluer le niveau d'approximation obtenu dans les cas axiaux et triaxiaux, à la fois concernant l'énergie absolue du fondamental et le spectre d'excitation. Dans les cas les plus rotationnels axiaux comme le  $^{74}\text{Cr}$  la projection d'un seul déterminant de Slater déformé permet déjà d'obtenir une approximation de la bande Yrast de grande qualité à un coût numérique moindre :

- le calcul du minimum Hartree-Fock déformé (en imposant la symétrie axiale) est immédiat, la restauration du moment angulaire également.
- la diagonalisation du  $^{74}\text{Cr}$  dans l'espace complet  $pf - sdg$  concerne des matrices de dimension  $5.10^9$  et a nécessité deux semaines de calcul par état sur une station de travail actuelle.
- la minimisation de chaque état  $J$  n'apporte pas de différence notable du spectre avec la projection simple après minimisation de l'état intrinsèque

Une première application dans la région des noyaux superlourds a permis de confirmer la qualité de l'interaction effective Kuo-Herling et de prédire un gap sphérique (donc plus stable a priori) pour l'isotope **Z=114, N=184**.

Evidemment, les régimes moins rotationnels transitionnels seront moins propices à la description par un seul déterminant de Slater déformé puis projeté. Le mélange de différentes solutions par la méthode des coordonnées génératrices exposées au chapitre 6 sera nécessaire pour enrichir la fonction par différents types d'excitations.

Dans un futur proche, nous espérons à la fois arriver au bout de la procédure de restauration du moment angulaires dans le cas triaxial ainsi que de finaliser les mélanges de solutions projetées dans le cas général. Nous aurons alors un outil polyvalent alternatif aux diagonalisations exactes, et permettant de décrire les situations de physique les plus variées.

# Annexe A

## Moments multipolaires et opérateurs de Rotations

### A.1 Les éléments de matrice des opérateurs multipolaires

Dans la base d'oscillateur harmonique sphérique ( $nljm$ ) de la section 3.2. Les éléments de matrice des opérateurs de moments multipolaires Eq.(3.21) sont calculés, en appliquant le théorème de Wigner-Eckart [30, 44, 71] :

$$\langle n'l'j'm' | \hat{Q}_{\lambda\mu} | nljm \rangle = \frac{\langle jm\lambda\mu | j'm' \rangle}{\sqrt{2j'+1}} \langle n'l' || r^\lambda || nl \rangle \langle j' || Y_\lambda || j \rangle \quad (\text{A.1})$$

où  $\langle jm\lambda\mu | j'm' \rangle$  sont les coefficients de Clebsch-Gordan voir dans l'Eq. (A.10).

La partie radiale :

$$\begin{aligned} \langle n'l' || r^\lambda || nl \rangle &= (-1)^{n+n'} \sqrt{\frac{\Gamma(n)\Gamma(n')}{\Gamma(n+t-\nu)\Gamma(n'+t-\nu')}} \nu! \nu'! \\ &\times \sum_{\sigma} \frac{\Gamma(t+\sigma+1)}{\sigma!(n-\sigma-1)!(n'-\sigma-1)!(\sigma+\nu-n+1)!(\sigma+\nu'-n'+1)!} \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

où

$$\begin{aligned} \nu &= \frac{l+l'+\lambda}{2}; \quad \nu' = \frac{l-l'+\lambda}{2}; \quad t = \frac{l+l'+\lambda+1}{2} \\ \max(n-\nu-1, n'-\nu'-1) &\leq \sigma \leq \min(n-1, n'-1) \end{aligned}$$

pour  $(l + l' + \lambda)$  pair

La partie angulaire

$$\langle j' || Y_\lambda || j \rangle = (-1)^\lambda \sqrt{\frac{(2j' + 1)(2\lambda + 1)}{4\pi}} \langle j' \frac{1}{2} \lambda 0 | j \frac{1}{2} \rangle \quad (\text{A.3})$$

## A.2 Matrice de rotation

L'opérateur  $\mathcal{R}(\Omega) = \mathcal{R}(\phi, \theta, \varphi)$  est l'opérateur de rotation dépendant des trois angles Euler  $\phi, \theta, \varphi$ . La description détaillée se trouve dans plusieurs ouvrages, on a cité quelques uns [70, 71]. On ne présente ici que les formules importantes :

$$\mathcal{R}(\phi, \theta, \varphi) = \exp(-i\phi J_z) \exp(-i\theta J_y) \exp(-i\varphi J_z) \quad (\text{A.4})$$

Soit un état propre  $|jm\rangle$  avec les valeurs propres  $J^2$  et  $M$ , on note  $|jm\rangle'$  l'état de rotation de l'état propre  $|jm\rangle$  par :

$$\begin{aligned} |jm\rangle' &= \mathcal{R}(\phi, \theta, \varphi) |jm\rangle \\ &= \exp(-i\phi J_z) \exp(-i\theta J_y) \exp(-i\varphi J_z) |jm\rangle \\ &= \sum_{\mu=-j}^j D_{\mu m}^j(\phi, \theta, \varphi) |j\mu\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

$$0 \leq \phi \leq 2\pi; \quad 0 \leq \theta \leq \pi; \quad 0 \leq \varphi \leq 2\pi$$

où  $D_{\mu m}^j(\phi, \theta, \varphi)$  est une fonction D de Wigner (ou une matrice de représentation D de Wigner) et donnée par expression suivante :

$$\begin{aligned} D_{\mu m}^j(\phi, \theta, \varphi) &= \langle j\mu | \exp(-i\phi J_z) \exp(-i\theta J_y) \exp(-i\varphi J_z) |jm\rangle \\ &= \exp(-i\mu\phi) \langle j\mu | \exp(-i\theta J_y) |jm\rangle \exp(-im\varphi) \\ &= \exp(-i(\mu\phi + m\varphi)) d_{\mu m}^j(\theta) \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

$d_{mn}^j(\beta)$  est la matrice de rotation réduite :

$$d_{mn}^j(\theta) = \sum_t (-1)^t \frac{\sqrt{(j+m)!(j-m)!(j+n)!(j-n)}}{(j+m-t)!(j-n-t)!t!(t+n-m)!} \times \left(\cos \frac{\theta}{2}\right)^p \left(\sin \frac{\theta}{2}\right)^q \quad (\text{A.7})$$

$$p = 2j + m - n - 2t,$$

$$q = 2t + n - m$$

Propriétés de la matrice de rotation réduite

$$d_{\mu m}^j(-\theta) = (-1)^{\mu-m} d_{\mu m}^j(\theta) = d_{m\mu}^j(\theta) = d_{-\mu-m}^j(\theta) = (-1)^{m-\mu} d_{-m-\mu}^j(\theta) \quad (\text{A.8})$$

$$D_{\mu m}^j(-\varphi, -\theta, -\phi) = D_{m\mu}^{j*}(\phi, \theta, \varphi) \quad (\text{A.9})$$

$$D_{m\mu}^{j*}(\phi, \theta, \varphi) = (-1)^{\mu-m} D_{-\mu-m}^j(\phi, \theta, \varphi)$$

$$D_{\mu m}^j(\phi + \pi n_\phi, \theta + \pi 2n_\theta, \varphi + \pi 2n_\varphi) = (-1)^{2jn_\theta + \mu n_\phi + mn_\varphi} D_{\mu m}^j(\phi, \theta, \varphi)$$

