

Mémoire d'habilitation à diriger des  
recherches

CORRÉLATIONS ET SYMÉTRIES DANS LES  
NOYAUX ATOMIQUES

L. Bonneau

Université Bordeaux 1 – CENBG

30 juillet 2013

Annexe B révisée le 27 novembre 2014



# Table des matières

<b>Introduction</b>	<b>iii</b>
<b>I Modèles de champ moyen et au-delà</b>	<b>1</b>
1) Champ moyen nucléaire . . . . .	1
2) Interactions effectives . . . . .	3
3) Corrélations au-delà du champ moyen . . . . .	5
<b>II Traitement de l'interaction coulombienne</b>	<b>7</b>
1) Éléments de matrice dans la base d'oscillateur harmonique . . . . .	7
2) Tests de l'approximation de Slater . . . . .	9
<b>III Etats nucléaires appariés et symétries</b>	<b>13</b>
1) Corrélations d'appariement . . . . .	13
2) Etats fondamentaux appariés loin de la ligne $N = Z$ . . . . .	15
3) Appariement et symétries dans les noyaux $N = Z$ . . . . .	18
<b>IV Brisure de symétrie d'isospin</b>	<b>27</b>
1) Distribution d'isospin d'un état nucléaire . . . . .	27
2) Mélange d'isospin dans les noyaux pair-pairs $N = Z$ . . . . .	28
3) Transitions de Fermi super-permises $0^+ \rightarrow 0^+$ . . . . .	33
<b>V Polarisation du cœur dans les noyaux impairs</b>	<b>37</b>
1) Différences d'énergie de liaison . . . . .	37
2) Moments dipolaires magnétiques . . . . .	41
<b>Conclusion</b>	<b>45</b>
<b>Annexes</b>	<b>47</b>
<hr/>	
<b>A Interaction nucléon-nucléon</b>	<b>47</b>
<b>B Formalisme de Skyrme–Hartree–Fock–BCS</b>	<b>55</b>
<b>C Théorie de perturbation à <math>N</math> corps</b>	<b>61</b>
<b>D Éléments de matrice de l'opérateur <math>\hat{T}^4</math></b>	<b>63</b>
<b>Références et publications</b>	<b>65</b>



# Introduction

La structure des noyaux atomiques à basse énergie d'excitation constitue, avec une assez bonne approximation, un problème à  $N$  corps quantique non relativiste. On peut alors considérer que tout modèle microscopique décrivant le noyau atomique dans ce cadre fait intervenir trois ingrédients : (i) les constituants du système (les nucléons, dont la structure interne en quarks est négligeable aux énergies d'excitation considérées, à savoir quelques MeV), (ii) l'interaction entre ces constituants, et (iii) une méthode de résolution approchée du problème à  $N$  corps.

La Physique nucléaire se distingue alors des autres domaines de la Physique microscopique par la nature complexe de l'interaction effective entre les nucléons : elle est non locale et possède une contribution appréciable à trois corps. Devant les difficultés techniques engendrées par une telle interaction, des "interactions" effectives à deux corps dépendant de la densité ont été développées, notamment dans des approches de type champ moyen. C'est le cas des interactions de Skyrme [Skyrme59] et de Gogny [Dechargé80] ajustées dans le cadre de l'approximation Hartree–Fock. Les interactions à deux corps développées et utilisées dans le cadre du modèle en couches sont également de nature effective.

Une caractéristique des approches de type champ moyen, reposant sur un principe variationnel approché, est la brisure spontanée de symétries dans la solution afin de minimiser l'énergie. Cette brisure de symétries peut s'exprimer comme l'incorporation de corrélations par rapport à une solution respectant ces symétries. C'est le cas notamment des symétries d'isospin, de renversement du temps et de celles liées à la forme du noyau. Cependant, la qualité de la fonction d'onde de champ moyen n'est pas toujours suffisante pour décrire les autres observables que l'énergie de liaison du noyau et nécessite le traitement explicite de certaines corrélations.

Dans ce contexte, ce mémoire est une synthèse des travaux que j'ai effectués depuis 2007 autour des notions de symétrie en se concentrant sur deux d'entre elles : l'isospin et le renversement du temps. Le fil conducteur est le lien entre les corrélations de type appariement et ces symétries. Il est étudié dans le cadre de modèles de champ moyen et au-delà (par mélange de configurations de type excitations particules-trous) présentés dans les chapitres 1 et 2. Ce dernier illustre en particulier les effets d'une approximation largement répandue de densité locale des termes d'échange de l'interaction à longue portée qu'est l'interaction de Coulomb. Dans le cadre de l'approche par mélange de configurations particules-trous (Highly Truncated Diagonalization Approach ou HTDA), le rôle des corrélations d'appariement dans la structure des états nucléaires de basse énergie est ensuite étudié en détail dans le chapitre 3. Enfin les deux derniers chapitres illustrent des études de la symétrie approchée d'isospin (qui a fait l'objet de la thèse de J. Le Bloas que j'ai contribué à encadrer) et de la brisure de symétrie de renversement du temps dans la description des noyaux impairs, en mettant l'accent sur le rôle des corrélations d'appariement.



# Chapitre I

## Modèles de champ moyen et au-delà

### 1) Champ moyen nucléaire

Dans ce chapitre, la notion de champ moyen nucléaire, qui sous-tend l'approche HTDA, est présentée afin de mieux situer cette dernière dans le paysage des modèles de structure nucléaire et d'en comprendre l'intérêt physique.

#### 1.a) Approches de particules indépendantes

De façon générale, une approche de particules indépendantes consiste à postuler l'existence d'un potentiel  $\hat{U}$  ressenti par chaque nucléon et à décrire l'état du noyau par un déterminant de Slater d'états individuels propres du hamiltonien à 1 corps  $\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \hat{U}$ . Les modèles reposant sur cette approximation diffèrent par le choix du potentiel  $\hat{U}$ . Parmi les plus répandus, citons les potentiels d'oscillateur harmonique, de Woods-Saxon et de Nilsson. Au terme central dont la forme analytique donne son nom au modèle, est ajouté un terme de couplage spin-orbite responsable des nombres magiques observés dans les noyaux atomiques. Il est à noter qu'historiquement le modèle en couches s'est d'abord apparenté à une approximation de particules indépendantes dans un potentiel sphérique avant de se raffiner avec la prise en compte de l'interaction résiduelle.

Afin de décrire les noyaux à couches ouvertes dans une approche de particules indépendantes, il devient avantageux énergétiquement de considérer un potentiel central ne possédant plus la symétrie sphérique. La plupart de ces "modèles en couches déformés" reposent sur des potentiels à symétrie axiale. On obtient alors une déformation statique dans le repère intrinsèque du noyau. Cette déformation est quantifiable par exemple à l'aide des moments multipolaires de la densité de nucléons et peut être confrontée aux valeurs déduites des mesures de transitions électriques (notamment E2). Parmi ces modèles celui de Nilsson est sans doute celui qui a connu le plus grand succès grâce à sa capacité de reproduction et de prédiction des déformations dans l'état fondamental des noyaux en milieu de couches. En outre, dans les noyaux impairs ce type de modèle fournit les propriétés individuelles du nucléon célibataire qui, dans le cadre du modèle unifié de Bohr et Mottelson, se couplent au mouvement collectif de rotation du cœur pair-pair sous-jacent. Dans ce cas on peut facilement déduire certaines propriétés des noyaux impairs dans l'état fondamental comme le moment angulaire, la parité, les moments nucléaires impairs par renversement du temps (dipolaire magnétique...), ainsi que la bande de rotation construite sur cet état. Certaines de ces propriétés seront discutées dans le cadre de l'approximation de Hartree-Fock et de

l'approche HTDA dans le chapitre V.

Les succès des approches de particules indépendantes reposent sur la nature fermionique des nucléons et la portée de l'interaction nucléaire forte. En effet, cette dernière a une courte portée, comparable à la taille du nucléon, et pour des états nucléaires de basse énergie, le principe d'exclusion de Pauli conduit à un libre parcours moyen des nucléons de l'ordre de la taille du noyau. On comprend alors qu'en première approximation chaque nucléon se meut indépendamment des autres dans le noyau sous l'effet d'un potentiel moyen confinant. Ce dernier résulte en toute rigueur de l'interaction nucléon-nucléon, essentiellement attractive et à deux corps, mais est paramétrisé par des fonctions analytiques simples dans les approches de particules indépendantes.

### 1.b) Champ moyen autocohérent

Au lieu d'être paramétrisé, le potentiel moyen utilisé dans les approches de particules indépendantes et résultant de l'interaction nucléon-nucléon  $\hat{V}$  peut être calculé si l'on maintient l'idée ci-dessus que l'état fondamental du noyau est bien représenté par un déterminant de Slater. En effet il suffit alors d'appliquer le principe variationnel restreint à l'ensemble des déterminants de Slater. Cela constitue l'approximation de Hartree–Fock et conduit à une équation autocohérente aux valeurs propres pour le hamiltonien  $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{U}$  où le potentiel  $\hat{U}$  cherché dépend des états propres de  $\hat{H}$ . On montre que ce potentiel n'est autre que la réduction à 1 corps de  $\hat{V}$  pour le déterminant de Slater solution des équations de Hartree–Fock. On appelle alors  $\hat{U} = \bar{V}$  champ moyen autocohérent [Ring80].

Physiquement la solution de Hartree–Fock (HF) représente la meilleure solution de particules indépendantes du point de vue variationnel. Autrement dit elle possède l'énergie la plus basse possible compte tenu de la forme de déterminant de Slater imposée et se situe au-dessus de la valeur exacte si l'on suppose connue l'interaction nucléaire  $\hat{V}$  (indépendante de la densité). On s'attend donc à ce que l'énergie de liaison soit l'observable la mieux décrite dans l'approximation de champ moyen autocohérent. Cependant, la qualité de reproduction de cette observable est souvent associée à des brisures de symétrie dans la solution HF (notamment les symétries de rotation, de parité et de renversement du temps), qui rendent le déterminant de Slater correspondant inadéquat pour décrire les observables liées à ces symétries. Par conséquent le champ moyen auto-cohérent en tant que tel ne peut constituer un modèle totalement satisfaisant de structure nucléaire et doit être complété par la prise en compte explicite des corrélations autres que celles dues au principe de Pauli. Ceci fait l'objet de la sous-section 3.a).

Dans le processus itératif inhérent à la résolution des équations de Hartree–Fock, on a recours le plus souvent au théorème des symétries auto-cohérentes selon lequel la solution HF possède une symétrie  $\hat{S}$  si la matrice densité réduite à un corps initiale possède cette symétrie [Ring80]. Cette propriété permet de conférer à la solution des symétries que doit posséder l'état fondamental du noyau et facilite grandement la résolution numérique des équations HF. Dans tous les résultats présentés dans ce mémoire on suppose que l'état intrinsèque possède la symétrie axiale de révolution autour de l'axe ( $Oz$ ), où  $O$  désigne le centre de masse du noyau, et la symétrie de parité qui se traduit, compte tenu de la symétrie axiale, par la symétrie de réflexion par rapport au plan ( $Oxy$ ).

Enfin, il est important de noter que la symétrie de translation ne peut jamais être une symétrie auto-cohérente car un déterminant de Slater possède trois degrés de liberté de plus qu'il est nécessaire dans le référentiel du centre de masse. Par conséquent le mouvement de



ce dernier doit être soustrait en valeur moyenne de l'énergie de liaison. C'est ce qui est fait en ne tenant compte toutefois que du terme à un corps de l'opérateur d'énergie cinétique. Dans l'approximation de masses égales pour les neutrons et les protons, cette correction se traduit par le simple facteur de renormalisation  $1 - \frac{1}{A}$  de l'énergie cinétique à un corps.

## 2) Interactions effectives

Hormis la difficulté intrinsèque du problème à  $N$  corps, la Physique nucléaire fait face à une difficulté supplémentaire : la méconnaissance de l'interaction entre nucléons lorsqu'ils sont assimilés à des particules (relativistes ou non) sans structure interne. En principe cette interaction découle de l'interaction forte décrite dans le cadre de la Chromodynamique quantique (QCD), mais en raison du caractère non perturbatif de QCD à basse énergie, il est extrêmement difficile d'établir l'expression de l'interaction ne serait-ce qu'entre un neutron et un proton liés en un deutéron. Il est alors nécessaire de recourir à une simplification des degrés de liberté qui, en structure nucléaire à basse énergie, se limitent aux nucléons dans leur état fondamental et aux mésons  $\pi$ , vecteurs de l'interaction forte entre nucléons. On obtient alors une théorie des champs effective [Weinberg90]. Par la suite, le qualificatif "effectif" pour une interaction va prendre un sens différent selon le contexte théorique qui sera précisé.

### 2.a) Interactions réalistes

De façon générale on qualifie de réaliste une interaction dont la forme est déterminée à partir des symétries et qui reproduit des données de diffusion nucléon-nucléon (déphasages) et éventuellement d'états liés à 3 nucléons. Parmi les plus couramment employées pour leur succès, citons celles obtenues dans le cadre de la théorie des champs effective chirale, les potentiels de Paris [Lacombe80], de Bonn [Machleidt87], de Nijmegen [Stoks94] et d'Argonne [Wiringa95]. Ces potentiels possèdent des propriétés très similaires à longue portée et sont fortement répulsives à courte portée (bien qu'elles diffèrent dans leur forme). En raison de cette dernière caractéristique ces interactions sont qualifiées d'interactions à cœur dur et sont inutilisables directement dans les méthodes de résolution du problème à  $N$  corps (notamment de champ moyen et du modèle en couches). Il est nécessaire de les renormaliser au préalable, par exemple dans le cadre de l'approche de Brueckner [Brueckner58].

Outre la lourdeur des calculs, qui limitent l'emploi d'une telle approche aux noyaux légers, un inconvénient majeur est la dépendance en énergie de l'interaction effective qui en résulte. Récemment, une autre approche [Bogner03] reposant sur le groupe de renormalisation a été développée pour transformer l'interaction nue à cœur dur en interaction dite à cœur mou (appelée génériquement  $\hat{V}_{low k}$ ) utilisable dans les méthodes de résolution du problème à  $N$  corps (en particulier la théorie de perturbation [Coraggio03]).

### 2.b) Interactions phénoménologiques

Très tôt une alternative à la détermination d'interactions effectives réalistes a vu le jour pour simplifier l'interaction nucléon-nucléon et son utilisation dans différentes méthodes de résolution du problème à  $N$  corps : les interactions effectives phénoménologiques. Leur forme est déterminée partiellement par les symétries tandis que leurs constantes de couplage sont ajustées à des données expérimentales dans le cadre d'une approximation donnée

du problème à  $N$  corps. C'est le cas des interactions utilisées dans le modèle en couches avec un espace de valence donné adapté à la région de masse d'intérêt, et des interactions de type Skyrme [Skyrme59] ou Gogny [Dechargé80] développées dans les approches de champ moyen (avec effet à un corps des corrélations d'appariement) de type Hartree–Fock–BCS (HFBCS) ou Hartree–Fock–Bogolyubov (HFB) [Ring80]. En raison d'un terme dépendant de la densité les interactions de Skyrme et de Gogny devraient plutôt être considérées comme des fonctionnelles. Cependant la forme de leurs expressions est inspirée de celle de la valeur moyenne d'un hamiltonien dans un état produit (HF, HFBCS ou HFB). C'est pour cela que le terme interaction sera quand même employé par la suite pour désigner ces fonctionnelles.

Dans ce travail tous les résultats de champ moyen sont obtenus dans l'approximation de Hartree–Fock–BCS avec l'interaction de Skyrme dans le canal particule-trou (voir l'annexe B pour les expressions de la densité d'énergie, des champs et des densités locales) et une force de séniorité dans le canal particule-particule. Cette dernière est paramétrisée sous la forme  $G_0^{(\tau)}/(11+N_\tau)$ , où  $N_\tau$  est le nombre de nucléons d'isospin  $\tau$  et  $G_0^{(\tau)}$  un paramètre ajustable (de l'ordre de 15 à 20 MeV typiquement). Un facteur de coupure sous la forme d'une fonction de Fermi de diffusivité  $\mu = 0.2$  MeV et d'énergie de coupure individuelle  $e_{\text{cut}} = \lambda_q + 6$  MeV (où  $\lambda_q$  est le potentiel chimique des nucléons de type  $q$ ) pondère les éléments de matrice de l'interaction d'appariement (voir par exemple la référence [Bonneau07] et celles qu'elle contient).

Compte tenu du caractère phénoménologique des interactions effectives utilisées dans les approches de champ moyen, deux points de vue sont traditionnellement adoptés pour l'ajustement des paramètres de Skyrme [Hellemans12] :

- le point de vue de l'interaction : les paramètres indépendants à considérer sont les constantes apparaissant dans les différents termes du potentiel d'interaction ;
- le point de vue de la fonctionnelle : les paramètres à considérer sont les constantes de couplage apparaissant dans l'expression (B.2) de la valeur moyenne de l'hamiltonien  $\hat{H}$  dans un état produit (HF, HFBCS ou HFB), en respectant l'invariance par changement de référentiel galiléen (voir l'annexe A pour les propriétés de symétrie de l'interaction  $NN$ ).

Dans le premier point de vue, tous les termes de l'énergie et des champs correspondant aux constantes de couplage  $B_1$  à  $B_{21}$  doivent être pris en compte, tandis que dans le point de vue de la fonctionnelle, on peut choisir d'écarter certains de ces termes. Quelle que soit l'approche adoptée, les ajustements de paramètres effectués jusqu'à présent reposent sur des observables de l'état fondamental des noyaux pair-pairs (notamment l'énergie de liaison et le rayon de charge), de sorte que les termes associés seulement aux densités locales impaires par renversement du temps ne sont pas contraints. Ces derniers peuvent alors conduire à des instabilités de spin dans la matière nucléaire [Pastore12]. C'est le cas notamment des paramétrisations SLy4, SLy5 et TII [Hellemans12]. Toutefois, Pastore et collaborateurs ont proposé très récemment un protocole d'ajustement garantissant la stabilité vis-à-vis des fluctuations de spin et d'isospin [Pastore13]. Dans les noyaux, l'apparition d'instabilités dépend de l'intensité des constantes de couplage  $C_t^{\Delta s}$  et  $C_t^{\nabla s}$  dans la représentation d'isospin de la fonctionnelle énergie (voir par exemple la référence [Lesinski07] pour la correspondance entre les jeux de constantes  $C_t$  et  $B_i$ ), mais aussi de la méthode numérique de résolution des équations de Hartree–Fock. Ici l'hamiltonien à un corps de Hartree–Fock est représenté dans la base d'oscillateur harmonique cylindrique tronquée et tous les éléments de matrice sont calculés par intégration numérique à l'aide d'une quadrature de Gauss–Hermite selon l'axe de symétrie et de Gauss–Laguerre dans le plan perpendiculaire (voir par exemple [Flocard73]).

Enfin, compte tenu du temps de calcul prohibitif, les ajustements de paramètres de Skyrme (et de Gogny) sont effectués en évaluant les termes d'échange de l'interaction de Coulomb à l'approximation de Slater (de densité locale) [Slater51], bien que cette approximation introduise certains biais systématiques qui ne peuvent être absorbés dans les paramètres (voir chapitre II).

### 3) Corrélations au-delà du champ moyen

#### 3.a) Corrélations et mélanges de configurations

L'état fondamental exact d'un noyau donné peut se décomposer sur la base des excitations particules-trous par rapport à un déterminant de Slater de référence (la solution de Hartree–Fock par exemple). On appelle corrélations toute combinaison linéaire d'excitations particules-trous par rapport à cet état de référence. Ce sont donc des mélanges de configurations autres que l'antisymétrisation due à la nature fermionique des nucléons. On peut classer les corrélations au-delà de la solution de champ moyen (autocohérent ou non) en trois grandes catégories suivant leur interprétation physique :

- l'appariement : excitations de paires particules-trous (où la notion de paires sera discutée dans la section 1) du chapitre III) ; l'effet à un corps de ces corrélations peut en fait être incorporé dans l'approche de champ moyen via la notion de quasi-particules et d'état produit (BCS ou plus généralement Bogoliubov) [Ring80] ;
- la restauration de symétrie : projection sur les états propres de l'opérateur de symétrie considérée ;
- les mouvements collectifs de grande amplitude : vibrations, rotations, déformation.

Notons que les corrélations de type "clusters" (comme les "quarterons" [Brémond66]) peuvent être vues comme englobant et étendant la notion d'appariement.

Il résulte de ce point de vue que des corrélations par rapport à un certain déterminant de Slater peuvent être absorbées dans la construction d'un autre déterminant de Slater. Un des exemples les plus importants est la déformation : la solution de particules indépendantes associée à un potentiel déformé  $\hat{U}(\epsilon)$  ( $\epsilon$  représentant un ensemble de paramètres pertinents de déformation tels que l'élongation, l'asymétrie de réflexion, la triaxialité...) peut se décomposer sur la base des excitations particules-trous par rapport à la solution de particules indépendantes du même potentiel mais à symétrie sphérique  $\hat{U}(0)$ .

La sous-section suivante présente l'approximation par diagonalisation hautement tronquée (HTDA) utilisée dans ce travail et conçue pour inclure certains types de corrélations au-delà d'une solution de champ moyen auto-cohérent.

#### 3.b) Excitations particules-trous

L'approche HTDA (initialement higher Tamm–Dancoff approximation puis highly truncated diagonalization approach) a été proposée dans la référence [Pillet02] puis appliquée et étendue dans de nombreux travaux, notamment ceux des références [Sieja07b, Naidja10, Lafchiev10, Hao12, Le Bloas12]. Une présentation concise seulement en est donc donnée ici.

Tout comme l'approche de Zeng et collaborateurs [Zeng83a], l'approche HTDA préserve la symétrie du nombre de particules grâce à un développement de l'état corrélé sur une base orthonormée de déterminants de Slater ayant le bon nombre de neutrons et de protons. L'état fondamental et les états excités de basse énergie sont déterminés en diagonalisant le

hamiltonien du noyau par la méthode de Lanczös [Lanczos50]. La base à  $N$  corps est en pratique un ensemble de configurations de type excitations  $m$ -particules– $m$ -trous ( $mpmh$ ) par rapport à un déterminant de Slater de référence appelé quasi-vide issu d’un calcul de champ moyen (typiquement HFBCS). En cela l’approche HTDA est similaire à la méthode “truncated configuration interaction” très répandue en Chimie quantique. Le choix des configurations retenues dépend de la nature des corrélations étudiées. La troncation de la base à  $N$  corps peut se faire de diverses manières : par des nombres fixés de niveaux de trous et de particules, par une fenêtre en énergie autour de l’énergie de Fermi (appelée fenêtre de valence), par énergie d’excitation de la configuration  $mpmh$ ... Compte tenu du caractère auto-cohérent de la solution HFBCS, on s’attend à ce que la base à  $N$  corps décrivant les corrélations d’appariement soit de taille beaucoup plus petite que celle rencontrée dans les calculs de modèles en couches.

Plus précisément, le hamiltonien du noyau

$$\hat{H} = \hat{K} + \hat{V}_{NN} + \hat{V}_C, \quad (I.1)$$

où  $\hat{K}$  est l’énergie cinétique (incluant la correction à un corps du centre de masse),  $\hat{V}_{NN}$  la partie nucléaire et  $\hat{V}_C$  la partie coulombienne de l’interaction nucléon-nucléon  $\hat{V}$ , est réécrit comme la somme d’un hamiltonien à un corps de quasi-particules et d’une interaction résiduelle en procédant de la manière suivante. Soit  $\hat{U}$  un potentiel à un corps attractif, obtenu dans ce travail par un calcul de champ moyen de type Skyrme–Hartree–Fock–BCS, et  $\hat{H}_0$  le hamiltonien associé

$$\hat{H}_0 = \hat{K} + \hat{U}. \quad (I.2)$$

Les états propres  $|k\rangle$  de ce dernier dans l’espace des états d’une particule (incluant les degrés de liberté de position, de spin et d’isospin) forment une base orthonormée. On note  $e_k$  les valeurs propres correspondantes. L’état fondamental de  $\hat{H}_0$  est un déterminant de Slater  $|\Phi_0\rangle$  qui sert d’état de référence pour la définition des produits normaux ( $: \hat{A} :$  désigne l’ordre normal de l’opérateur  $\hat{A}$ ). Le hamiltonien  $\hat{H}$  est alors partitionné selon

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{iqp}} + \hat{V}_{\text{res}} + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_0 \rangle, \quad (I.3)$$

avec

$$\hat{H}_{\text{iqp}} = : \hat{H}_0 : , \quad (I.4)$$

$$\hat{V}_{\text{res}} = : \hat{V} : + : \bar{V} - \hat{U} : . \quad (I.5)$$

L’opérateur  $\bar{V}$  désigne la réduction à un corps de  $\hat{V}$  pour  $|\Phi_0\rangle$ . Il est égal à  $\hat{U}$  lorsque la solution des équations de BCS correspond à des gaps d’appariement nuls.

Dans les applications citées plus haut de l’approche HTDA, partant d’une solution de champ moyen avec une interaction de Skyrme et décrivant les corrélations d’appariement, on remplace  $\hat{V}_{NN}$  par une interaction  $\hat{V}_\delta$  de portée nulle indépendante de la densité (voir chapitre III), ce qui nécessite de ne pas prendre en compte la contribution  $: \bar{V} - \hat{U} :$  à  $\hat{V}_{\text{res}}$ <sup>1</sup>.

1. Dans une base à  $N$  corps assez grande  $: \hat{H}_0 : + : \hat{V}_\delta : + : \bar{V} - \hat{U} :$  tendrait vers  $: \hat{K} + \hat{V}_\delta :$ .

# Chapitre II

## Traitement de l'interaction coulombienne

Dans les modèles non relativistes de structure nucléaire, les protons et les neutrons sont considérés comme des particules ponctuelles. La distribution de charge électrique dans les nucléons est négligée, si bien qu'en plus de l'interaction nucléaire forte, les protons ressentent l'interaction électromagnétique sous la forme du potentiel de Coulomb. Ce dernier est local (dans l'espace des positions) et indépendant du spin :

$$\langle \mathbf{r}_1 \sigma_1, \mathbf{r}_2 \sigma_2 | \hat{v}_C | \phi_1 \phi_2 \rangle = \delta_{\sigma_1 \sigma_2} \frac{e^2}{\|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2\|} \phi_1^{(\sigma_1)}(\mathbf{r}_1) \phi_2^{(\sigma_2)}(\mathbf{r}_2), \quad (\text{II.1})$$

où  $e^2 \approx 1.44 \text{ MeV} \cdot \text{fm}$ .

### 1) Éléments de matrice dans la base d'oscillateur harmonique

Pour évaluer exactement le potentiel coulombien ainsi que l'énergie d'interaction coulombienne, on a recours à l'expression analytique des éléments de matrice de l'interaction (II.1) dans la base d'oscillateur harmonique à symétrie axiale établie dans la référence [Quentin72]. Cette expression est déduite de l'expression correspondante pour une interaction gaussienne en utilisant la représentation intégrale suivante d'une fonction de Yukawa

$$\frac{e^{-\mu|s|}}{|s|} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty e^{-\mu^2 \sigma^2 / 2} e^{-s^2 / 2\sigma^2} \frac{d\sigma}{\sigma^2}, \quad (\text{II.2})$$

avec  $\mu = 0$  pour l'interaction de Coulomb.

La base d'oscillateur harmonique cylindrique est composée d'états de la forme [Flocard73, Vautherin73, Quentin72]

$$|n_z, \alpha, \beta, \Sigma\rangle = (-)^{\beta} \frac{(a_z^\dagger)^{n_z} (b_\alpha^\dagger)^\alpha (b_\beta^\dagger)^\beta}{\sqrt{n_z! \alpha! \beta!}} |000\rangle \otimes |\Sigma\rangle, \quad (\text{II.3})$$

où  $n_z$  est le nombre de phonons le long de l'axe de symétrie  $z$ . Les entiers  $\alpha$  et  $\beta$  sont définis en fonction du nombre de phonons dans la direction perpendiculaire  $n_\perp$  et de la valeur propre  $\Lambda$  (positive ou négative) du moment cinétique orbital suivant  $z$  par  $\alpha = (n_\perp + \Lambda)/2$  et  $\beta = (n_\perp - \Lambda)/2$ . Enfin  $\Sigma$  est la valeur propre de l'opérateur de spin suivant  $z$ .

Le calcul de l'élément de matrice

$$\langle n_{z_i} \alpha_i \beta_i, n_{z_j} \alpha_j \beta_j | \frac{e^2}{\|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2\|} | n_{z_k} \alpha_k \beta_k, n_{z_l} \alpha_l \beta_l \rangle \quad (\text{II.4})$$

repose sur la transformation de Moshinsky [Moshinsky59], dont les coefficients pour des phonons à une dimension de même fréquence peut s'écrire en termes de la matrice de rotation réduite de Wigner  $d_{M,M'}^J(\theta)$  (avec la convention de phase de Messiah) comme

$$\langle n_1 n_2 | | nN \rangle = \delta_{n_1+n_2, n+N} d_{(n-N)/2, (n_1-n_2)/2}^{(n_1+n_2)/2} \left( \frac{\pi}{2} \right) \quad (\text{II.5})$$

avec

$$d_{(n-N)/2, (n_1-n_2)/2}^{(n_1+n_2)/2} \left( \frac{\pi}{2} \right) = \sqrt{\frac{n_1! n_2! n! N!}{2^{n_1+n_2}}} \sum_{\ell=\max(0, n_2-N)}^{\min(n_2, n)} \frac{(-)^\ell}{(n_2 - \ell)! (N - n_2 + \ell)! \ell! (n - \ell)!} \dots \quad (\text{II.6})$$

La lettre minuscule  $n$  correspond à des degrés de liberté relatifs alors que la lettre majuscule  $N$  représente des degrés de liberté du centre de masse. L'élément de matrice (II.4) devient alors

$$\langle n_{z_i} \alpha_i \beta_i, n_{z_j} \alpha_j \beta_j | \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} | n_{z_k} \alpha_k \beta_k, n_{z_l} \alpha_l \beta_l \rangle = \sum_{n, a, b} f^n g^{ab} \langle nab, NAB | \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} | n' a' b', N' A' B' \rangle, \quad (\text{II.7})$$

avec  $f^n = \langle n_{z_i} n_{z_j} | | nN \rangle \langle n_{z_k} n_{z_l} | | n'N \rangle$  et  $g^{ab} = \langle \alpha_i \alpha_j | | aA \rangle \langle \beta_i \beta_j | | bB \rangle \langle \alpha_k \alpha_l | | a'A \rangle \langle \beta_k \beta_l | | b'B \rangle$ . Les valeurs des entiers  $n'$ ,  $a'$  et  $b'$  sont contraintes par celles de  $n$ ,  $a$  et  $b$  respectivement, en raison de la conservation du nombre de phonons apparaissant dans (II.5). Puisque l'interaction de Coulomb est invariante par translation, l'élément de matrice

$$\langle nab, NAB | \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} | n' a' b', N' A' B' \rangle \quad (\text{II.8})$$

est proportionnel à  $\delta_{NN'} \delta_{AA'} \delta_{BB'}$ . Après utilisation de l'identité (II.2) avec  $\mu =$  et  $\mathbf{s} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ , on obtient finalement [Quentin72]

$$\langle n_{z_i} \alpha_i \beta_i, n_{z_j} \alpha_j \beta_j | \hat{v}_c | n_{z_k} \alpha_k \beta_k, n_{z_l} \alpha_l \beta_l \rangle = \sqrt{\frac{2}{\pi}} e^2 \beta_0^3 \sum_{n=n_{\min}}^{n_{z_i}+n_{z_j}} f^n \sum_{p=|n-n'|}^{n+n'} \mathcal{C}(n, n', p) \mathcal{A}(p) \times \sum_{a=a_{\min}}^{\alpha_i+\alpha_j} \sum_{b=b_{\min}}^{\beta_i+\beta_j} g^{a,b} \delta_{a-b, a'-b'} \frac{(a+b)!}{\sqrt{a! a'! b! b'!}} \sum_{k=0}^{k_{\max}} \frac{\binom{\min(a,b)}{k} \binom{\min(a',b')}{k}}{\binom{a+b'}{k}} \mathcal{J}_{p/2, |a-b|, k, a+b'+1-k}^{\beta_z, \beta_\perp}, \quad (\text{II.9})$$

avec

$$\begin{aligned} n_{\min} &= \max(0, n_{z_i} + n_{z_j} - n_{z_k} - n_{z_l}), \\ a_{\min} &= \max(0, \alpha_i + \alpha_j - \alpha_k - \alpha_l), \\ b_{\min} &= \max(0, \beta_i + \beta_j - \beta_k - \beta_l), \\ 2k_{\max} &= \min(a + b, a' + b') - |a - b|. \end{aligned} \quad (\text{II.10})$$