### A.3 Coefficients de Clebsch-Gordan

La formule générale pour calculer les coefficients de Clebsch-Gordan et les  $3J$  peut trouver dans plusieurs ouvrages comme [30, 71]

$$\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | JM \rangle = (-1)^{j_1 - j_2 + M} \sqrt{2J+1} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & J \\ m_1 & m_2 & -M \end{pmatrix} \quad (\text{A.10})$$

$\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | JM \rangle$  est un réel :

$$\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | JM \rangle^* = \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | JM \rangle$$

Règles de sélection :

$$m_1 + m_2 = M; \quad |j_1 - j_2| \leq J \leq j_1 + j_2$$

Si ces deux conditions ne sont pas réalisées :  $\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | JM \rangle = 0$

Formule de Racah pour calculer les coefficients de  $3J$

$$\begin{pmatrix} a & b & c \\ \alpha & \beta & \gamma \end{pmatrix} = (-1)^{a-b-\gamma} \sqrt{\Delta(abc)} \sqrt{(a+\alpha)!(a-\alpha)!(a+\beta)!(a-\beta)!(c+\gamma)!(c-\gamma)!} \\ \times \sum_t (-1)^t (t! t_1! t_2! t_3! (a-t-\alpha)!(b-t+\beta)!)^{-1} \quad (\text{A.11})$$

où

$$t_1 = c - b + t + \alpha$$

$$t_2 = c - a + t - \beta$$

$$t_3 = a + b - c - t$$

avec

$$(a + \beta + \gamma = 0, \quad |a - b| \leq c \leq a + b)$$

$$\Delta(abc) = \frac{(a + b - c)!(b + c - a)!(c + a - b)!}{(a + b + c + 1)!} \quad (\text{A.12})$$

La somme sur  $t$  porte pour les factorielles sont positifs ou nuls ( $0! = 1$ )

$$\begin{pmatrix} a & b & c \\ \alpha & \beta & \gamma \end{pmatrix}$$

est :

- invariant dans une permutation circulaire des trois colonnes
- multiplié par  $(-1)^{j_1+j_2+j_3}$  lorsqu'on permute deux colonnes
- multiplié par  $(-1)^{j_1+j_2+j_3}$  lorsqu'on change les signes de  $m_1, m_2, m_3$

# Annexe B

## La seconde quantification

### B.1 Les opérateurs de création et d'annihilation

On appelle l'espace de Fock, l'ensemble constitué des états avec un nombre arbitraire de particules ainsi que d'un état de vide  $|0\rangle$  qui ne contient aucune particule. En seconde quantification, on définit des opérateurs de création  $\hat{a}_\alpha^\dagger$  d'annihilation  $\hat{a}_\alpha$  d'une particule dans un état  $|\alpha\rangle$  par :

$$\hat{a}_\alpha^\dagger|0\rangle = |\alpha\rangle \quad \text{et} \quad \hat{a}_\alpha|\alpha\rangle = |0\rangle. \quad (\text{B.1})$$

Les états à plusieurs particules sont obtenus par application successive d'opérateur de création, par exemple :

$$\hat{a}_{\alpha_1}^\dagger \hat{a}_{\alpha_2}^\dagger \hat{a}_{\alpha_3}^\dagger \cdots \hat{a}_{\alpha_N}^\dagger |0\rangle = |\alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \cdots \alpha_N\rangle. \quad (\text{B.2})$$

### B.2 Relation d'anticommutation

Les états d'un système de  $N$  fermions sont construits à partir de l'état du vide  $|0\rangle$ , en appliquant  $N$  opérateurs de création. Un tel état de l'espace de Fock correspond à une fonction d'onde dans l'espace des coordonnées qui possède la bonne symétrie de permutation entre deux particules, c'est-à-dire à un déterminant de Slater. Puisqu'un déterminant de Slater est antisymétrique dans la permutation de deux lignes quelconque  $i$  et  $j$  nous devons avoir le même comportement pour l'état à  $N$  particules

dans l'espace de Fock, c'est-à-dire :

$$\begin{aligned}\hat{a}_{\alpha_1}^\dagger \hat{a}_{\alpha_2}^\dagger \hat{a}_{\alpha_3}^\dagger \dots \hat{a}_{\alpha_n}^\dagger |0\rangle &= |\alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \dots \alpha_n\rangle \\ &= -|\alpha_2 \alpha_1 \alpha_3 \dots \alpha_n\rangle \\ &= -\hat{a}_{\alpha_2}^\dagger \hat{a}_{\alpha_1}^\dagger \hat{a}_{\alpha_3}^\dagger \dots \hat{a}_{\alpha_n}^\dagger |0\rangle.\end{aligned}$$

On en conclut que

$$\hat{a}_{\alpha_1}^\dagger \hat{a}_{\alpha_2}^\dagger = -\hat{a}_{\alpha_2}^\dagger \hat{a}_{\alpha_1}^\dagger$$

ou encore :

$$\{\hat{a}_{\alpha_1}^\dagger, \hat{a}_{\alpha_2}^\dagger\} = \hat{a}_{\alpha_1}^\dagger \hat{a}_{\alpha_2}^\dagger + \hat{a}_{\alpha_2}^\dagger \hat{a}_{\alpha_1}^\dagger = 0 \quad (\text{B.3})$$

Plus généralement, on peut montrer que les opérateurs de création  $\hat{a}_{\alpha_i}^\dagger$  et d'annihilation  $\hat{a}_{\alpha_j}$  satisfont aux relations d'anticommutation suivantes :

$$\{\hat{a}_{\alpha_i}^\dagger, \hat{a}_{\alpha_j}^\dagger\} = 0, \quad \{\hat{a}_{\alpha_i}, \hat{a}_{\alpha_j}\} = 0, \quad \{\hat{a}_{\alpha_i}, \hat{a}_{\alpha_j}^\dagger\} = \delta_{\alpha_i \alpha_j} . \quad (\text{B.4})$$

### B.3 Produits normaux, Contraction et Théorème de Wick

On appelle **produit normal**, noté par :  $\hat{c}_1 \hat{c}_2 \dots \hat{c}_{2q}$  : de  $2q$  opérateurs  $\hat{c}_1, \hat{c}_2, \dots, \hat{c}_{2q}$  qui sont indifféremment des opérateurs de création  $\hat{a}_i^\dagger$  ou d'annihilation  $\hat{a}_j$  de particules, le produit de ces opérateurs où l'on place les opérateurs de création à gauche et les opérateurs d'annihilation à droite en conservant l'ordre respectif, et en multipliant par une phase égale à la parité de la permutation des opérateurs nécessaire pour atteindre l'ordre normal. Par exemple :

$$: a_1 a_2^\dagger a_3 a_4^\dagger := -a_2^\dagger a_4^\dagger a_1 a_3.$$

Compte tenu de la définition du produit normal, la valeur moyenne d'un produit normal dans le vide est nulle :

$$\langle 0 | : c_1 \dots c_p : | 0 \rangle = 0 .$$

On définit la **contraction** de deux opérateurs  $\hat{c}_1$  et  $\hat{c}_2$  que l'on notera  $\hat{c}_1 \hat{c}_2$  comme la différence entre le produit et le produit normal des deux opérateurs, soit :

$$\hat{c}_1 \hat{c}_2 = \hat{c}_1 \hat{c}_2 - : \hat{c}_1 \hat{c}_2 :$$



Il résulte des définitions ci-dessus et des propriétés d'anticommutation des opérateurs de fermions que

$$\underbrace{\hat{a}_i \hat{a}_j} = \underbrace{\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger} = \underbrace{\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j} = 0, \quad \text{et} \quad \underbrace{\hat{a}_i \hat{a}_j^\dagger} = \delta_{ij}$$

Toutes les autres contractions sont égales à zéro.