Le facteur  $\beta_0^3 = \beta_z \beta_\perp^2$  est la constante d'oscillateur harmonique sphérique (avec les notations de la référence [Flocard73]). Les quantités  $\binom{i}{j}$  sont les coefficients binomiaux dans la notation anglo-saxonne, et les coefficients  $\mathcal{C}(n, n', p)$  et  $\mathcal{A}(p)$  sont définis par

$$\mathcal{C}(n, n', p) = \frac{\sqrt{n! n'! p!}}{\left(\frac{n+n'-p}{2}\right)! \left(\frac{n'+p-n}{2}\right)! \left(\frac{p+n-n'}{2}\right)!}, \quad (\text{II.11})$$

$$\mathcal{A}(p) = \begin{cases} \frac{(-)^{p/2} \sqrt{p!}}{2^{p/2} (p/2)!} & \text{si } p \text{ est pair} \\ 0 & \text{si } p \text{ est impair.} \end{cases} \quad (\text{II.12})$$

Enfin les intégrales  $J_{k,\ell,m,n}^{\beta_z,\beta_\perp}$  ont pour expression

$$J_{k,\ell,m,n}^{\beta_z,\beta_\perp} = \int_0^{+\infty} \frac{(\beta_\perp^2 \sigma^2)^\ell (\beta_\perp^2 \sigma^2 - 1)^m \sigma d\sigma}{(1 + \beta_\perp^2 \sigma^2)^n \sqrt{(1 + \beta_z^2 \sigma^2)^{2k+1}}} \quad (\text{II.13})$$

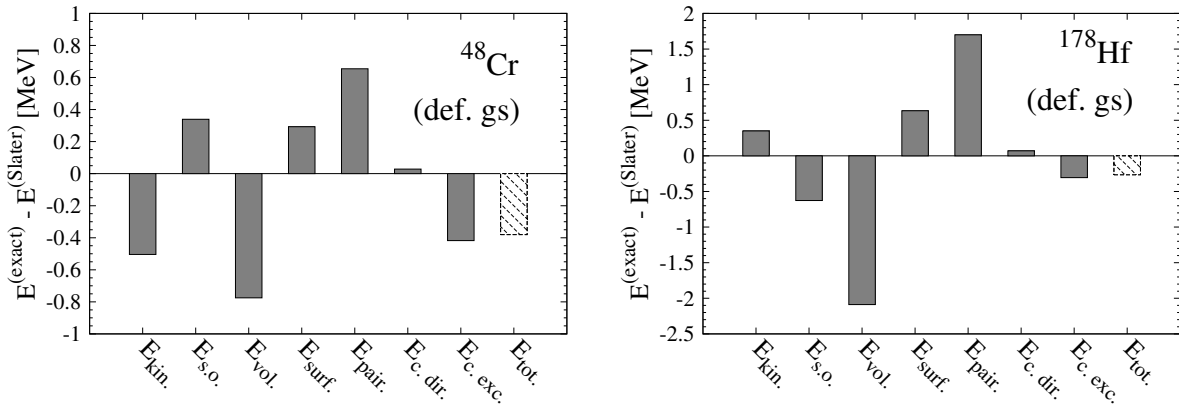
où  $k, \ell, m$  et  $n$  sont des entiers positifs ou nuls tels que  $\ell + m < n$ .

## 2) Tests de l'approximation de Slater

Dans la publication [Le Bloas11c], l'étude de l'approximation de Slater [Slater51] a révélé des effets systématiques qui ne peuvent pas être absorbés dans l'ajustement des paramètres de Skyrme.

### 2.a) Energie coulombienne d'échange

L'analyse terme à terme de l'énergie totale de liaison  $E$  montre que l'erreur due à l'approximation de Slater sur la valeur de  $E$  pour la solution convergée HFBCS est presque toujours égale à celle du terme d'échange de la contribution coulombienne en raison de compensations entre les autres termes (voir figure II.1 pour les cas représentatifs du  $^{48}\text{Cr}$  et du  $^{178}\text{Hf}$ ).



**FIGURE II.1** – Impact du traitement des termes d'échange coulombiens sur l'énergie totale de liaison  $E_{\text{tot}}$  des noyaux  $^{48}\text{Cr}$  et  $^{178}\text{Hf}$ . La contribution  $E_{\text{vol}}$  est celle produite par les paramètres  $t_0$  et  $t_3$  de l'interaction de Skyrme (ici dans sa paramétrisation SkM\* [Bartel82]),  $E_{\text{surf}}$  provient des termes en  $t_1$  et  $t_2$ , et  $E_{\text{s.o.}}$  est l'énergie d'interaction de spin-orbite (figures extraites de [Le Bloas11c]).

Dans les noyaux semi-magiques l'approximation de Slater conduit à une erreur relative sur l'énergie coulombienne d'échange  $\Delta E_{\text{CE}}$  plus faible pour la solution HFBCS que pour la solution HF pure comme le montre le panneau supérieur de la figure II.2 (réduction de l'erreur en % de 2.5 pour le  $^{90}\text{Zr}$ , de 1 pour le noyau  $^{298}114$  et de 0.1 pour le noyau  $^{310}126$ ). Cela suggère que les erreurs relatives sont grandes aux fermetures de couches ou sous-couches pour les protons, et que ces erreurs sont beaucoup plus faibles pour des noyaux à couche ouverte. De plus, l'étude de séries isotopiques sur le panneau inférieur de la figure II.2 que le nombre de neutrons ne joue quasiment aucun rôle dans l'ordre de grandeur de l'erreur relative.

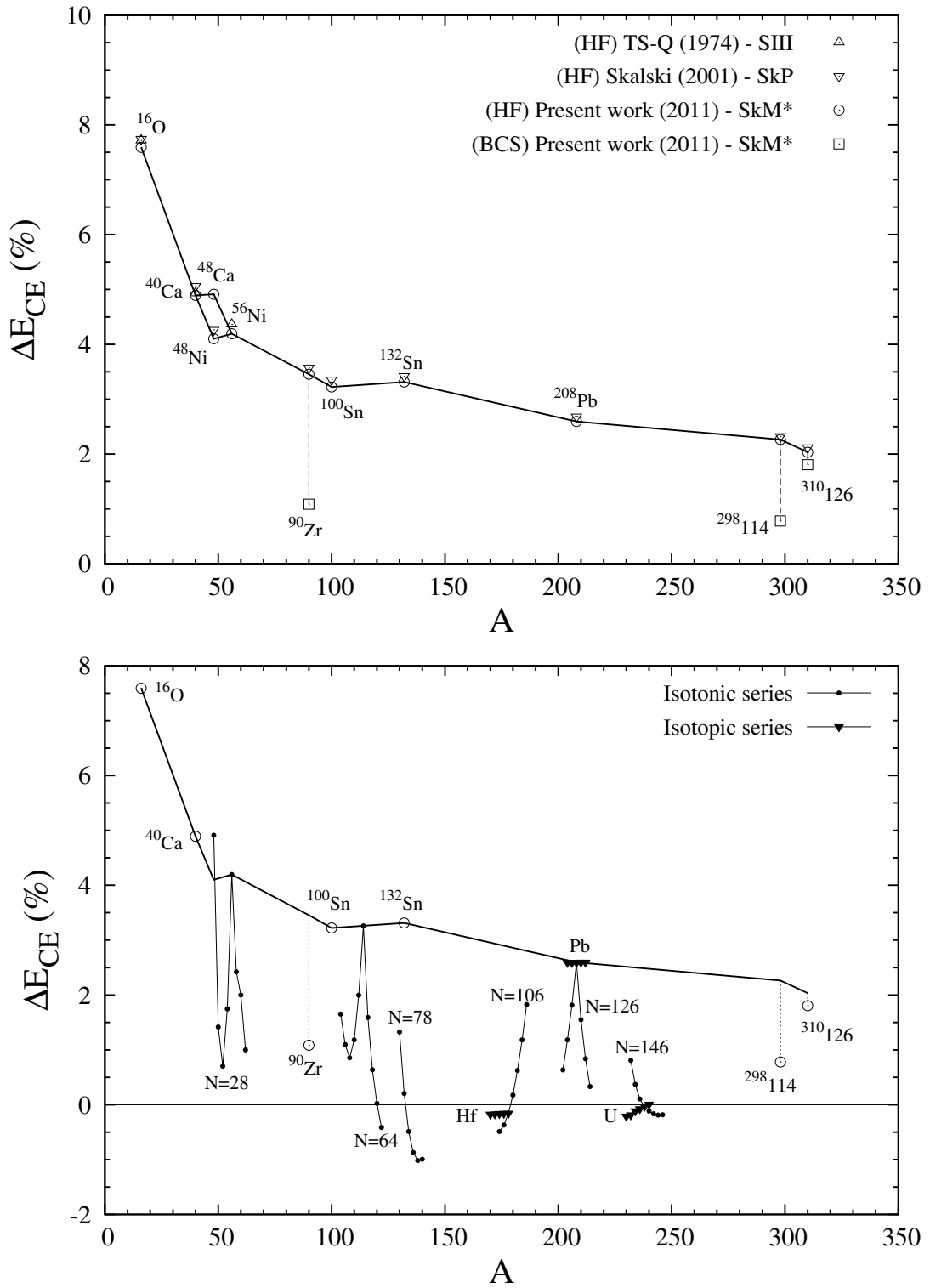


FIGURE II.2 – Erreur relative sur l'énergie coulombienne d'échange pour des noyaux magiques (panneau supérieur) et quelques séries isotopiques et isotoniques (panneau inférieur) (figures extraites de [Le Bloas11c]).



## 2.b) Spectre individuel des protons

Lorsque l'on utilise l'approximation de Slater, le spectre des protons est compressé autour du niveau de Fermi comme l'illustre la figure II.3. Plus précisément l'énergie de tous

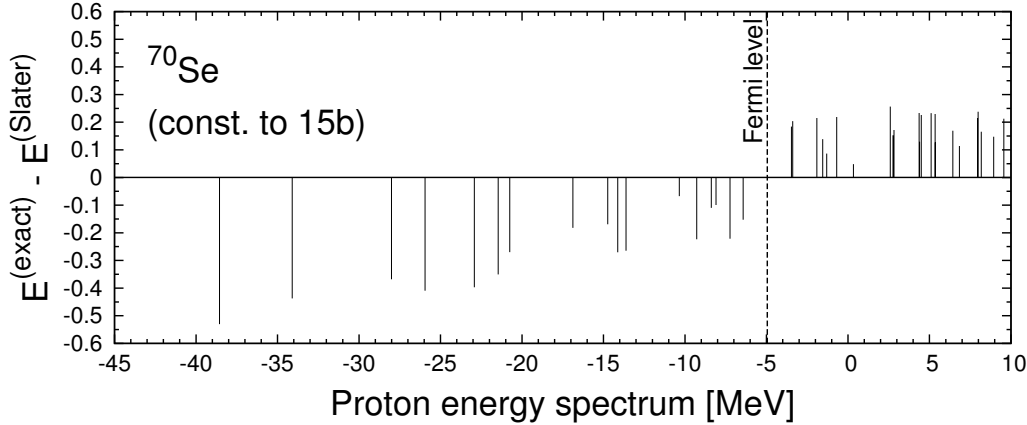


FIGURE II.3 – Décalage en énergie du spectre des protons dans le  $^{70}\text{Se}$  (contraint à la déformation  $Q_{20} = 15 b$ ) (figure extraite de [Le Bloas11c]).

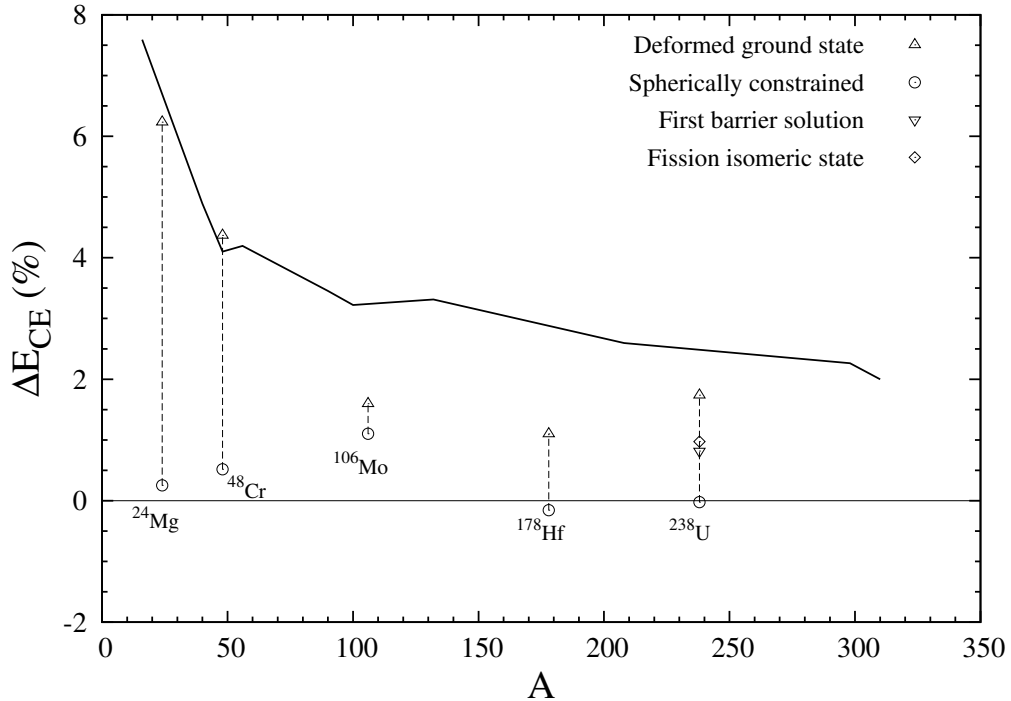
les niveaux occupés (à gauche du niveau de Fermi sur la figure) augmente, tandis que celle de tous les niveaux inoccupés (à droite du niveau de Fermi sur la figure) diminue (dans une moindre proportion que ne sont affectés les niveaux occupés). Cet effet a été obtenu également dans le cadre des calculs Hartree–Fock–Bogoliubov d’Anguiano et collaborateurs [Anguiano01] avec l’interaction de portée finie de Gogny.

La conséquence directe de cet effet sur les corrélations d’appariement est la sous-estimation de l’effet d’anti-appariement de l’interaction de Coulomb lorsque l’on utilise l’approximation de Slater. Dans l’approche BCS cela se traduit par une sur-estimation des gaps pour les protons, et dans l’approche HTDA, par une sur-estimation du rôle des excitations de paires  $pp$  dans l’état fondamental, d’où une sous-estimation de la brisure de symétrie d’isospin (voir chapitre IV).

## 2.c) Conséquence sur les différences d’énergie de liaison

La sensibilité de l’erreur commise sur l’énergie coulombienne d’échange à la densité de niveaux protons autour de l’énergie de Fermi, qui découle de l’étude menée dans la sous-section 2.a), engendre un effet systématique sur le calcul des différences d’énergie de liaison telles que les barrières de fission.

Comme on le constate sur la figure II.4, la valeur en % de  $\Delta E_{\text{CE}}$  pour la déformation fondamentale du  $^{238}\text{U}$  excède d’environ 1 les valeurs obtenues au sommet de la première barrière de fission et dans l’isomère de fission super-déformé (ces deux valeurs se trouvent être égales). Cela signifie que dans l’approximation de Slater on sous-estime la hauteur de la première barrière de fission de 310 keV et l’énergie d’excitation de l’isomère de fission de 283 keV pour ce noyau avec l’interaction SkM\* et les paramètres de la référence [Le Bloas11c]. Il est important de noter qu’il s’agit là d’un effet systématique. Il vient s’ajouter de façon quasiment additive aux effets de la correction rotationnelle (restaurant approximativement la symétrie de rotation dans l’énergie) et de la triaxialité (au sommet de la première barrière de fission).



**FIGURE II.4** – Erreur relative sur l'énergie coulombienne d'échange dans des solutions HFBCS correspondant à différentes déformations. (figure extraite de [Le Bloas11c]).

Un autre type de différence d'énergies de liaison susceptible d'être affectée par le traitement des termes d'échange de l'interaction de Coulomb est la chaleur de réaction  $Q_\alpha$  de la décroissance  $\alpha$ . L'étude de quatre couples de noyaux dans la région du Plomb au Thorium, dont les résultats sont reportés dans la table II.1, montre la bonne reproduction des valeurs expérimentales sur-estimées d'au plus 150 keV environ par les calculs "exacts", tandis que les calculs "approchés" les sous-estiment de plus de 200 keV.

**TABLE II.1** – Chaleurs de réaction  $Q_\alpha$  (en keV) dans la région de masse entre le Plomb et le Thorium calculées avec SkM\* et les paramètres de la référence [Le Bloas11c]. L'énergie de liaison de la particule  $\alpha$  et les valeurs expérimentales de  $Q_\alpha$  sont issues de la base de données évaluées AME2003 [Wapstra03].

Noyau décroissant	Exp.	HFBCS		
		exact	Slater	erreur
$^{212}\text{Po}$	8954.12(11)	9107	8679	428
$^{214}\text{Rn}$	9208(9)	9354	9000	354
$^{216}\text{Ra}$	9526(8)	9599	9292	307
$^{218}\text{Th}$	9849(9)	9890	9634	256

# Chapitre III

## Etats nucléaires appariés et symétries

### 1) Corrélations d'appariement

Le phénomène d'appariement dans les noyaux atomiques se manifeste dans de nombreuses observables [Ring80] bien que les corrélations qu'il induit apportent un gain modeste d'énergie de liaison. Parmi les signatures expérimentales, les quatre suivantes sont communément considérées comme les plus convaincantes :

- l'état fondamental des noyaux pair-pairs possède un moment angulaire  $J = 0$  ;
- le spectre de basse énergie des noyaux pair-pairs présente un saut d'énergie important entre l'état fondamental et le premier état excité, contrairement aux noyaux impairs ;
- les noyaux impairs ont une énergie de liaison (en valeur absolue) plus faible que la moyenne de celle des noyaux pair-pairs voisins (effet dit pair-impair des énergies de liaison) ;
- le long d'une bande de rotation, le moment d'inertie d'un noyau évolue d'une valeur inférieure à celle d'un corps rigide à faible moment angulaire (superfluidité nucléaire) pour atteindre la valeur d'un corps rigide en rotation à haut moment angulaire.

Pour les noyaux loin de la ligne  $N = Z$ , l'appariement ne peut avoir lieu qu'entre nucléons de même type ( $nn$  et  $pp$ ), donc dans le canal d'isospin  $T = 1$ , tandis que pour les noyaux  $N \approx Z$ , il peut aussi se produire entre un neutron et un proton, avec une compétition entre les deux canaux d'isospin  $T = 0$  et  $T = 1$  [Satała97b, Petrovici99].

L'appariement usuel  $nn$  et  $pp$  se traduit, dans une approche champ moyen de type HFBCS ou HFB, par une dépopulation des niveaux de trou (en-dessous de l'énergie de Fermi) au profit d'une population des niveaux de particules (au-dessus de l'énergie de Fermi). Dans l'approximation HFBCS, lorsque le renversement du temps est une symétrie auto-cohérente l'appariement de deux nucléons identiques a lieu entre des états individuels conjugués par renversement du temps. Pour un neutron et un proton, le principe de Pauli autorise également ces deux nucléons à occuper des états identiques dans l'espace des positions et de spin. C'est ce qui est appelé composante  $\alpha\alpha$  de l'appariement  $T = 0$  [Goodman72]. Cette composante brise la symétrie axiale dans l'approche HFB (contrairement à BCS) tandis que la composante  $\alpha\bar{\alpha}$  (pour laquelle les états impliqués sont conjugués par renversement du temps) tend à la restaurer [Goodman72]. Lorsque la solution de champ moyen brise la symétrie de renversement du temps, la définition de paires d'états conjugués peut être étendue en considérant d'autres symétries auto-cohérentes combinant des opérateurs spatiaux, de spin et le renversement du temps [Goodman74].

Une synthèse des différentes signatures expérimentales et des descriptions théoriques de l'appariement  $np$  est présentée dans les références [Perlinska04, Sieja07a]. L'énergie de liaison supplémentaire observée dans les noyaux  $N = Z$ , dénommée énergie de Wigner, s'avère être l'observable la plus étudiée pour sonder l'appariement  $np$ . En effet, Satuła et collaborateurs ont montré que les corrélations d'appariement  $T = 0$  peuvent constituer un mécanisme microscopique à l'origine de l'énergie de Wigner dans une approche au-delà du champ moyen [Satuła97b]. En outre ils ont pu décrire simultanément la structure des excitations fondamentales des noyaux  $N = Z$  (pair-pairs et impair-impairs) et l'énergie de Wigner en termes d'une compétition entre les corrélations d'appariement  $T = 1$  et  $T = 0$  [Satuła01a].

Par raison de symétrie (approchée) d'isospin, les corrélations d'appariement  $np$  dans le canal  $T = 1$  sont a priori d'importance comparable aux corrélations  $nn$  et  $pp$  dans un noyau  $N = Z$ . Par conséquent, dans le cadre des approches de champ moyen, on s'attend à ce que les intensités de l'interaction d'appariement  $nn$ ,  $pp$  et  $np$  soient égales (aux effets de l'interaction de Coulomb près). D'après la référence [Satuła01b], on peut raisonnablement reproduire à la fois l'énergie de Wigner et l'énergie d'excitation des états isobariques analogues  $T = 2$  des noyaux pair-pairs  $N = Z$  avec la même valeur du rapport  $x$  des intensités de l'interaction d'appariement (de type séniorité [Ring80]) dans les canaux  $T = 0$  et  $T = 1$ . Ce paramètre décroît modérément avec  $A$  et vaut environ 1.4 dans la région du  $^{48}\text{Cr}$  (sous-couche  $f_{7/2}$ ).

Par ailleurs des travaux dans le cadre du modèle en couches (voir par exemple [Brenner90]) montrent que l'interaction neutron-proton  $T = 0$  est principalement responsable de l'énergie de Wigner, même si les corrélations de paires ( $J = 1, T = 0$ ) (de type deutéron) n'en sont a priori pas la seule source [Satuła97a, Dean03], voire une source totalement exclue [Poves98]. Dans ce contexte, il est important de noter que la définition même de l'appariement diffère dans les approches de modèle en couches et de champ moyen auto-cohérent [Satuła00]. En effet, dans la première approche, le hamiltonien effectif est la somme d'un hamiltonien monopolaire, responsable des propriétés globales et des effets de couches du noyau, et d'un hamiltonien multipolaire, responsable essentiellement des corrélations d'appariement et de déformation (quadrupolaire principalement) [Dufour96, Caurier05]. Pour toute interaction réaliste de type matrice  $G$ , le terme multipolaire dit de "pairing" se trouve être dû seulement à l'onde partielle  $L = 0$  (voir annexe A pour le développement en ondes partielles de l'interaction nucléaire nue à deux corps). Autrement dit l'appariement dans le modèle en couches correspond aux corrélations induites par les canaux ( $L = 0, S = 0, T = 1$ ) et ( $L = 0, S = 1, T = 0$ ) de l'interaction nucléaire effective. Dans les approches de champ moyen auto-cohérent HFBCS et HFB, l'appariement est plutôt défini comme les corrélations du canal particule-particule ( $pp$ ), associées à la brisure de la symétrie de nombre de particules, par opposition au canal particule-trou ( $ph$ ). Cette division en canaux  $pp$  et  $ph$  est propre aux modèles de champ moyen de type HFBCS ou HFB, rendant difficile la mise en correspondance des corrélations d'appariement issues des deux classes de modèles. Toutefois, une mesure des corrélations d'appariement dans la solution du modèle en couches pertinente pour une comparaison avec la solution HFBCS ou HFB est par exemple la valeur moyenne des opérateurs nombre de paires  $T = 0$  et  $T = 1$  (voir par exemple [Petrovici99]).

Dans les calculs HTDA (avec interaction neutron-proton) discutés dans les sections suivantes et les chapitres IV et V, la notion d'appariement  $np$  repose sur la généralisation [Sieja07b, Bonneau07] de celle impliquant des nucléons identiques [Pillet02], autrement dit on ne prend en compte que les corrélations de type  $\alpha\bar{\alpha}$ . Pour inclure les corrélations de type  $\alpha\alpha$ , il suffit d'autoriser tous les types d'excitations  $2p2h$ . En outre, puisque les canaux  $^1S_0$

( $L = 0, S = 0, T = 1$ ) et  ${}^3S_1$  ( $L = 0, S = 1, T = 0$ ) dominant la partie de l'interaction nucléon-nucléon responsable des corrélations d'appariement, l'interaction résiduelle effective employée dans l'approche HTDA est modélisée par une interaction de portée nulle  $\hat{V}_\delta$  de la forme [Sieja07b]

$$\hat{V}_\delta = \sum_{T=0,1} V_0^{(T)} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \hat{\Pi}_S \hat{\Pi}_T \quad (S = 1 - T) \quad (\text{III.1})$$

où  $\hat{\Pi}_S$  et  $\hat{\Pi}_T$  sont les opérateurs de projection de spin et d'isospin, respectivement, dans le sous-espace de Fock à deux corps, et  $V_0^{(T)}$  l'intensité de l'interaction  $\hat{V}_\delta$  dans le canal d'isospin  $T$ .

## 2) Etats fondamentaux appariés loin de la ligne $N = Z$

Les corrélations d'appariement apportent une correction plutôt faible à l'énergie de liaison des noyaux. Elles impliquent donc des niveaux individuels d'énergie plutôt proche de l'énergie de Fermi. Dans les noyaux comportant un excès suffisant de neutrons ou de protons, la différence des énergies de Fermi de chaque espèce est telle que l'on peut former très peu de paires  $np$  dans la fenêtre de valence. Par conséquent seul le canal ( $S = 0, T = 1$ ) de l'interaction résiduelle  $\hat{V}_\delta$  est actif et on peut négliger le canal ( $S = 1, T = 0$ ).

### 2.a) Appariement $nn$ et $pp$ dans les noyaux pair-pairs

Tout d'abord, compte tenu de la portée nulle de l'interaction  $\delta$ , les corrélations induites par l'interaction résiduelle  $\hat{V}_\delta$  sont essentiellement de type excitations de paires. Pour l'illustrer quantitativement, on peut effectuer un calcul de principe dans le  ${}^{178}\text{Hf}$  avec une base à  $N$  corps d'excitations 1p1h, 2p2h, 3p3h et 4p4h tronquées à  $\hbar\omega = 41 \text{ MeV} \times A^{-1/3}$ . Les poids obtenus avec  $V_0^{(T=1)} = -400 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^3$  pour ces configurations sont reportés dans la table III.1 (ligne "mpmh"). On constate tout d'abord que les excitations 1p1h et 3p3h sont négligeables

**TABLE III.1** – Poids en % des configurations 1p1h, 2p2h, 3p3h et 4p4h dans l'état fondamental HTDA du  ${}^{178}\text{Hf}$  avec les contributions explicites des configurations contenant des excitations de simples (SP) et doubles (DP) paires. La solution de champ moyen est obtenue avec la paramétrisation SLyIII.0.8 [Washiyama12] de la fonctionnelle de Skyrme, les intensités  $G_0^{(n)} = -15.15 \text{ MeV}$ ,  $G_0^{(p)} = -14.71 \text{ MeV}$  pour la force de séniorité et les paramètres de base d'oscillateur  $N_0 = 12$ ,  $b = 0.52$  et  $q = 1.45$  (dans les notations de la référence [Flocard73]).

Base	$E_{\text{corr}}$ (MeV)	0p0h	1p1h	2p2h		3p3h		4p4h	
				SP	tot	SP+1p1h	tot	DP	tot
mpmh	-0.757	75.715	0.001	22.028	23.221	0.001	0.024	1.022	1.039
paires	-0.693	75.161	0	23.170		0		1.128	

(voir discussion ci-dessous). De plus, les excitations de paires dominant bien chaque ordre d'excitation. A titre de comparaison un calcul avec une base à  $N$  corps restreinte aux configurations appariées (ligne "paires" dans la table III.1) donne un état fondamental dont la

composition est très proche de celle obtenue avec la base complète. On note toutefois que l'énergie de corrélation  $E_{\text{corr}}$  correspondante est supérieure en raison du principe variationnel appliqué à l'approche HTDA pour un quasi-vide et une base à  $N$  corps donnés.

Dans la suite de ce mémoire, la base à  $N$  corps est limitée aux configurations appariées<sup>1</sup>.

De façon générale, sous l'effet de l'interaction résiduelle dans le canal ( $S = 0, T = 1$ ), l'état fondamental devient une superposition d'excitations particules-trous d'ordre pair. Celles d'ordre 2 sont des excitations de simples paires (SP) de type  $nn, np$  ou  $pp$ , tandis que celles d'ordre 4 ou plus peuvent inclure, en plus des excitations de plusieurs paires, des brisures de paires  $np$  recombinaées en paires  $nn$  et  $pp$  (ou le contraire). On appellera de façon générique doubles, triples et quadruples paires (DP, TP et QP, respectivement) les excitations  $4p4h, 6p6h$  et  $8p8h$  appariées.

Pour un noyau assez loin de la ligne  $N = Z$ , seules les paires  $nn$  et  $pp$  entrent en jeu comme le montre la table III.2 pour le  $^{178}\text{Hf}$  où la base à  $N$  corps est restreinte aux excitations SP, DP et TP d'énergie inférieure à  $3\hbar\omega(A)$ . Le poids des excitations TP étant très faible, il est raisonnable de penser que les excitations QP jouent un rôle négligeable. En effet, dans le cadre de la théorie des perturbations à  $N$  corps (voir annexe C), on peut considérer la solution HTDA pour une base à  $N$  corps donnée (dite base HTDA) comme la limite du développement de Goldstone en  $\hat{V}_{\text{res}}$  restreint aux états de la base HTDA. Le poids des excitations de  $n$  paires dans l'état fondamentale corrélé est donc influencé par la présence dans la base des excitations de plus de  $n$  paires. D'un point de vue quantitatif, ce sont essentiellement les configurations de  $n + 1$  paires qui en sont responsables via un processus d'ordre  $n + 2$  au moins. A titre d'exemple, le poids des excitations SP est influencé par les excitations DP à l'ordre 3 au moins en  $\hat{V}_{\text{res}}$ , ce que montre les résultats de la table III.2, celui des configurations DP dépend des triples et quadruples paires à partir des ordres 4 et 6, respectivement, et celui des configurations TP, qui résulte d'un processus d'ordre 3 au moins, dépend des quadruples paires à partir de l'ordre 5. Par conséquent la très faible valeur obtenue pour le poids des excitations TP suggère que, pour l'espace du modèle considéré, le développement perturbatif converge vers la solution HTDA dès l'ordre 3 ou 4, autrement dit que le rôle des quadruples paires est probablement négligeable.

A la lumière de cette analyse, on peut expliquer également le rôle négligeable des excitations  $1p1h$  et  $3p3h$  constaté pour l'espace du modèle considéré plus haut. Ceci est dû à la combinaison des deux éléments suivants : (i) la population des excitations  $1p1h$  et  $3p3h$  est un effet d'ordre 2 au moins dans l'interaction résiduelle  $\hat{V}_{\text{res}}$  car celle-ci s'exprime comme le produit normal de  $\hat{V}_\delta$  par rapport au quasi-vide particule-trou  $|\Phi_0\rangle$ , (ii) les éléments de matrice à deux corps de  $\hat{V}_\delta$  sont plus faibles entre des états non appariés en raison de sa portée nulle.

Pour terminer cette discussion, on note la contribution significative obtenue pour les excitations simultanées d'une paire  $nn$  et d'une paire  $pp$  parmi les configurations DP, qui se comprend pour des raisons énergétiques dans le point de vue perturbatif ci-dessus. Cette contribution peut en fait se calculer en se limitant aux simples paires  $nn$  et  $pp$  traitées séparément si l'interaction résiduelle neutron-proton est négligeable [Pillet08] et si les excitations de triples paires sont négligées.

1. Dans le cas particuliers des noyaux  $N = Z$ , les excitations  $2p2h$  appariées du type  $\alpha\alpha$  sont faiblement peuplées dans l'état fondamental par le canal ( $S = 1, T = 0$ ) de l'interaction résiduelle  $\delta$ , tandis que celles non appariées le sont assez fortement. Malgré cela, l'étude des noyaux  $N = Z$  effectuée dans la section 3) est restreinte aux configurations appariées de type  $\alpha\bar{\alpha}$ .