Il est à noter que si  $|\Phi_0\rangle$  désigne l'état fondamental, on a avec les propriétés de l'ordre normal

$$\langle \Phi_0 | \hat{c}_1 \hat{c}_2 | \Phi_0 \rangle = \langle \Phi_0 | \underbrace{\hat{c}_1 \hat{c}_2} | \Phi_0 \rangle = \underbrace{\hat{c}_1 \hat{c}_2} \quad (\text{B.5})$$

Le **théorème de Wick** donne une règle pour le calcul de la valeur moyenne par rapport au fondamental  $|\Phi_0\rangle$  d'un produit d'opérateur de création et d'annihilation :

- a) Si le nombre total des opérateurs est impair, la valeur moyenne est nulle.
- b) Si le nombre est pair et tous les opérateurs peuvent être contractés, la valeur moyenne est simplement la somme de toutes les combinaisons entièrement contractées, en tenant compte, par des signes, des permutations effectuées.

Par exemple :

$$\begin{aligned} \langle \Phi_0 | \hat{a}_{\alpha_1} \hat{a}_{\alpha_2} \hat{a}_{\alpha_3}^\dagger | \Phi_0 \rangle &= 0 \\ \langle \Phi_0 | \hat{a}_{\alpha_1} \hat{a}_{\alpha_2}^\dagger \hat{a}_{\alpha_3}^\dagger \hat{a}_{\alpha_4} | \Phi_0 \rangle &= \langle \Phi_0 | \hat{a}_{\alpha_1} \hat{a}_{\alpha_2}^\dagger \hat{b}_{\alpha_3} \hat{b}_{\alpha_4}^\dagger | \Phi_0 \rangle, \quad \alpha_1, \alpha_2 > \alpha_N, \quad \alpha_3, \alpha_4 \leq \alpha_N \\ &= \underbrace{\hat{a}_{\alpha_1} \hat{a}_{\alpha_2}^\dagger} \underbrace{\hat{b}_{\alpha_3} \hat{b}_{\alpha_4}^\dagger} = \delta_{\alpha_1 \alpha_2} \delta_{\alpha_3 \alpha_4} \end{aligned}$$

mais

$$\begin{aligned} \langle \Phi_0 | \hat{a}_{\alpha_1} \hat{a}_{\alpha_3}^\dagger \hat{a}_{\alpha_2}^\dagger \hat{a}_{\alpha_4} | \Phi_0 \rangle &= \langle \Phi_0 | \hat{a}_{\alpha_1} \hat{b}_{\alpha_3} \hat{a}_{\alpha_2}^\dagger \hat{b}_{\alpha_4}^\dagger | \Phi_0 \rangle, \quad \alpha_1, \alpha_2 > \alpha_N, \quad \alpha_3, \alpha_4 \leq \alpha_N \\ &= \langle \Phi_0 | \underbrace{\hat{a}_{\alpha_1} \hat{b}_{\alpha_3} \hat{a}_{\alpha_2}^\dagger \hat{b}_{\alpha_4}^\dagger} | \Phi_0 \rangle \\ &= - \langle \Phi_0 | \underbrace{\hat{a}_{\alpha_1} \hat{a}_{\alpha_2}^\dagger} \underbrace{\hat{b}_{\alpha_3} \hat{b}_{\alpha_4}^\dagger} | \Phi_0 \rangle = -\delta_{\alpha_1 \alpha_2} \delta_{\alpha_3 \alpha_4} \end{aligned}$$

où  $\hat{b}_\beta^\dagger$  et  $\hat{b}_\beta$  sont des opérateurs de création et annihilation de trous

$$\hat{b}_\beta^\dagger = \hat{a}_\beta, \quad \hat{b}_\beta = \hat{a}_\beta^\dagger, \quad \beta \leq \alpha_N \quad (\text{B.6})$$

alors que pour  $\beta > \alpha_N$  on garde l'ancienne écriture. On a donc

$$\begin{aligned}\hat{b}_\beta|\Phi_0\rangle &= 0, & \beta &\leq \alpha_N \\ \hat{a}_\beta|\Phi_0\rangle &= 0, & \beta &> \alpha_N\end{aligned}\tag{B.7}$$

tel que l'état fondamental  $|\Phi_0\rangle$  se comporte comme le vide  $|0\rangle$  aussi bien pour les opérateurs de particules  $\hat{a}$  que pour les opérateurs de trous  $\hat{b}$ .

# Bibliographie

- [1] H. Nam et al., J. Phys. : Conf. Ser. 402 12033 (2012), Universal Nuclear Energy Density Functional (UNEDF) <http://unedf.org/>
- [2] T. Otsuka, M. Honma and T. Misuzaki, Prog. Part. Nuc. Phys. 47, 319 (2001).
- [3] K.W. Schmid, F. Grümmer and A. Faessler, Nucl. Phys. A431, 205 (1984).
- [4] K.W. Schmid, F. Grümmer, M. Kyotoku and A. Faessler, Nucl. Phys. A452, 493 (1986).
- [5] E. Hammaren, K.W. Schmid and A. Faessler, Eur. Phys. Jour. A2, 371 (1998).
- [6] Z.-C. Gao, M. Horoi, Y. S. Chen, Y. J. Chen and Tuya, Phys. Rev. **C83**, 057303 (2011).
- [7] K. Hadyńska-Klek et al., Phys. Rev. Lett. 117, 062501 (2016)
- [8] M. Klintefjord, K. Hadyńska-Klek, A. Gørgen, C. Bauer, F. L. Bello Garrote, S. Bönig, B. Bounthong, A. Damyanova, J.-P. Delaroche, V. Fedosseev, D. A. Fink, F. Giacoppo, M. Girod, P. Hoff, N. Imai, W. Korten, A.-C. Larsen, J. Libert, R. Lutter, B. A. Marsh, P. L. Molkanov, H. Naïdja, P. Napiorkowski, F. Nowacki, J. Pakarinen, E. Rapisarda, P. Reiter, T. Renstrøm, S. Rothe, M. D. Seliverstov, B. Siebeck, S. Siem, J. Srebrny, T. Stora, P. Thöle, T. G. Tornyi, G. M. Tveten, P. Van Duppen, M. J. Vermeulen, D. Voulot, N. Warr, F. Wenander, H. De Witte mand M. Zielińska, Phys. Rev. **C93**, 054303 (2016).
- [9] Caurier E., Nowacki F.  
Present status of shell model techniques  
Act. Phys. Pol. B30, 705 (1999)