**TABLE III.2** – Structure détaillée de l'état fondamental du  $^{178}\text{Hf}$  issu d'un calcul HTDA comparée à celle obtenue à l'ordre 1 et 2 de la théorie de perturbation (2 et 3 pour  $E_{\text{corr}}$ , respectivement) et de l'état fondamental  $K^\pi = \frac{9}{2}^+$  du  $^{179}\text{Hf}$  dans l'approche HTDA après trois calculs bloqués différents : calcul non auto-cohérent (approximation de Koopmans), calcul auto-cohérent avec l'approximation de remplissage égal (EFA) et calcul avec blocage auto-cohérent (SCB). La solution de champ moyen du  $^{178}\text{Hf}$  et du  $^{179}\text{Hf}$  à l'approximation de Koopmans est la même que pour la table III.1 tandis que la base à  $N$  corps contient toutes les excitations SP, DP et TP d'énergie inférieure à  $3\hbar\omega(A)$ .

Noyau	Calcul	$E_{\text{corr}}$ (MeV)	SP				DP			TP					
			tot	nn	pp	np	tot	2nn	2pp	1nn + 1pp	tot	2nn + 1pp	1nn + 2pp		
$^{178}\text{Hf}$	MBPT(1)	-1.247	13.30	7.11	6.09	0.10	0								
	MBPT(2)	-1.762	26.81	14.81	11.91	0.09	0.64	0.19	0.13	0.32					
	HTDA	-1.952	32.06	18.63	13.37	0.06	4.97	1.35	0.71	2.91	0.24	0.13	0.09		
$^{179}\text{Hf}$	Koopmans	-1.651	24.58	8.31	16.22	0.04	2.30	0.21	0.89	1.20	0.05	0.02	0.03		
	EFA	-1.651	25.11	8.24	16.81	0.05	2.39	0.20	0.90	1.28	0.05	0.02	0.03		
	SCB	-1.649	25.13	8.23	16.85	0.05	2.39	0.20	0.90	1.29	0.06	0.02	0.03		

## 2.b) Réduction de l'appariement dans les noyaux impairs

Dans les noyaux non pair-pairs, la réduction de l'effet d'appariement pour l'espèce en nombre impair est connu depuis longtemps [Soloviev61, Nilsson61, Wahlborn62] et résulte de l'effet de blocage (exclusion du nucléon célibataire du processus de diffusion de paires à travers la surface de Fermi) pour des raisons de coût énergétique. Cette réduction se manifeste par des effets d'oscillation pair-impair des énergies de liaison et des moments d'inertie. Dans une approche conservant le nombre de particules [Zeng83a], Zeng et collaborateurs ont montré que cet effet, mesuré par la différence des gaps d'appariement dans le noyau impair (avec blocage) et dans le noyau pair-pair sous-jacent, est sous-estimé dans le formalisme de BCS et qu'il est sensible à l'état bloqué du nucléon non apparié [Zeng83b].

Pour illustrer cet effet quantitativement, on peut effectuer un calcul HTDA de la solution fondamentale  $K^\pi = \frac{9}{2}^+$  du  $^{179}\text{Hf}$  avec un quasi-vide  $|\Phi_0\rangle$  obtenu dans différentes conditions de blocage du neutron célibataire : (i) à l'approximation de Koopmans (blocage non auto-cohérent) à partir de la solution de champ moyen du  $^{178}\text{Hf}$  de la sous-section précédente, (ii) à l'approximation de remplissage égal (EFA en anglais, étudiée en détail dans la référence [Perez08]) dans laquelle la symétrie de renversement du temps est une symétrie auto-cohérente, et (iii) avec blocage auto-cohérent (levant la dégénérescence de Kramers). Dans ce dernier calcul, on définit l'état conjugué d'un état individuel  $|i\rangle$  donné de nombre quantique  $K$  et de parité  $\pi$  comme l'état  $|\tilde{i}\rangle$  de nombre quantique  $-K$  et de même parité ayant le recouvrement maximal (en valeur absolue) avec  $|\bar{i}\rangle = \hat{T}|i\rangle$  (où  $\hat{T}$  désigne l'opérateur de renversement du temps).

Les poids en % des différentes configurations dans l'état fondamental HTDA du  $^{179}\text{Hf}$  pour  $K^\pi = \frac{9}{2}^+$  sont reportés dans la table III.2. On constate que les trois calculs conduisent quasiment à la même structure de l'état corrélé avec une réduction globale par rapport au  $^{178}\text{Hf}$  des corrélations d'appariement mesurées par l'énergie de corrélation et le poids total des excitations SP, DP et TP. Cette réduction globale est liée à la forte diminution de la contribution des configurations impliquant l'excitation d'une ou plusieurs paires  $nn$  (à cause du blocage). Notons que, par un effet de normalisation de l'état perturbé (voir annexe C), la baisse du poids des excitations de paires  $nn$  entraîne une augmentation du poids des configurations impliquant des paires  $pp$  seules.

## 3) Appariement et symétries dans les noyaux $N = Z$

En plus des corrélations d'appariement usuelles  $nn$  et  $pp$ , les noyaux proches de la ligne  $N = Z$  sont le siège de corrélations d'appariement  $np$  au moins aussi importantes. Dans cette section, on considère des noyaux  $N = Z$  bien déformés pair-pairs puis impair-impairs. En pratique de tels noyaux sont peu nombreux et correspondent essentiellement aux milieux de couches, c'est-à-dire aux masses  $A = 20 - 28$ ,  $A = 46 - 50$ ,  $A = 64 - 80$ . Par exemple dans le  $^{48}\text{Cr}$ , des calculs de modèle en couches avec l'interaction KB3 [Caurier94] et de type HFB+cranking avec l'interaction de Gogny [Caurier95] ont confirmé le caractère de rotateur rigide de ces noyaux en reproduisant notamment la bande rotationnelle expérimentale (voir par exemple [Lenzi96]) de l'état fondamental.

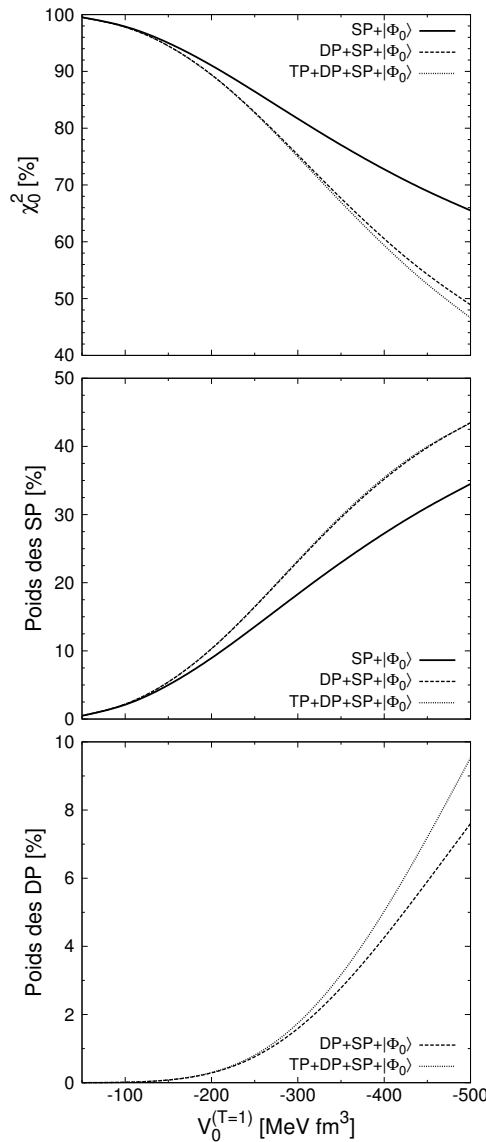
### 3.a) Etats fondamental et isobariques analogues des noyaux pair-pairs

Sous l'effet de l'interaction résiduelle dans les canaux  $(S = 0, T = 1)$  et  $(S = 1, T = 0)$ , avec une base à  $N$  corps limitée aux états appariés, l'état fondamental devient une super-



position d'excitations particules-trous d'ordre pair. Celles d'ordre 2 sont des excitations de simples paires (SP) de type  $nn$ ,  $np$  ou  $pp$ , tandis que celles d'ordre 4 ou plus peuvent inclure, en plus des excitations de plusieurs paires, des brisures de paires  $np$  recombinaées en paires  $nn$  et  $pp$  (ou le contraire). On appellera de façon générique doubles paires (DP) les excitations 4p4h appariées et triples paires (TP) les excitations 6p6h appariées.

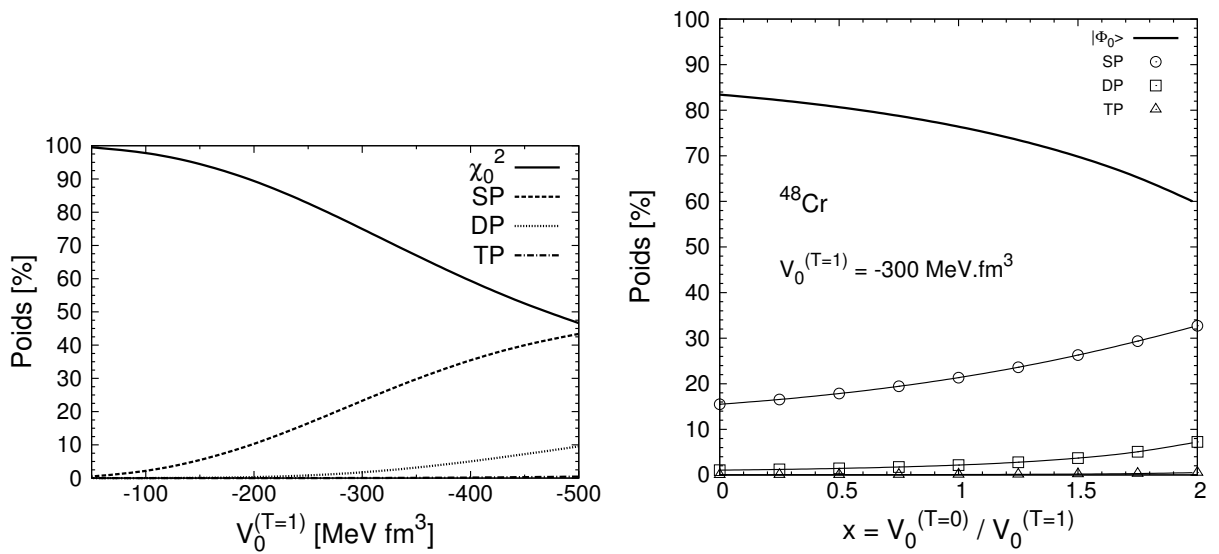
Comme le montre la figure III.1 par des calculs tronqués à des ordres d'excitations successifs pour le canal ( $S = 0, T = 1$ ), la composition de l'état fondamental en termes d'excitations de paires converge rapidement puisqu'il s'avère en général suffisant d'inclure les excitations SP et DP. Cette convergence est également observée dans le canal ( $S = 1, T = 0$ ) seul ainsi qu'en présence des deux canaux pour des valeurs de  $x = V_0^{(T=0)}/V_0^{(T=1)}$  allant



**FIGURE III.1** – Variation du poids de  $|\Phi_0\rangle$  (panneau supérieur), des excitations SP (panneau du milieu) et des excitations DP (panneau du bas) dans l'état fondamental du  $^{48}\text{Cr}$  en fonction de l'intensité  $V_0^{(T=1)}$  lorsque la base à  $N$  corps inclut, hormis le quasi-vide  $|\Phi_0\rangle$ , les excitations de simples paires seules (ligne en trait), les excitations de simples et doubles paires seules (ligne en tiretés) et les excitations SP, DP et TP (ligne en pointillés).

jusqu'à 2 au moins.<sup>2</sup> Cette conclusion dans les deux canaux d'isospin étend la portée de celle des références [Sieja07a, Sieja07b] où l'étude de convergence est menée dans le canal  $T_z = \pm 1$  pour les neutrons et les protons séparément.

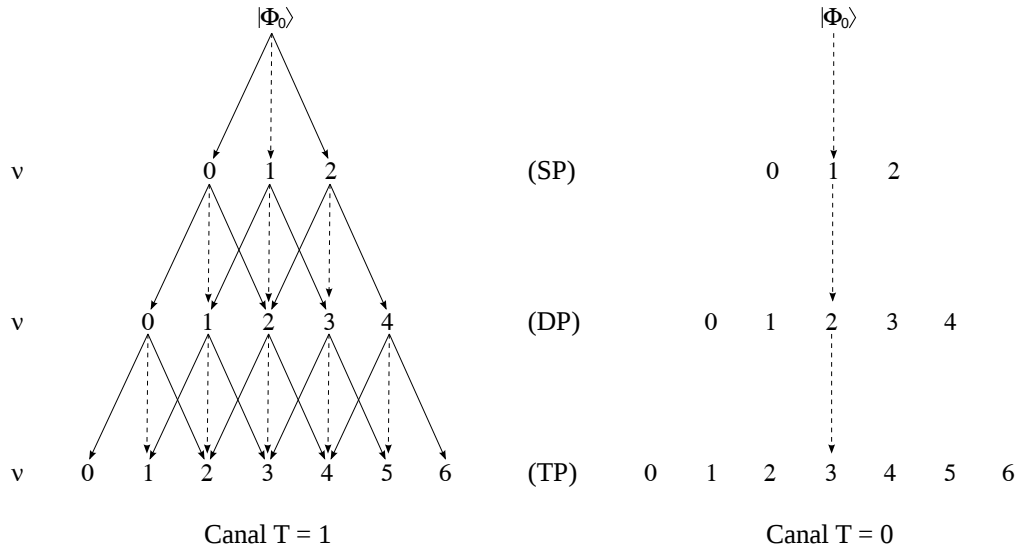
La variation de la proportion des différentes configurations de paires est tracée sur la figure III.2 en fonction des intensités  $V_0^{(T=1)}$  (à gauche) et en fonction du rapport des intensités  $x = V_0^{(T=0)}/V_0^{(T=1)}$  pour  $V_0^{(T=1)} = -300 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^3$  (à droite). Dans les intervalles de valeurs de  $V_0^{(T=1)}$  et  $V_0^{(T=0)}$  considérés, allant bien au-delà des valeurs réalistes estimées à  $V_0^{(T=1)} \sim 300 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^3$  et  $x = V_0^{(T=0)}/V_0^{(T=1)} \sim 1.0$  à 1.5, le poids des excitations de triples paires dans l'état fondamental reste négligeable, même si pour des grandes intensités ces excitations contribuent légèrement de façon indirecte au poids des doubles paires (voir la figure 3.6 de la référence [Le Bloas11a] ou la figure 2 de la référence [Le Bloas12]).



**FIGURE III.2** – Structure de l'état fondamental apparié du  $^{48}\text{Cr}$  en fonction de l'intensité  $V_0^{(T=1)}$  de l'interaction résiduelle dans le canal ( $S = 0, T = 1$ ) en l'absence du canal ( $S = 1, T = 0$ ) (panneau de gauche, figure tirée de la référence [Le Bloas12]) et en fonction du rapport des intensités  $x = V_0^{(T=0)}/V_0^{(T=1)}$  pour  $V_0^{(T=1)} = -300 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^3$  (panneau de droite). La quantité  $\chi_0^2$  représente le poids du quasi-vide  $|\Phi_0\rangle$ . Dans la solution de champ moyen (avec la fonctionnelle de Skyrme SIII,  $G_0^{(n)} = G_0^{(p)} = -17.70 \text{ MeV}$ ,  $N_0 = 10$ ,  $b = 0.56$  et  $q = 1.15$ ), les termes d'échange de l'interaction coulombienne sont calculés de façon exacte. Pour le panneau de gauche, la base à  $N$  corps est construite avec une troncation en énergie d'excitation particules-trous (égale à 3 fois l'énergie  $\hbar\omega(A)$ ), tandis que pour le panneau de droite, l'espace de valence des neutrons et des protons comprend les 4 niveaux de trous les plus hauts en énergie et les 4 niveaux de particules les plus bas (possédant la dégénérescence de Kramers).