- [10] The shell model as a unified view of nuclear structure  
E. Caurier, G. Martinez-Pinedo, F. Nowacki, A. Poves, A. P. Zuker  
Rev. Mod. Phys. 77, 427 (2005)
- [11] B. A. Brown, B. H. Wildenthal, At. Data Nucl. Data Tables **33**, 347 (1985).
- [12] T. T. S. Kuo et G.E. Brown, Nucl. Phys. **A114**, 241 (1968).
- [13] J. Shurpin, T. T. S. Kuo et D. Strottman, Nuc. Phys. **A408**, 310 (1983).
- [14] B. A. Brown, B. H. Wildenthal, Annu. Rev. Nucl. Part. Sci. **38** 29 (1988).
- [15] W. A. Richter, M. G. Vandermerwe, R. E. Julis, et B. A. Brown, Nucl. Phys. **A523**, 325 (1991).
- [16] R. Vinh Mau, dans *Mésons in Nuclei*, édité par M. Rho et D. H. Wilkinson, North-Holland, Amsterdam 1979.
- [17] R. Machleidt, K. Holinde et Ch. Elster, Phys. Rep. **149** 1 (1987).
- [18] R. B. Wiringa, V. G. J. Stoks, R. Schiavilla, Phys. Rev. **C51**, 38 (1994).
- [19] K. A. Brueckner et D. T. Goldman, Phys. Rev. **117** 207 (1960).
- [20] K. A. Brueckner, J. L. Gammel et J. T. Kubis, Phys. Rev. **118** 1438 (1960).
- [21] E. Epelbaum, H.-W. Hammer, and Ulf-G. Meißner, Rev. Mod. Phys. **81**, 1773 (2009).
- [22] M. Dufour et A.P. Zuker, Phys. Rev. **C54** 1641 (1996).
- [23] A.P. Zuker et M. Dufour, arXiv nucl-th9505010.
- [24] A. Poves, private communication.
- [25] A. P. Zuker, Phys. Rev. Lett. **90**, 042502 (2003).
- [26] G. Hagen, Phys. Rev. Lett. **108**, 242501 (2012).
- [27] G. Hagen, Phys. Rev. Lett. **109**, 032502 (2012).
- [28] G. Ripka, Lectures in Theoretical Physics (The University of Colorado Press, VOL.VIII C, 1965).
- [29] G. Ripka, Advances in Nuclear physics, Vol.1 (Plenum Press, New York, 1968).
- [30] P. J. Brussaard and P. W. M. Glaudemans, Shell-Model Applications in Nuclear Spectroscopy (North-Holland Publishing Co., Amsterdam .New York. Oxford, 1977).

- [31] P. Ring and P. Schuck, *The Nuclear Many Body Problem* (Springer-Verlag, Heidelberg, 1980).
- [32] D. L. Hill and J. A. Wheeler, *Phys. Rev.* **89**, 1102 (1953).
- [33] J. J. Griffin and J. A. Wheeler, *Phys. Rev.* **108**, 311 (1957).
- [34] S. G. Nilsson, *Dan. Mat. Fys. Medd.* **29**, 16 (1955).
- [35] Benjamin E. Chi, *Nucl. Phys.* **83** (1966) 97.
- [36] J. Dobaczewski and P. Olbratowski, *Comput. Phys. Commun.* **158**, 158 (2004).
- [37] M. Matev, A. V. Afanasjev, J. Dobaczewski, G. A. Lalazissis, and W. Nazarewicz, *Phys. Rev.* **C76**, 034304 (2007).
- [38] J. M. Eisenberg and W. Greiner, *Nuclear Theory 1* (North-Holland Publishing Co., Amsterdam, 1975).
- [39] K. Wrzosek-Lipska, L. Próchniak, M. Zielińska, J. Srebrny, K. Hadyńska-Klęk, J. Iwanicki, M. Kisieliński, M. Kowalczyk, P. J. Napiorkowski, D. Pięta, and T. Czosnyka, *Phys. Rev.* **C86**, 064305 (2012).
- [40] T. R. Rodríguez, J. L. Egido, *Phys. Rev.* **C81**, 064323 (2010), arXiv :1004.2877 [nucl-th].
- [41] M. Borrajo, J. L. Egido, *Acta Physica Polonica B Proceedings Supplement* **8** (2015) 567 (2015).
- [42] J. L. Egido, M. Borrajo, and T. R. Rodríguez, *Phys. Rev. Lett.* **116**, 052502 (2016), arXiv :1512.04232 [nucl-th].
- [43] Y. Alhassid, G. F. Bertsch, L. Fang, and B. Sabbey, *Phys. Rev.* **C74**, 034301 (2006).
- [44] J. Suhonen, *From Nucleons to Nucleus, Concepts of Microscopic Nuclear Theory* (Springer-Verlag Berlin Heidelberg 2007).
- [45] A. P. Zuker, A. Poves, F. Nowacki, and S. M. Lenzi, *Phys. Rev.* **C92**, 024320 (2015).
- [46] B. A. Brown and W. A. Richter, *Phys. Rev.* **C74**, 034315 (2006).
- [47] R. Rodríguez-Guzmán, P. Sarriguren, L. M. Robledo, and J. E. García-Ramos, *Phys. Rev.* **C81**, 024310 (2010).