Dans le canal  $T = 0$ , la faible valeur des poids des différentes composantes de l'état fondamental pour  $x = 1$  rapportée à leurs valeurs respectives pour  $x = 0$  permet de conclure que pour une intensité donnée, le canal ( $S = 1, T = 0$ ) apporte beaucoup moins de corrélations d'appariement dans la solution HTDA que le canal ( $S = 0, T = 1$ ). Ceci peut se comprendre de façon qualitative dans une approche perturbative à l'ordre 1 pour la po-

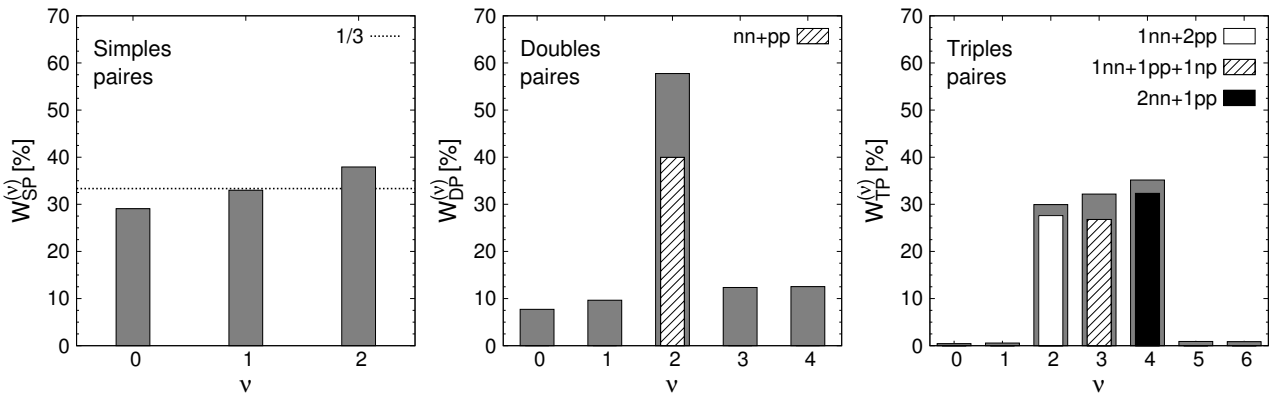
2. Il est à noter qu'en raison d'une erreur de programmation des éléments de matrice à deux corps de l'interaction  $\delta$  dans le canal  $T = 0$ , les résultats présentés dans ce mémoire en fonction de  $x$  diffèrent de ceux des références [Le Bloas11a, Le Bloas12, Bonneau11, Bonneau12].



**FIGURE III.3** – Schéma d'alimentation des différentes configurations d'excitations de paires (brisures/recombinaisons de paires multiples omis) dans l'état fondamental HTDA par le canal  $T = 1$  (à gauche) ou par le canal  $T = 0$  (à droite) de l'interaction résiduelle. Les flèches en trait plein symbolisent les canaux  $T_z = \pm 1$  tandis que les flèches en pointillés représentent le canal  $T_z = 0$  de  $\hat{V}_\delta$ . Figure tirée de la référence [Le Bloas11a].

pulation des excitations SP illustrée sur la figure III.3. En effet, pour un jeu de niveaux de trous et de particules donnés, l'élément de matrice  $\langle \Phi_0 | \hat{V}_\delta | SP \rangle$  dans le canal  $T = 0$  est nul s'il s'agit d'une excitation de paire  $T_z = \pm 1$  ( $nn$  ou  $pp$ ), tandis que dans le canal  $T = 1$  il est approximativement le même pour  $T_z = 0$  ( $np$ ) et  $T_z = \pm 1$  ( $nn$  ou  $pp$ ). Cet argument peut se généraliser pour les populations des excitations DP et TP en considérant les ordres 2 et 3 des perturbations, respectivement.

L'analyse détaillée de la composition de l'état fondamental pour chaque ordre d'excitation est illustrée sur la figure III.4 sous l'effet du canal ( $S = 0, T = 1$ ) seul. Comme l'argument perturbatif ci-dessus pour les simples paires permet de l'expliquer, les poids

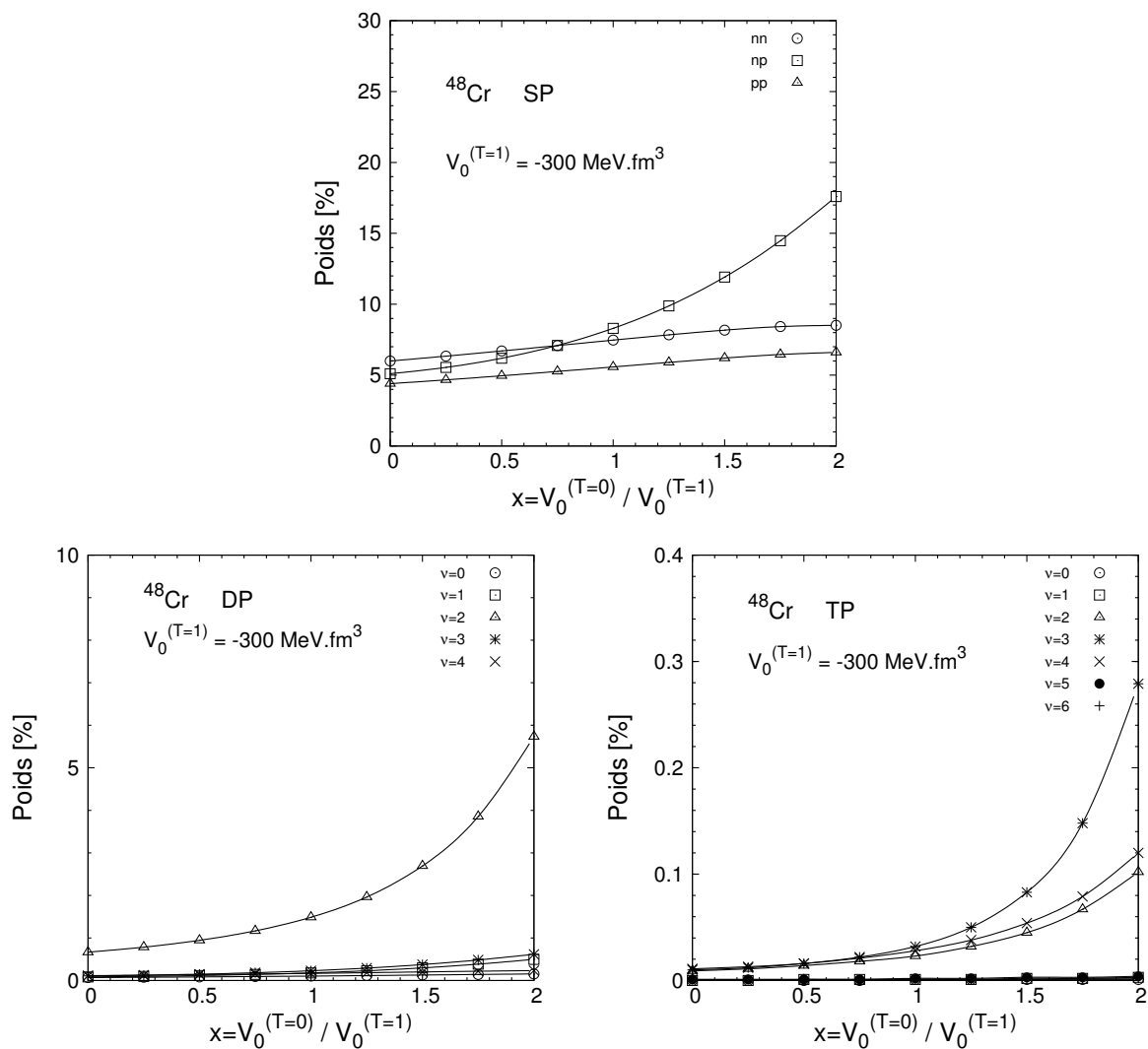


**FIGURE III.4** – Contributions relatives des différents types d'excitation de paires pour chaque ordre d'excitation dans l'état fondamental du  $^{48}\text{Cr}$  obtenu avec  $V_0^{(T=1)} = -200 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^3$  et  $V_0^{(T=0)} = 0$ . Figure tirée de la référence [Le Bloas11a].

$W_{SP}^{(\nu)}$  pour les trois valeurs de l'ordre d'excitation neutron  $\nu$  sont comparables et valent en-

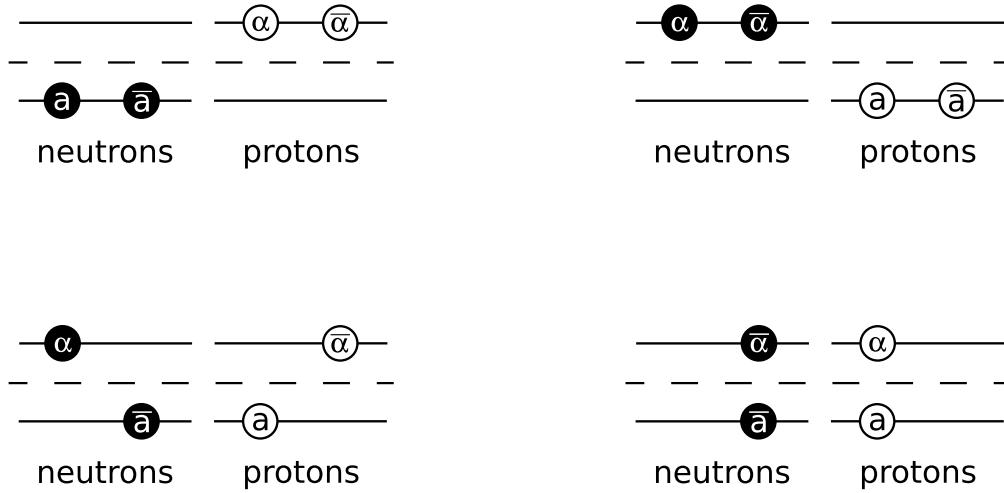
viron  $1/3$  (valeur atteinte dans la limite de symétrie d'isospin). Parmi les excitations DP, celles correspondant à  $\nu = 2$  sont majoritairement peuplées compte tenu d'un plus grand nombre de voies d'alimentation de ces configurations à l'ordre 2 des perturbations (voir figure III.3). En outre, parmi les excitations DP d'ordre 2 en neutrons celles de type  $nn+pp$  sont prépondérantes pour des raisons de coût énergétique. En effet, les configurations de ce type les moins énergétiques impliquent un seul niveau de trou et un seul niveau de particules, tandis que toutes les autres configurations DP impliquent au moins deux niveaux de trous ou deux niveaux de particules distincts. Par le même raisonnement, on peut interpréter la composition de l'état fondamental dans le secteur des TP où les excitations de type  $2nn+pp$ ,  $nn+2pp$  et  $nn+pp+np$  dominent avec des poids approximativement égaux.

Sous l'action du canal ( $S = 1, T = 0$ ), les simples paires  $np$  sont favorisées tandis que les paires  $nn$  et  $pp$  sont peu affectées comme l'illustre la figure III.5. Cette prépondérance



**FIGURE III.5** – Structure détaillée des simples paires (en haut), doubles paires (en bas à gauche) et triples paires (en bas à droite) dans l'état fondamental du  $^{48}\text{Cr}$  en fonction du rapport des intensités  $x = V_0^{(T=0)} / V_0^{(T=1)}$  pour  $V_0^{(T=1)} = -300 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^3$ .

des paires  $np$  est également observée dans les secteurs DP et TP. Elle découle du fait que



**FIGURE III.6** – Excitations d’une paire possibles à partir d’un niveau de trou et d’un niveau de particule pour les neutrons et les protons à la limite de symétrie d’isospin. Les excitations d’une paire  $np$  obtenues par renversement du temps de celles représentées sur la rangée du bas ne sont pas représentées. Figure tirée de la référence [Le Bloas11a].

l’élément de matrice  $\langle \Phi_i | \hat{V}_\delta | \Phi_j \rangle$  dans le canal  $T = 0$  est non nul seulement si les deux déterminants de Slater  $|\Phi_i\rangle$  et  $|\Phi_j\rangle$  de la base à  $N$  corps (restreinte aux états appariés) diffèrent par une excitation relative de paire  $np$ .

L’isospin dans les noyaux atomiques étant un bon nombre quantique en première approximation, la structure de l’état fondamental et des états isobariques analogues d’un noyau  $N = Z$  peut s’interpréter de façon particulièrement simple dans une base  $\mathcal{B}_T$  qui, à la limite de symétrie exacte d’isospin, diagonalise simultanément les opérateurs d’isospin  $\hat{\mathbf{T}}^2$  et  $\hat{T}_z$ .

Pour effectuer ce changement de base à partir d’une base  $\mathcal{B}$  de déterminants de Slater appariés, on utilise la propriété selon laquelle l’ensemble des excitations particules-trous d’un ordre fixé construites avec un jeu de niveaux de trous et de particules donnés est un sous-espace propre de  $\hat{\mathbf{T}}^2$  dans la limite où les fonctions d’onde des neutrons et des protons sont identiques. La matrice de passage de la base  $\mathcal{B}$  à la base  $\mathcal{B}_T$  est donc diagonale par blocs. Ces derniers sont caractéristiques des nombres de niveaux de trous et de particules impliqués pour un ordre d’excitation fixé.

Les excitations de simples paires dominant largement les corrélations d’appariement dans l’état fondamental, il suffit de considérer l’ensemble des six excitations SP formées à partir d’un niveau de trou  $a$  et d’un niveau de particule  $\alpha$  :

$$|\Phi_{02}\rangle = p_\alpha^\dagger p_\alpha^\dagger p_{\bar{\alpha}} p_a |\Phi_0\rangle \quad |\Phi_{20}\rangle = n_\alpha^\dagger n_\alpha^\dagger n_{\bar{\alpha}} n_a |\Phi_0\rangle \quad (\text{III.2})$$

$$|\Phi_{11}\rangle = n_\alpha^\dagger p_\alpha^\dagger p_{\bar{\alpha}} n_a |\Phi_0\rangle \quad |\Phi'_{11}\rangle = n_\alpha^\dagger p_\alpha^\dagger p_{\bar{\alpha}} n_a |\Phi_0\rangle \quad (\text{III.3})$$

$$|\overline{\Phi}_{11}\rangle = \hat{\mathcal{T}} |\Phi_{11}\rangle \quad |\overline{\Phi}'_{11}\rangle = \hat{\mathcal{T}} |\Phi'_{11}\rangle \quad (\text{III.4})$$

où  $|\bar{a}\rangle = \hat{\mathcal{T}} |a\rangle$  (état conjugué de  $|a\rangle$  par renversement du temps). Les quatre premières configurations sont représentées sur la figure III.6. Dans le sous-espace engendré par ces 6 configurations, l’opérateur  $\hat{\mathbf{T}}^2$  possède les valeurs propres 0 (deux fois dégénérées), 1 (trois fois dégénérées) et 2 (non dégénérée). L’opérateur  $\hat{R}_z$  de signature suivant l’axe  $z$  de symétrie du noyau commutant avec  $\hat{\mathbf{T}}^2$ , il est possible de construire une base commune d’états propres :

\* valeur propre  $T = 0$  (signature  $r = 1$ ) :

$$|\Psi_0^{(1)}\rangle = \frac{1}{2} (|\Phi_{11}\rangle + |\overline{\Phi_{11}}\rangle + |\Phi'_{11}\rangle + |\overline{\Phi'_{11}}\rangle) , \quad (\text{III.5})$$

$$|\Psi_0^{(2)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} (|\Phi_{02}\rangle + |\Phi_{20}\rangle) + \frac{1}{2\sqrt{3}} (|\Phi_{11}\rangle + |\overline{\Phi_{11}}\rangle - |\Phi'_{11}\rangle - |\overline{\Phi'_{11}}\rangle) , \quad (\text{III.6})$$

\* valeur propre  $T = 1$  :

– signature  $r = 1$  :

$$|\Psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\Phi_{02}\rangle - |\Phi_{20}\rangle) , \quad (\text{III.7})$$

– signature  $r = -1$  : les vecteurs propres les plus simples sont

$$|\widetilde{\Phi_{11}}^{(-)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\Phi_{11}\rangle - |\overline{\Phi_{11}}\rangle) , \quad (\text{III.8})$$

$$|\widetilde{\Phi'_{11}}^{(-)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\Phi'_{11}\rangle - |\overline{\Phi'_{11}}\rangle) , \quad (\text{III.9})$$

\* valeur propre  $T = 2$  (signature  $r = 1$ ) :

$$|\Psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} (|\Phi_{02}\rangle + |\Phi_{20}\rangle) - \frac{1}{\sqrt{6}} (|\Phi_{11}\rangle + |\overline{\Phi_{11}}\rangle - |\Phi'_{11}\rangle - |\overline{\Phi'_{11}}\rangle) . \quad (\text{III.10})$$