- [48] H. Flocard, P. Quentin, A. K. Kerman, and D. Vautherin. Nucl. Phys. **A203** (1973) 433.
- [49] B. Giraud, J. Le Tourneux, S.K.M. Wong. Phys. Lett. **B32** (1970)23.
- [50] B. G. Giraud and J. LeTourneux, Phys. Rev. **C16**, 906(R) (1977).
- [51] A. Staszczak, M. Stoitsov, A. Baran, and W. Nazarewicz. Eur. Phys. J. **A46** (2010) 85, arXiv :1006.4137 [nucl-th].
- [52] D. D. Johnson, Phys. Rev. **B38**, 12807 (1988).
- [53] V. Eyert, J. Comput. Phys., **124** (1996) 271.
- [54] A. Baran, A. Bulgac, M. McNeil Forbes, G. Hagen, W. Nazarewicz, N. Schunck, and M. V. Stoitsov, Phys. Rev. **C78**, 014318 (2008), arXiv :0805.4446v1 [nucl-th].
- [55] S. Lenzi, A. Poves, F. Nowacki, K. Sieja, Phys. Rev. **C82**, 054301 (2010).
- [56] H. Iwasaki, A. Lemasson, C. Morse, A. Dewald, T. Braunroth, V.M. Bader, T. Baugher, D. Bazin, J. S. Berryman, C.M. Campbell, A. Gade, C. Langer, I. Y. Lee, C. Loelius, E. Lunderberg, F. Recchia, D. Smalley, S.R. Stroberg, R. Wadsworth, C. Walz, D. Weisshaar, A. Westerberg, K. Whitmore, and K. Wimmer, Phys. Rev. Lett. **112**, 142502 (2014).
- [57] A. Lemasson, H. Iwasaki, C. Morse, D. Bazin, T. Baugher, J. S. Berryman, A. Dewald, C. Fransen, A. Gade, S. McDaniel, A. Nichols, A. Ratkiewicz, S. Stroberg, P. Voss, R. Wadsworth, D. Weisshaar, K. Wimmer, and R. Winkler, Phys. Rev. **C85**, 041303(R) (2012).
- [58] S. Suchyta, S. N. Liddick, Y. Tsunoda, T. Otsuka, M. B. Bennett, A. Chemey, M. Honma, N. Larson, C. J. Prokop, S. J. Quinn, N. Shimizu, A. Simon, A. Spyrou, V. Tripathi, Y. Utsuno and J. M. VonMoss, Phys. Rev. **C89**, 021301 (2014).
- [59] Y. Tsunoda, T. Otsuka, N. Shimizu, M. Honma, and Y. Utsuno, Phys. Rev. **C89**, 031301(R) (2014).
- [60] T. Togashi, N. Shimizu, Y. Utsuno, T. Otsuka and M. Honma, Phys. Rev. **C91**, 024320 (2015), arXiv :1411.3886 [nucl-th].
- [61] M. Hjorth-Jensen, T. T. S. Kuo et E. Osnes, Phys. Rep. **261**, 125 (1995).
- [62] F. Nowacki, A. Poves, E. Caurier, B. Bounthong, arXiv :1605.05103 [nucl-th] 2016.

- [63] A. Gniady, Thèse de Doctorat, IPHC Strasbourg, non publié.
- [64] K. Sieja, G. Martínez-Pinedo, L. Coquard, and N. Pietralla, Phys. Rev. **C 80**, 054311 (2009).
- [65] E. Caurier, F. Nowacki, A. Poves, and K. Sieja, Phys. Rev. **C82**, 064304 (2010).
- [66] C. M. Petrache, I. Ragnarsson, H. Naïdja, F. Nowacki, R. Leguillon, T. Zerrouki, P. T. Greenlees, U. Jakobsson, P. Jones, R. Julin, S. Juutinen, S. Ketelhut, M. Leino, M. Nyman, P. Peura, P. Rahkila, P. Ruotsalainen, J. Saren, C. Scholey, J. Sorri and J. Uusitalo, Phys. Rev. **C92**, 034314 (2015).
- [67] A. S. Davydov and G. S. Filippov, Nuc. Phys. **8**, 237 (1958).
- [68] E. Caurier, J. Menendez, F. Nowacki, and A. Poves, Phys. Rev. **C75**, 054317 (2007).
- [69] H. A. LAMME and E. BOEKER, Nucl. Phys. **A111** (1968) 492.
- [70] D. M. Brink and G. R. Satchler, Angular Momentum (Oxford University Press, 1962).
- [71] A. Messiah, Quantum Mechanics (North-Holland Publishing Co., Amsterdam, 1965).
- [72] A. Bohr, B. Mottelson, Nuclear Structure (Vol I, W.A Benjamin, INC. New York, Amsterdam 1969).
- [73] E. Caurier, Thèse de doctorat, Université Louis Pasteur, 1974.
- [74] R. Y. CUSSON and H. C. LEE, Nucl. Phys. **A211** (1973) 429.
- [75] B. GRAMMATICOS, Thèse Université Paris-Sud (1977) N° 1921.
- [76] P. O. Löwdin, Phys. Rev. **97** (1955) 1474.
- [77] P. O. Löwdin, Phys. Rev. **97** (1955) 1490.
- [78] K. W. Schmid and F. Grümmer, Z. Physik **A292** (1979) 15.
- [79] A. Watt, J. Phys. A : Gen. Phys. **5**, 584 (1972).
- [80] K. Burzyński and J. Dobaczewski, Phys. Rev. **C51**, 1825(1995).
- [81] J. M. Yao, J. Meng, P. Ring, and D. Pena Arteaga, Phys. Rev. **C79**, 044312 (2009), arXiv :0903.5027v2 [nucl-th].

- [82] M. Bender and P.-H. Heenen, Phys. Rev. **C78**, 024309 (2008).
- [83] K. Enami, K. Tanabe, and N. Yoshinaga, Phys. Rev. **C59**, 135 (1999).
- [84] B. Bally. PhD thesis, Université de Bordeaux, 2014.
- [85] J. Dobaczewski, W. Satuła, B.G. Carlsson, J. Engel, P. Olbratowski, P. Powalowski, M. Sadziak, J. Sarich, N. Schunck, A. Staszczak, M. Stoitsov, M. Zalewski, H. Zduńczuk, Comput. Phys. Commun. **180** (2009) 2361.
- [86] Chindhu S. Warke and M. R. Gunye, Phys. Rev. **155**, 1084 (1967).
- [87] J.RENAL, J. Phys. **31** (1970) 3
- [88] R. Rodríguez-Guzmán, J. L. Egido, L. M. Robledo, Nucl.Phys. **A709** (2002) 201, nucl-th/0204074.
- [89] J. L. Egido and L. M. Robledo, arXiv :nucl-th/0311106v1
- [90] Zao-Chun Gao and Mihai Horoi, Phys. Rev. **C79**, 014311 (2009).
- [91] N. Hinohara and Y. Kanada-En'yo, Phys. Rev. **C83**, 014321 (2011), arXiv :1008.4444 [nucl-th].
- [92] <http://www.nndc.bnl.gov/chart/>
- [93] D. R. Entem and R. Machleidt, Phys. Rev. **C68**, 041001(R) (2003).
- [94] R. Machleidt and D. R. Entem, Phys. Rep. **503**, 1 (2011).
- [95] R. Lozeva, H. Naïdja, F. Nowacki, J. Dudek, A. Odahara, C.-B. Moon, S. Nishimura, P. Doornenbal, J.-M. Daugas, P.-A. Söderström, T. Sumikama, G. Lorusso, J. Wu, Z. Y. Xu, H. Baba, F. Browne, R. Daido, Y. Fang, T. Isobe, I. Kojouharov, N. Kurz, Z. Patel, S. Rice, H. Sakurai, H. Schaffner, L. Sinclair, H. Watanabe, A. Yagi, R. Yokoyama, T. Kubo, N. Inabe, H. Suzuki, N. Fukuda, D. Kameda, H. Takeda, D. S. Ahn, D. Murai, F. L. Bello Garrote, F. Didierjean, E. Ideguchi, T. Ishigaki, H. S. Jung, T. Komatsubara, Y. K. Kwon, P. Lee, C. S. Lee, S. Morimoto, M. Niikura, H. Nishibata and I. Nishizuka, Phys. Rev. **C93**, 014316 (2016).
- [96] H. Naïdja, B. Bounthong and F. Nowacki to be published.
- [97] R. N. OEHLBERG, L. L. RIEDINGER, A. E. RAINIS, A. G. SCHMIDT, E. G. FUNK and J. W. MIHELICH, Nucl. Phys. **A219** (1974) 543.



- [98] F. Corminboeuf, J. Jolie, H. Lehmann, K. Föhl, F. Hoyler, H. G. Börner, C. Doll, and P. E. Garrett, Phys. Rev. **C56**, R1201(R) (1997).
- [99] M.F. Kidd, J.H. Esterline, S. W. Finch and W. Tornow, Phys. Rev. **C90**, 055501 (2014), arXiv :1411.3755 [nucl-ex].
- [100] S. W. Yates, Noah R. Johnson, L. L. Riedinger, and A. C. Kahler, Phys. Rev. C **17**, 634 (1978).
- [101] K. Hauschild, M. Rejmund, H. Grawe, E. Caurier, F. Nowacki, F. Becker, Y. Le Coz, W. Korten, J. Döring, M. Górska, K. Schmidt, O. Dorvaux, K. Helariutta, P. Jones, R. Julin, S. Juutinen, H. Kettunen, M. Leino, M. Muikku, P. Nieminen, P. Rahkila, J. Uusitalo, F. Azaiez, and M. Belleguic, Phys. Rev. Lett. **87**, 072501 (2001).
- [102] T. T. S. Kuo and G. H. Herling, NRL Memorandum Report No. 2258, 1971.
- [103] E. K. Warburton and B. A. Brown, Phys. Rev. **C43**, 602 (1991).
- [104] R.-D. Herzberg, P. T. Greenlees, P. A. Butler, G. D. Jones, M. Venhart, I. G. Darby, S. Eeckhaudt, K. Eskola, T. Grahn, C. Gray-Jones, F. P. Hessberger, P. Jones, R. Julin, S. Juutinen, S. Ketelhut, W. Korten, M. Leino, A.-P. Leppänen, S. Moon, M. Nyman, R. D. Page, J. Pakarinen, A. Pritchard, P. Rahkila, J. Sarén, C. Scholey, A. Steer, Y. Sun, Ch. Theisen and J. Uusitalo, Nature **05069**, (2006) 896.
- [105] R.-D. Herzberg, P.T. Greenlees, Prog. Part. and Nucl. Phys. **61** (2008) 674.
- [106] P.-H. Heenen, J. Skalski, A. Staszczak, D. Vretenar, Nucl. Phys. **A944** (2015) 415.
- [107] P. T. Greenlees, J. Rubert, J. Piot, B. J. P. Gall, L. L. Andersson, M. Asai, Z. Asfari, D. M. Cox, F. Dechery, O. Dorvaux, T. Grahn, K. Hauschild, G. Henning, A. Herzan, R.-D. Herzberg, F. P. Heßberger, U. Jakobsson, P. Jones, R. Julin, S. Juutinen, S. Ketelhut, T.-L. Khoo, M. Leino, J. Ljungvall, A. Lopez-Martens, R. Lozeva, P. Nieminen, J. Pakarinen, P. Papadakis, E. Parr, P. Peura, P. Rahkila, S. Rinta-Antila, P. Ruotsalainen, M. Sandzelius, J. Sarén, C. Scholey, D. Seweryniak, J. Sorri, B. Sulignano, Ch. Theisen, J. Uusitalo and M. Venhart, Phys. Rev. Lett. **109**, 012501(2012).

- [108] J. Piot, B. J.-P. Gall, O. Dorvaux, P. T. Greenlees, N. Rowley, L. L. Andersson, D. M. Cox, F. Dechery, T. Grahn, K. Hauschild, G. Henning, A. Herzan, R.-D. Herzberg, F. P. Heßberger, U. Jakobsson, P. Jones, R. Julin, S. Juutinen, S. Ketelhut, T.-L. Khoo, M. Leino, J. Ljungvall, A. Lopez-Martens, P. Nieminen, J. Pakarinen, P. Papadakis, E. Parr, P. Peura, P. Rahkila, S. Rinta-Antila, J. Rubert, P. Ruotsalainen, M. Sandzelius, J. Sarén, C. Scholey, D. Seweryniak, J. Sorri, B. Sulignano and J. Uusitalo, *Phys. Rev.* **C85**, 041301(R) (2012).
- [109] K. Hauschild, M. Rejmund, H. Grawe, E. Caurier, F. Nowacki, F. Becker, Y. Le Coz, W. Korten, J. Döring, M. Górska, K. Schmidt, O. Dorvaux, K. Helariutta, P. Jones, R. Julin, S. Juutinen, H. Kettunen, M. Leino, M. Muikku, P. Nieminen, P. Rahkila, J. Uusitalo, F. Azaiez, and M. Bellegric, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 072501 (2001).
- [110] Y. Utsuno, N. Shimizu, T. Otsuka, and T. Abe, *Comp. Phys. Comm.*, **184**, 102 (2013).
- [111] T. Nikšić, D. Vretenar, and P. Ring, *Phys. Rev.* **C73**, 034308 (2006).
- [112] T. Nikšić, D. Vretenar, and P. Ring, *Phys. Rev.* **C74**, 064309 (2006).
- [113] J. M. Yao, J. Meng, P. Ring, and D. Vretenar, *Phys. Rev.* **C81**, 044311 (2010), arXiv :0912.2650 [nucl-th].
- [114] T. Togashi, N. Shimizu, Y. Utsuno, T. Abe, T. Otsuka, *Proc. Comp. Science*, **29** (2014) 1711.
- [115] A. Poves et A. P. Zuker, *Phys. Rep.* **70**, 235 (1981).
- [116] A. P. Zuker, J. Retamosa, A. Poves, E. Caurier, *Phys. Rev.* **C52**, R1751 (1995).
- [117] A. Poves, G. Martínez-Pinedo, *Phys. Lett.* **B430**, 203 (1998).
- [118] E. Caurier, G. Martínez-Pinedo, F. Nowacki, A. Poves, and A. P. Zuker *Rev. Mod. Phys.* **77**, 427 (2005).
- [119] S.M. Lenzi, D.R. Napoli, A. Gadea, M. A. Cardona, D. Hojman, M.A. Nagarajan, C. Rossi Alvarez, N.H. Medina, G. de Angelis, D. Bazzacco, M.E. Debray, M. De Poli, S. Lunardi, D. de Acuña, *Z. Phys. A* **354**, 117 (1996).

- 
- [120] S. M. Lenzi, C. A. Ur, D. R. Napoli, M. A. Nagarajan, D. Bazzacco, D. M. Brink, M. A. Cardona, G. de Angelis, M. De Poli, A. Gadea, D. Hojman, S. Lunardi, N. H. Medina and C. Rossi Alvarez, *Phys. Rev.* **C56**, 1313 (1997).