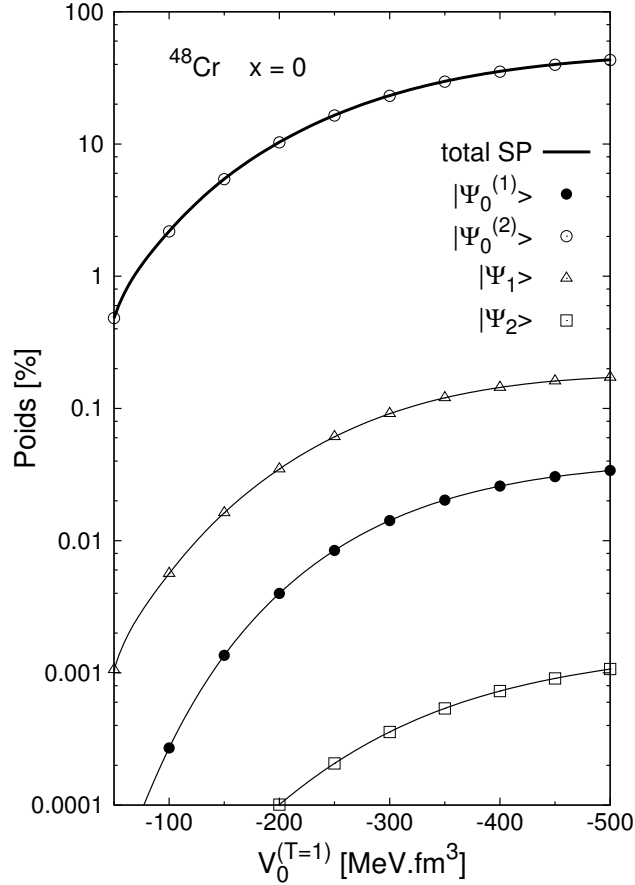
Sur la figure III.7 est représentée l'évolution de la structure de l'état fondamental du  $^{48}\text{Cr}$  en fonction de l'intensité  $V_0^{(T=1)}$ , en l'absence du canal ( $S = 1, T = 0$ ), dans le secteur SP en termes des quasi-états propres de  $\hat{T}^2$  de signature positive. L'état fondamental est très largement dominé par des combinaisons linéaires de type  $|\Psi_0^{(2)}\rangle$  puisque c'est la seule de signature positive, correspondant à  $T = 0$  et peuplant de façon approximativement équilibrée les excitations de paires  $nn$ ,  $np$  et  $pp$  (au sens de la figure III.4, panneau de gauche). Sous l'action du canal d'isospin  $T = 0$ , on s'attend à voir augmenter significativement le poids des contributions d'états de type  $|\Psi_0^{(1)}\rangle$  tandis que la contribution des états de type  $|\Psi_0^{(2)}\rangle$  devrait diminuer.

Pour finir cette étude des noyaux pair-pairs  $N = Z$ , on notera que la base  $\mathcal{B}_T$  définie ci-dessus offre a priori une décomposition également pertinente des états excités, permettant d'identifier parmi eux les états isobariques analogues  $T = 1$  et  $T = 2$  des noyaux pair-pairs  $N = Z$ . En effet, compte tenu du caractère faiblement brisé de la symétrie d'isospin, ces états doivent apparaître dans le spectre HTDA de basse énergie avec une structure dominée par les excitations SP combinées en états de type  $|\Psi_1\rangle$  et  $|\Psi_2\rangle$ , respectivement.

### 3.b) Etat fondamental et premier état excité des noyaux impair-impairs

Le long de la ligne  $N = Z$ , les noyaux doublement impairs se caractérisent par un état fondamental ( $J^+, T = 0$ ) (avec  $J \neq 0$ ) et un premier état excité ( $0^+, T = 1$ ) isomérique pour  $A < 40$ , et le contraire pour  $A > 40$ . Il existe toutefois une exception dans chacune de ces deux régions de masse : les noyaux  $^{34}\text{Cl}$  et  $^{58}\text{Cu}$ , pour lesquels les ordres d'apparition des états ci-dessus sont inversés par rapport au cas général.

Une approche de champ moyen et au-delà ne peut raisonnablement décrire les états de basse énergie de tels noyaux que si ces états correspondent à des déformations intrinsèques suffisamment grandes et rigides, et s'ils possèdent un moment angulaire non nul. En effet,



**FIGURE III.7** – Evolution en fonction de l'intensité  $V_0^{(T=1)}$  (en l'absence du canal  $T = 0$ ) de la structure de l'état fondamental du  $^{48}\text{Cr}$  dans le secteur SP en termes des quasi-états propres (III.5) à (III.10) de  $\hat{\mathbf{T}}^2$  de signature positive.

supposons que dans un état  $J^\pi = 0^+$  le noyau possède un axe de symétrie et considérons, pour simplifier, une solution de HFBCS ne brisant pas la symétrie de renversement du temps, par exemple dans l'approximation d'égal remplissage [Perez08]. On peut alors schématiser le spectre des neutrons et protons autour du niveau de Fermi du noyau ( $N - 1$ ,  $Z - 1$ ) pair-pair comme sur la figure III.6. Dans l'état fondamental du noyau impair-impair ( $N$ ,  $Z$ ), le niveau  $a$  est entièrement rempli (dégénérescence 4 à la limite de symétrie d'isospin), tandis que le niveau  $\alpha$  est occupé par un neutron et un proton. Désignons par  $|\Phi_0\rangle$  le déterminant de Slater correspondant au remplissage du noyau ( $N - 1$ ,  $Z - 1$ ) (jusqu'au niveau  $a$ ) et par  $|\Phi\rangle$  celui de plus basse énergie associé à la solution HFBCS+EFA du noyau ( $N$ ,  $Z$ ). Lorsque  $|\Phi\rangle$  possède un bon nombre quantique  $K > 0$ , on peut écrire  $|\Phi\rangle = n_\alpha^\dagger p_\alpha^\dagger |\Phi_0\rangle$ . Son état conjugué par renversement du temps possède alors la même énergie et la valeur opposée  $-K$ . L'interaction résiduelle, invariante par rotation autour de l'axe de symétrie, ne mélange donc pas les deux états, qui dominent chacun la solution corrélée correspondante. Au contraire lorsque  $K = 0$ , l'état

$$|\Phi\rangle = n_\alpha^\dagger p_\alpha^\dagger |\Phi_0\rangle \quad (\text{III.11})$$

et son conjugué par renversement du temps  $|\bar{\Phi}\rangle$  possèdent le même nombre quantique  $K$  et sont fortement mélangés par l'interaction résiduelle. Aucune de ces deux configurations ne constitue donc un quasi-vide d'excitations particules-trous pertinent pour développer l'état

corrélé. Comme l'ont fait remarquer Satuła et collaborateurs [Satuła10], les états  $|\Phi\rangle$  et  $|\bar{\Phi}\rangle$  correspondant à  $K = 0$  possèdent un fort mélange d'isospin car ce sont des superpositions d'états  $T = 0$  et  $T = 1$  (équiprobables). En effet les combinaisons linéaires

$$|\tilde{\Phi}^{(\pm)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\Phi\rangle \pm |\bar{\Phi}\rangle) \quad (\text{III.12})$$

sont des états propres de  $\hat{\mathbf{T}}^2$ ,  $|\tilde{\Phi}^{(+)}\rangle$  étant un état  $T = 1$  et  $|\tilde{\Phi}^{(-)}\rangle$  un état  $T = 0$ . De plus, ce sont respectivement des états de signature  $r = 1$  et  $r = -1$  suivant l'axe de révolution du noyau. La restauration de symétrie d'isospin lève alors la dégénérescence et compte tenu du caractère répulsif de l'énergie de symétrie, c'est l'état  $T = 0$ , anti-symétrique dans l'espace d'isospin, qui est énergétiquement favorisé [Satuła10].

Enfin, si l'on effectue un calcul auto-cohérent bloqué sans EFA, l'état  $|\Phi\rangle$  brise spontanément la symétrie de renversement du temps (indépendamment de la valeur de  $K$ ) et cette dernière doit être restaurée par les corrélations au-delà du champ moyen. Ceci introduit une brisure de symétrie d'isospin non physique dans la solution de champ moyen car dans les solutions HFBCS des isobares pair-pairs  $(N + 1, Z - 1)$  et  $(N - 1, Z + 1)$ , la symétrie de renversement du temps est au contraire préservée. Par conséquent, dans l'étude à l'approximation HTDA de la transition de Fermi super-permise  $0^+ \rightarrow 0^+$  présentée au chapitre IV, il conviendra de déterminer la solution HFBCS du noyau impair-impair impliqué sans les effets de polarisation du cœur et de considérer les excitations de paires par rapport à l'état  $|\tilde{\Phi}^{(+)}\rangle$  pour ne pas introduire de brisure non physique de symétrie d'isospin.



# Chapitre IV

## Brisure de symétrie d'isospin

Le concept d'isospin introduit en 1933 par Heisenberg en tant que formalisme commode s'est montré par la suite très fécond car il s'est révélé être une symétrie de l'interaction nucléaire forte avec une assez bonne approximation dans les noyaux atomiques. Du point de vue théorique, quantifier avec précision son degré de brisure et le confronter à diverses manifestations expérimentales (décroissance  $\gamma$  par transitions E1 interdites d'isospin dans les noyaux  $N = Z$ , décroissance  $\beta$  par transitions de Fermi super-permises  $0^+ \rightarrow 0^+$ , différence d'énergie de liaison des noyaux miroirs...) est très difficile mais peut apporter des contraintes sur les modèles de structure nucléaire.

Dans ce contexte ce chapitre s'attache essentiellement à étudier les mécanismes par lesquels les corrélations d'appariement traitées à l'approximation HTDA contribuent à briser la symétrie d'isospin. Plus particulièrement on s'intéresse à la structure de l'état fondamental des noyaux pair-pair  $N = Z$ , puis à l'élément de matrice de transition de type Fermi entre un noyau impair-impair  $N = Z$  dans son état  $0^+$  le plus bas et le noyau  $(N + 1, Z - 1)$  dans son état fondamental.

### 1) Distribution d'isospin d'un état nucléaire

De façon générale, l'état fondamental  $|\Psi\rangle$  d'un noyau  $(N, Z)$  peut être développé sur une base d'états propres de  $\hat{T}^2$  et  $\hat{T}_z$  selon

$$|\Psi\rangle = \sum_{T=T_0}^{A/2} \sum_{\xi} a_{T,\xi} |\xi T T_z\rangle, \quad (\text{IV.1})$$

où  $\xi$  représente tous les degrés de liberté autres que ceux d'isospin et  $T_0 = |T_z| = (N - Z)/2$ . Ce développement est connu pour être très rapidement convergent et peut être tronqué à  $T_0 + n \ll A/2$ . La distribution d'isospin résultante dans l'état  $|\Psi\rangle$ , définie par

$$P_{\Psi}^{(n)}(T) = \sum_{\xi} |a_{T,\xi}^{(n)}|^2 \quad (T_0 \leq T \leq T_0 + n), \quad (\text{IV.2})$$

est solution d’un système linéaire de Van der Monde

$$\underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ \tau_0 & \tau_1 & \tau_2 & \cdots & \tau_n \\ \tau_0^2 & \tau_1^2 & \tau_2^2 & \cdots & \tau_n^2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \tau_0^n & \tau_1^n & \tau_2^n & \cdots & \tau_n^n \end{pmatrix}}_{\mathcal{V}} \begin{pmatrix} P_{\Psi}^{(n)}(T_0) \\ P_{\Psi}^{(n)}(T_0 + 1) \\ P_{\Psi}^{(n)}(T_0 + 2) \\ \vdots \\ P_{\Psi}^{(n)}(T_0 + n) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle \Psi | \Psi \rangle \\ \langle \Psi | \hat{\mathbf{T}}^2 | \Psi \rangle \\ \langle \Psi | \hat{\mathbf{T}}^4 | \Psi \rangle \\ \vdots \\ \langle \Psi | \hat{\mathbf{T}}^{2n} | \Psi \rangle \end{pmatrix} \quad (\text{IV.3})$$

avec  $\tau_i = (T_0 + i)(T_0 + i + 1)$  pour  $i$  compris entre 0 et  $n$ . Ce système possède une solution unique (puisque son déterminant vaut  $\det \mathcal{V} = \prod_{0 \leq i < j \leq n} (\tau_j - \tau_i) \neq 0$ ). Son expression analytique à partir des polynômes symétriques élémentaires est donnée par exemple dans [Le Bloas11a]). Comme la symétrie d’isospin est faiblement brisée dans les noyaux atomiques, la distribution d’isospin de l’état nucléaire  $|\Psi\rangle$  est fortement piquée sur une composante dominante notée  $T_d$ . On peut en déduire le paramètre de mélange d’isospin  $\alpha$  dans l’état  $|\Psi\rangle$  par la relation

$$\alpha^{(n)} = 1 - P_{\Psi}^{(n)}(T_d). \quad (\text{IV.4})$$

Dans l’état fondamental d’un noyau pair-pair  $N = Z$  où  $T_d = T_0 = 0$ , on trouve l’expression bien connue pour  $n = 1$

$$\alpha^{(1)} = \frac{1}{2} \langle \Psi | \hat{\mathbf{T}}^2 | \Psi \rangle = \frac{1}{2} \langle \Psi | \hat{T}_- \hat{T}_+ | \Psi \rangle, \quad (\text{IV.5})$$

tandis que pour  $n = 2$  on obtient

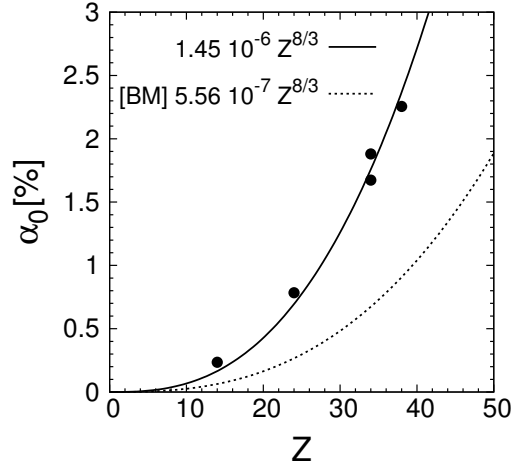
$$\alpha^{(2)} = \frac{2}{3} \langle \Psi | \hat{\mathbf{T}}^2 | \Psi \rangle - \frac{1}{12} \langle \Psi | \hat{\mathbf{T}}^4 | \Psi \rangle = \alpha^{(1)} - \frac{1}{12} \langle \Psi | \hat{T}_-^2 \hat{T}_+^2 | \Psi \rangle. \quad (\text{IV.6})$$

Le terme correctif par rapport à  $\alpha^{(1)}$  étant négatif et a priori faible (la symétrie d’isospin est faiblement brisée dans les noyaux atomiques), on s’attend à ce que l’approximation (IV.5) sur-estime légèrement le mélange d’isospin. Pour déterminer cette correction, il est nécessaire de calculer les éléments de matrice de l’opérateur à 4 corps  $\hat{T}_-^2 \hat{T}_+^2$ , qui peut être décomposé en opérateurs séparables à 2, 3 et 4 corps. Lorsque l’état corrélé HTDA est constitué uniquement d’excitations de paires, les seuls éléments de matrice non-diagonaux à calculer sont ceux qui font intervenir des couples de déterminants de Slater différant soit par une excitation 2p2h, soit par une excitation 4p4h. L’expression de ces éléments de matrice est donnée dans l’annexe D).

## 2) Mélange d’isospin dans les noyaux pair-pairs $N = Z$

### 2.a) Mélange d’isospin dans la solution de champ moyen

L’étude du mélange d’isospin des noyaux pair-pairs  $N = Z$  [Le Bloas11a, Le Bloas12] porte sur les noyaux bien déformés suivants :  $^{28}\text{Si}$ ,  $^{48}\text{Cr}$ ,  $^{68}\text{Se}$  et  $^{76}\text{Sr}$ , avec la fonctionnelle de Skyrme dans sa paramétrisation SIII (négligeant les termes en spin-courant tenseur) et les intensités  $G_0^{(n)} = G_0^{(p)} = -17.70$  MeV de la force de séniorité. Comme une quasi-dégénérescence



**FIGURE IV.1** – Paramètre de mélange d’isospin  $\alpha_0$  dans le quasi-vide particule-trou  $|\Phi_0\rangle$  pour des noyaux pair-pairs déformés le long de la ligne  $N = Z$  en fonction de  $Z$  (cercles pleins). La courbe en pointillés représente le calcul dans le modèle hydrodynamique de Bohr, Damgård et Mottelson [Bohr67].

prolate-oblate se produit dans le noyau  $^{68}\text{Se}$ , deux calculs indépendants (sans mélange de configurations prolate-oblate) sont effectués.