# Table des figures

1.1	Méthodes théoriques pour le problème à N corps nucléaire à travers la charte des noyaux. Ce schéma est tiré de la référence [1] . . . . .	4
2.1	Espace de Hilbert schématique . . . . .	12
2.2	Hiérarchie des forces nucléaires dans la théorie de perturbation chirale, classées selon l'ordre chiral $\nu$ et le développement en fonction de $\left(\frac{Q}{\Lambda_\chi}\right)^\nu$ [21]. . . . .	16
3.1	Interprétation de la forme du noyau dans le plan des déformations $(\beta, \gamma)$ , cette interprétation n'est plus valable si le déterminant de Slater est brisé la symétrie par renversement du temps. . . . .	28
3.2	Exemple la sélection de base de couche <i>sd</i> : la première ligne est la base complète utilisée dans le modèle en couches, la deuxième ligne est la base de Hartree-Fock et utilisée pour développer l'orbite $ \lambda\rangle$ l'Eq. (3.9) et la dernière ligne est la base pour développer l'orbite du renversement du temps $ \tilde{\lambda}\rangle$ l'Eq. (3.26), les chiffres dans la boîte sont les valeurs de $2m$ (par exemple <b>-5</b> = $2m$ ) . . . . .	30
3.3	Comparaison des solutions de calculs Hartree-Fock et la diagonalisation du modèle en couches dans $^{28}\text{Si}$ avec interaction effective USD. . . . .	32
3.4	Déformations des noyaux pair-pair de la couche <i>sd</i> pour $10 \leq Z, N \leq 18$ , avec l'interaction USD. . . . .	34
4.1	Image de l'interprétation des contraintes linéaire (a), quadratique (b), et de la méthode du lagrangien augmenté (c). La figure est tirée de la réf. [51]. . . . .	40

4.2	Espace de valence pour la description des noyaux $N = Z$ . . . . .	44
4.3	Surface d'énergie potentielle des noyaux $N = Z$ : $^{72}\text{Kr}$ , $^{76}\text{Sr}$ et $^{80}\text{Zr}$ , la séparation des lignes du contour est 1 MeV, 0.25 MeV pour les lignes pointillées. . . . .	46
4.4	Espace de valence $pf$ - $sdg$ . . . . .	48
4.5	Energies Individuelles Effectives proton (en haut) et neutron (en bas) à $N=50$ . . . . .	49
4.6	Surfaces d'énergie potentielle pour les isotopes de nickel, la séparation des lignes du contour est 1 MeV, 0.25 MeV pour les lignes pointillées, [62].	50
4.7	Surfaces d'énergie potentielle pour les isotopes de fer, la séparation des lignes du contour est 1 MeV, 0.25 MeV pour les lignes pointillées, [62].	51
4.8	Surfaces d'énergie potentielle pour les isotopes de chrome, la séparation des lignes du contour est 1 MeV, 0.25 MeV pour les lignes pointillées, [62].	52
4.9	Calcul modèle en couches des énergies des bandes Yrast et Yrare (MeV) et taux de transition E2 en ( $\text{e}^2\text{fm}^4$ ) pour le $^{140}\text{Sm}$ [8]. . . . .	55
4.10	Surface d'énergie potentielle de la minimisation Hartree-Fock avec contrainte dans la base du modèle en couches, la séparation des lignes du contour est 1 MeV, 0.25 MeV pour les lignes pointillées. . . . .	57
4.11	Spectres et taux de transition E2 du $^{42}\text{Ca}$ de l'expérimentale et de la diagonalisation du modèle en couches [7]. . . . .	58
4.12	Surface d'énergie potentielle du $^{42}\text{Ca}$ , la séparation des lignes du contour est 1 MeV, 0.5 MeV pour les lignes pointillées [7]. . . . .	59
5.1	Spectre du $^{28}\text{Si}$ obtenu par projeté d'un état axial (oblate) de Hartree-Fock et la diagonalisation du modèle en couche avec interaction effective USD, l'énergie est en keV et $B(E2)$ est en $\text{e}^2\text{fm}^4$ , les valeurs d'expérimentales sont tirés de ref. [91, 92] . . . . .	70
5.2	Energies du $^{20}\text{Ne}$ obtenues par les calculs Hartree-Fock avec projection sur $J^+$ d'un état axial (prolate) et la diagonalisation complète du modèle en couches avec l'interaction $SU(3)$ et USD. . . . .	71
5.3	Courbe d'énergie potentielle des moments angulaires totaux : $0^+$ , $2^+$ , $4^+$ , $6^+$ du $^{20}\text{Ne}$ . Les énergies sont en MeV . . . . .	72

5.4	Energie et spectre du $^{74}\text{Cr}$ obtenue par projeté l'état de la symétrie axiale (prolate voir Fig. 4.8) de Hartree-Fock et la diagonalisation du modèle en couches, énergie est en keV et $B(E2)$ est en $\text{e}^2\text{fm}^4$ . . . . .	73
5.5	Courbe d'énergie potentielle des moments angulaires totaux $J^\pi : 0^+, 2^+, 4^+, 6^+$ et du champs moyen Hartree-Fock en fonction des paramètres des déformations $\beta$ du $^{74}\text{Cr}$ . . . . .	74
5.6	Spectres du $^{76}\text{Sr}$ et $^{80}\text{Zr}$ obtenue par projeté l'état axial (prolate) de Hartree-Fock avec interaction JUN45.LNPS et les valeurs d'expérimentales sont tirées de [57, 92], énergie est en KeV et $B(E2)$ est en $\text{e}^2\text{fm}^4$ .	75
5.7	Surfaces d'énergies potentielles du $^{164}\text{Dy}$ , $^{150}\text{Nd}$ et $^{150}\text{Sm}$ avec l'interaction N3LO. La séparation des lignes du contour est 1 MeV, 0.25 MeV pour les lignes pointillées. . . . .	77
5.8	Energie absolu projetée de l'état axial Hartree-Fock et spectres du noyau $^{164}\text{Dy}$ . Les énergies sont en keV, les valeurs expérimentales ont pris de [92, 97, 98]. . . . .	78
5.9	Spectres du noyau $^{150}\text{Nd}$ . Les énergies sont en keV, les valeurs expérimentales ont pris de réf. [92, 100]. . . . .	79
5.10	Spectres du noyau $^{150}\text{Sm}$ . Les énergies sont en keV, les valeurs expérimentales ont pris de réf. [92, 99]. . . . .	80
5.11	Prédictions des positions des orbites sphériques dans la région des noyaux superlourds avec un gaps assez grand pour $Z = 114$ ou $Z = 120$ . Ce schéma est tiré de [104]. . . . .	81
5.12	Surface d'énergie potentielle du $^{254}\text{No}$ , $^{256}\text{Rf}$ et $^{246}\text{Fm}$ calcul avec interaction effective Kuo-Herling [102, 103], la séparation des lignes du contour est 1 MeV, 0.25 MeV pour les lignes pointillées. . . . .	82
5.13	Spectres rotationnelles des noyaux $^{254}\text{No}$ et $^{256}\text{Rf}$ , obtenus par calculs Hartree-Fock avec projection sur l'état axial prolate, énergie est en KeV, les valeurs expérimentales sont tirées de ref. [104, 105, 107]. . . . .	83
5.14	Spectres rotationnelles du $^{246}\text{Fm}$ obtenus par calculs Hartree-Fock avec projection sur l'état axial prolate, énergie est en KeV, les valeurs expérimentales sont tirées de ref. [108]. . . . .	85

5.15	Energies Individuelles Effectives proton (en haut) et neutron (en bas) à N=184 . . . . .	86
5.16	Energies du premier état excité $2^+$ des isotones N=126 . . . . .	87
5.17	Energies du premier état excité $2^+$ des isotones N=184 . . . . .	87
6.1	Spectre du $^{28}\text{Si}$ obtenue par projeté l'état de la symétrie axial de Hartree-Fock, par mélange des déterminants de Slater (on discrétise le paramètre $\beta \in [0, 0.54]$ avec un pas 0.01 et $\gamma = 180^\circ$ ) et diagonalisation du modèle en couche avec interaction USD. Les énergies sont en keV et les B(E2) en $e^2\text{fm}^4$ . Les valeurs d'expérimentales sont tirées de [91] et [92] . . . . .	96
6.3	Spectre du $^{48}\text{Cr}$ , obtenu par calcul Hartree-Fock avec projeté sur létat axial (prolate), par mélange les différences solutions axiales de Hartree-Fock (discétisation de $\beta \in [0, 0.4]$ avec un pas 0.02 et $\gamma = 0$ ), par la diagonalisation du modèle en couches [118] avec l'interaction KB3 [115] dans la couche $pf$ , la valeurs expérimentales tirées de [92, 119]. . . . .	97
6.2	Surfaces dénergies potentielles du $^{48}\text{Cr}$ et $^{50}\text{Cr}$ , calculs avec interaction effective KB3 [115] . . . . .	98
6.4	Spectres rotationnelles du $^{50}\text{Cr}$ , les énergies sont en KeV et les valeurs expérimentales sont tirées de [92, 120]. . . . .	99
6.5	Energie de transition de la bande Yrast du $^{48}\text{Cr}$ et $^{50}\text{Cr}$ . . . . .	100



# Liste des tableaux

3.1	Solutions Hartree-Fock déformées avec l'interaction USD pour les noyaux $N = Z$ de la couche $sd$ . Les énergies sont en MeV, les moments quadrupolaires en $eb^2$ et $\gamma$ est en degrés. . . . .	31
3.2	Occupations des orbites sphériques du $^{28}\text{Si}$ pour les calculs Hartree-Fock déformés (état axial prolate) et la diagonalisation du modèle en couches. . . . .	32
3.3	Solution Hartree-Fock déformée avec interaction $SU(3)$ pour les noyaux $N = Z$ , l'énergie est en MeV, le moment quadrupolaires est en $eb^2$ . . . . .	33
4.1	Occupations des orbites sphériques du $^{72}\text{Kr}$ , $^{76}\text{Sr}$ et $^{80}\text{Zr}$ , pour les calculs Hartree-Fock déformés avec l'Hamiltonien effectif JUN45.LNPS. . . . .	44
4.2	Taux de transitions E2 estimés entre les deux premiers états des isotopes du $^{72}\text{Kr}$ , $^{76}\text{Sr}$ et $^{80}\text{Zr}$ . Les $B(E2)$ sont exprimés en $e^2\text{fm}^4$ , les valeurs expérimentales sont tirées des réf. [56, 57]. . . . .	45
4.3	Propriétés E2 calculées des états Yrast des isotopes $N = 46 - 50$ . Les paramètres de déformations obtenues par minimisation Hartree-Fock voir Fig. 4.8, Fig. 4.7 . . . . .	53
4.4	Propriétés de déformation du $^{140}\text{Sm}$ . . . . .	56
4.5	Occupations des orbites sphériques par rapport à la diagonalisation du modèle en couches . . . . .	56
5.1	$E_{HF}$ est l'énergie Hartree-Fock déformée, $E_{PHF}$ est l'énergie Hartree-Fock avec projection ( $J = 0$ ) de l'état axial et $E_{SM}$ est l'énergie de la diagonalisation du modèle en couches. Les énergies sont en MeV. . . . .	69

- 5.2 Occupations des orbites sphériques du minimum Hartree-Fock des noyaux  
 $^{246}\text{Fm}$ ,  $^{254}\text{No}$  et  $^{256}\text{Rf}$  . . . . . 84
- 5.3 Occupations des orbites sphériques de l'état fondamental du noyau  $Z=114/N=184$   
avec l'interaction de Kuo-Herling . . . . . 87

**Résumé** Nous présentons une approche alternative aux diagonalisations exactes de calculs en modèles en couches pour l'étude microscopique de la structure nucléaire. Nous avons tout d'abord minimisé l'énergie totale du système par la résolution des équations Hartree-Fock dans la base définie par l'espace de valence du modèle en couches. La mise au point de ce programme a été par comparaison des résultats avec les solutions de problèmes solubles analytiquement comme ceux d'un hamiltonien  $SU(3)$  ou par comparaison avec des diagonalisations exactes du modèle en couches. Ensuite, nous avons mis au point des procédures pour l'obtention de ces mêmes calculs avec contraintes pour une description complète de la surface d'énergie potentielle d'un noyau donné en fonction des degrés de liberté  $Q_{20}$  et  $Q_{22}$ . La restauration du moment angulaire par méthode de projections a permis d'obtenir les spectres des noyaux rotationnels dans le cas axial et dans le cas triaxial. La méthode des coordonnées génératrices a permis le mélange de ces déterminants de Slater non orthogonaux. Parmi les différentes applications, nous avons pu décrire les noyaux déformés le long de la ligne  $N = Z$  autour du  $^{80}\text{Zr}$  ou un nouvel îlot d'inversion à  $N = 50$ . Enfin, une première application dans la région des noyaux superlourds a permis de confirmer la qualité de l'interaction effective Kuo-Herling et de prédire un gap sphérique (donc plus stable a priori) pour l'isotope **Z=114, N=184**.

**Mots-clefs :** structure nucléaire, modèle en couches, états de Nilsson, Hartree-Fock déformé, restauration du moment angulaire, méthode des coordonnées génératrices, disparition de fermetures de couches.

**Abstract** We present an alternative approach to shell diagonalizations for microscopic description of nuclear structure. First we minimized the total system energy solving the Hartree-Fock equations within the shell model valence space. The results are compared with exact shell model diagonalization and an exact soluble  $SU(3)$  hamiltonian. Then, we developed procedures to obtain the same of type calculations with constrained conditions on the quadrupole degrees of freedom to obtain the full potential energy surfaces. The angular momentum restoration was obtained through projection method to generate rotational spectra of nuclei in both axial and triaxial cases. finally the generate coordinate method was applied to mix several of these non-orthogonal Slater determinants. Among several applications we managed to describe deformed nuclei along the  $N = Z$  line around  $^{80}\text{Zr}$  or a new island of deformation at  $N = 50$ . Finally, a first application in the superheavy region predicts a spherical gap for the **Z=114, N=184** isotope.

**Keywords :** nuclear structure, shell model, Nilsson states, deformed Hartree-Fock, angular momentum projection, generate coordinate method, vanishing of shell closures.