En utilisant l’approximation (IV.6) au paramètre de mélange d’isospin, on trouve que dans le quasi-vide  $|\Phi_0\rangle$  d’un noyau pair-pair  $N = Z$  issu du calcul HFBCS,  $\alpha_0$  varie approximativement en  $Z^{8/3}$  (voir figure IV.1). Cette tendance est en accord avec la prédiction de Bohr, Damgård et Mottelson [Bohr67] dans un modèle hydrodynamique. Toutefois ce dernier prédit un mélange d’isospin environ trois fois plus faible que dans la solution HFBCS obtenue ici.

Par ailleurs, pour tous les noyaux ci-dessus, la composante  $T = 2$  joue un rôle négligeable dans le mélange d’isospin de l’état fondamental non corrélé. On peut le voir sur la figure 5 de la référence [Le Bloas12] en considérant la limite d’interaction résiduelle nulle, ainsi que dans la table IV.1 pour le noyau représentatif  $^{48}\text{Cr}$ .

**TABLE IV.1** – Analyse de la distribution d’isospin dans la solution de champ moyen du noyau  $^{48}\text{Cr}$  ( $T_0 = 0$ ) avec SIII : rôle de la composante  $T_0 + 2$  et effet du traitement des termes d’échange de l’interaction coulombienne. Les probabilités  $P(T)$  et le paramètre de mélange  $\alpha_0$  sont exprimés en %.

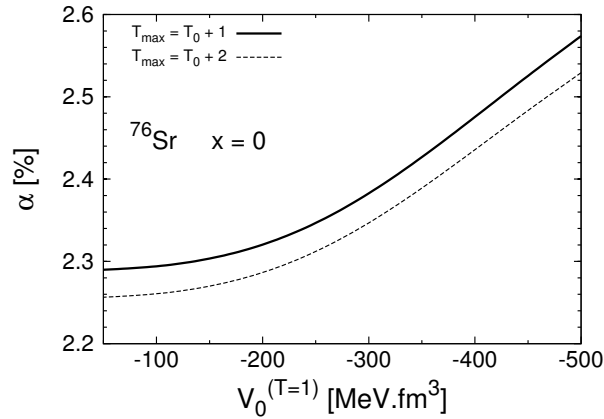
Traitement de l’interaction coulombienne	Troncation à $T_0 + 1$	Troncation à $T_0 + 2$		
	Eq. (IV.5)	Eq. (IV.6)		
	$P(T_0 + 1) = \alpha_0$	$P(T_0 + 1)$	$P(T_0 + 2)$	$\alpha_0$
exact	0.788	0.782	0.002	0.784
Slater	0.789	0.783	0.002	0.785

Compte tenu du temps de calcul très long du potentiel coulombien d’échange, il est intéressant d’étudier l’impact de l’approximation de Slater sur le paramètre de mélange d’isospin. Comme le montre la table IV.1 pour le  $^{48}\text{Cr}$ , la différence entre le calcul exact et le calcul dans l’approximation de Slater est extrêmement faible. Ceci est confirmé dans les autres noyaux étudiés dans la référence [Le Bloas12].

## 2.b) Rôle des corrélations d’appariement

Les noyaux de la sous-section précédente ont également été étudiés dans l’approche HTDA en fonction de l’intensité de l’interaction résiduelle  $\hat{V}_\delta$  dans les canaux d’isospin  $T = 1$  et  $T = 0$  afin d’établir le rôle des corrélations d’appariement sur le mélange d’isospin. Plus précisément on souhaite expliciter le mécanisme par lequel ces corrélations contribuent au paramètre de mélange  $\alpha$  pour chaque canal d’isospin. Pour ce faire, il convient de construire la base à  $N$  corps de façon à ne pas introduire de brisure non physique d’isospin dans l’état corrélé. Deux schémas de troncation sont mis en œuvre ici. D’une part, dans l’approche de la référence [Le Bloas12] la base à  $N$  corps contient toutes les excitations appariées d’énergie inférieure ou égale à l’énergie de coupure  $E_{\text{cut}} = 3 \hbar\omega(A)$  où  $\hbar\omega(A) = 41 \times A^{-1/3}$  (en MeV) représente l’espacement en énergie entre deux couches majeures d’oscillateur harmonique sphérique. En plus de cette troncation en énergie d’excitation on rejette les configurations dont l’analogie d’isospin, obtenu en échangeant les rôles des neutrons et des protons, possède une énergie d’excitation dépassant  $E_{\text{cut}}$ . D’autre part, pour l’étude en fonction de l’intensité de  $\hat{V}_\delta$  dans le canal  $T = 0$ , la base à  $N$  corps contient toutes les excitations SP, DP et TP construites à partir des 4 niveaux de trous les plus hauts en énergie et des 4 niveaux de particules les plus bas pour les neutrons et les protons<sup>1</sup>.

Dans un premier temps l’interaction résiduelle coulombienne est négligée et l’on étudie le rôle de la composante  $T = 2$  de la distribution d’isospin sur le paramètre de mélange  $\alpha$ . Comme le montre la figure 5 de la référence [Le Bloas12], le rôle de la composante  $T = 2$  augmente avec  $Z$ . En choisissant le noyau étudié le plus lourd ( $^{76}\text{Sr}$ ), on constate sur la figure IV.2 que l’approximation (IV.5) reste excellente quelle que soit l’intensité  $V_0^{(T=1)}$  en l’absence d’interaction résiduelle dans le canal  $T = 0$ . Comme ce dernier apporte peu de



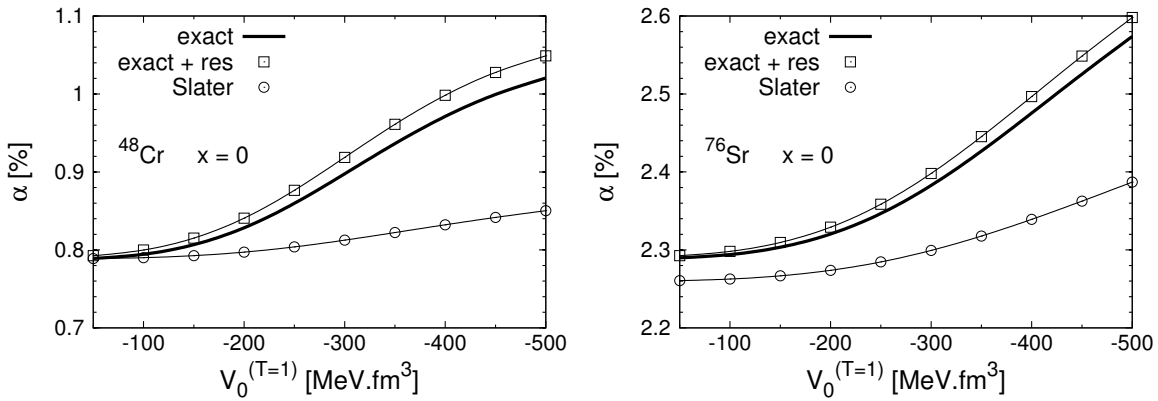
**FIGURE IV.2** – Variation avec  $V_0^{(T=1)}$  en l’absence du canal  $T = 0$  du paramètre de mélange d’isospin  $\alpha$  dans les approximations (IV.5) et (IV.6) pour l’état fondamental du noyau  $^{76}\text{Sr}$ . La solution de champ moyen est la même que pour la figure III.2, avec un traitement exact des termes d’échange de l’interaction coulombienne, et la base à  $N$  corps est construite comme pour la figure III.2 avec une troncation en énergie d’excitation particules-trous respectant l’invariance par symétrie d’isospin égale à 3 fois l’énergie  $\hbar\omega(A) = 41 \times A^{-1/3}$  (en MeV) entre deux couches majeures d’oscillateur harmonique sphérique.

corrélations supplémentaires d’après l’étude de la structure de l’état fondamental apparié

1. Pour des raisons de temps de calcul et de mémoire, compte tenu de la nécessité très récente de corriger l’étude du mélange d’isospin en fonction de  $x = V_0^{(T=0)}/V_0^{(T=1)}$  de la référence [Le Bloas12].

au chapitre III, on s’attend à ce que cette conclusion reste valide en fonction de  $V_0^{(T=0)}$ . Dans la suite on va donc négliger la composante  $T = 2$  de la distribution d’isospin dans le calcul du paramètre  $\alpha$ .

Dans un deuxième temps, sur la figure IV.3 pour les noyaux  $^{48}\text{Cr}$  et  $^{76}\text{Sr}$  issue des références [Le Bloas11a, Le Bloas12], on étudie l’effet de la contribution coulombienne à l’interaction résiduelle. La courbe en trait plein épais correspond à un calcul où les termes d’échange de l’interaction coulombienne sont traités exactement mais la contribution résiduelle dans HTDA est négligée, tandis que la courbe avec des symboles carrés représente le résultat obtenu en ajoutant cette contribution résiduelle. On en déduit que cette dernière n’augmente que très légèrement le mélange d’isospin. A titre de comparaison la courbe avec des cercles obtenue dans l’approximation de Slater et sans interaction coulombienne résiduelle montre quantitativement l’importance du traitement exact des termes d’échange coulombiens dans le champ moyen. Toutefois, ces résultats sont obtenus en utilisant l’interaction résiduelle



**FIGURE IV.3** – Rôle de l’interaction coulombienne résiduelle sur le mélange d’isospin de l’état fondamental des noyaux  $^{48}\text{Cr}$  (panneau de gauche) et  $^{76}\text{Sr}$  (panneau de droite) en fonction de  $V_0^{(T=1)}$  (en l’absence du canal  $T = 0$ ) dans l’approximation (IV.5).

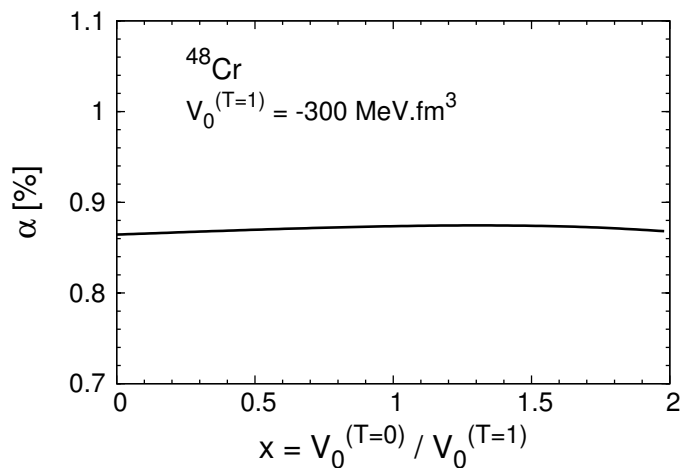
coulombienne “nue” dans l’espace du modèle, autrement dit avec  $\hat{V}_{\text{res}} = \hat{P} : \hat{V}_\delta + \hat{V}_C : \hat{P}$ . Bien que l’interaction coulombienne effective associée à cet espace ne se réduise a priori pas à une renormalisation globale des éléments de matrice de l’interaction nue, il est intéressant de faire cette approximation et d’estimer le rôle de la renormalisation sur le mélange d’isospin. Pour cela, on peut considérer le calcul de principe suivant, dans le noyau  $^{20}\text{Ne}$  pour des raisons de temps de calcul. Avec  $N_0 = 4$  (paramètres d’oscillateurs optimisés :  $b = 0.639$ ,  $q = 1.310$ ) et une base à  $N$  corps composés de simples et doubles paires à partir des 4 niveaux de trous les plus hauts et des 4 niveaux de particules les plus bas, on détermine la solution fondamentale HTDA avec l’interaction coulombienne résiduelle pondérée par un facteur de renormalisation allant jusqu’à 25% d’augmentation de la valeur nominale de la constante de couplage  $e^2 = 1.440 \text{ MeV} \cdot \text{fm}$ . La comparaison des paramètres  $\alpha$  obtenus (en négligeant la composante  $T = 2$  de la distribution d’isospin) est présentée dans la table IV.2. Ces résultats établissent que le mélange d’isospin dans une solution corrélée de type HTDA provient essentiellement de la contribution au champ moyen de l’interaction coulombienne. Cette conclusion résulte du fait que la solution de champ moyen auto-cohérent incorpore les effets à un corps des corrélations à longue portée et que l’interaction de Coulomb est précisément une interaction de très longue portée. Par conséquent l’interaction résiduelle coulombienne sera négligée dans la discussion ci-dessous sur le rôle de l’appariement dans

le mélange d’isospin.

**TABLE IV.2** – Influence d’un facteur de renormalisation de l’interaction coulombienne résiduelle sur le mélange d’isospin du  $^{20}\text{Ne}$  avec  $N_0 = 4$  (paramètres d’oscillateur optimisés :  $b = 0.639$ ,  $q = 1.310$ ), une base à  $N$  corps composés de simples et doubles paires à partir des 4 niveaux de trous les plus hauts et des 4 niveaux de particules les plus bas, et les intensités de l’interaction nucléaire résiduelle  $V_0^{(T=1)} = -200 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^3$  et  $V_0^{(T=0)} = 0$ . La ligne en gras correspond à l’interaction résiduelle non renormalisée.

Facteur de renormalisation	$E_{\text{corr}}$	Poids des configurations SP (%)			$\alpha$ (%)
		$nn$	$np$	$pp$	
0.0	-1.274	5.55	4.94	4.41	0.108
0.5	-1.275	5.45	5.42	4.70	0.097
0.75	-1.276	5.40	5.69	4.88	0.108
<b>1.0</b>	<b>-1.278</b>	<b>5.34</b>	<b>5.98</b>	<b>5.09</b>	<b>0.133</b>
1.25	-1.281	5.27	6.29	5.33	0.172

De manière générale les corrélations d’appariement  $T = 1$  apportent une contribution supplémentaire à l’impureté d’isospin dans l’état fondamental par rapport au champ moyen. Cette contribution croît avec l’intensité  $V_0^{(T=1)}$  comme l’illustrent les courbes en trait plein des figures IV.2 et IV.3 pour les noyaux  $^{48}\text{Cr}$  et  $^{76}\text{Sr}$ . A la même échelle et sur la même plage de variation de l’intensité  $V_0^{(T=0)}$ , la figure IV.4 montre que les corrélations d’appariement  $T = 0$  n’ont qu’un effet très faible sur le mélange d’isospin du  $^{48}\text{Cr}$ . Plus précisément, à grande valeur de  $x$ , elles tendent à diminuer légèrement le paramètre de mélange. Ceci confirme la conclusion qualitative tirée dans la référence [Le Bloas12].



**FIGURE IV.4** – Variation du paramètre de mélange d’isospin  $\alpha$  de l’état fondamental du noyau  $^{48}\text{Cr}$  avec le rapport d’intensités  $x = V_0^{(T=0)} / V_0^{(T=1)}$  pour  $V_0^{(T=1)} = -300 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^3$  dans l’approximation (IV.5) et sans interaction coulombienne résiduelle. La solution de champ moyen et la base à  $N$  corps sont les mêmes que pour l’étude en fonction de  $x$  de la structure de l’état fondamental sur le panneau de droite de la figure III.2.

L’isospin dans les noyaux atomiques étant un bon nombre quantique en première approximation, le mécanisme par lequel les corrélations d’appariement introduisent du mélange d’isospin dans l’état fondamental  $|\Psi\rangle$  d’un noyau  $N = Z$  peut s’interpréter de façon particulièrement simple dans la base  $\mathcal{B}_T$  du chapitre III qui, à la limite de symétrie exacte d’isospin, diagonalise simultanément les opérateurs d’isospin  $\hat{T}^2$  et  $\hat{T}_z$ . Cette base est la réunion de toutes les excitations particules-trous construites avec des jeux de niveaux de trous et de particules donnés (analogues pour les neutrons et les protons) jusqu’à un ordre maximal fixé (4 pour les calculs SP+DP).

En effet, l’opérateur  $\hat{T}^2$  a des éléments de matrice très faibles entre des états appartenant à deux sous-espaces distincts ainsi construits (appelés “groupes” dans la référence [Le Bloas11a] et “clusters” dans la référence [Le Bloas12]). On peut donc négliger ces éléments de matrice dans le calcul de mélange d’isospin, ce qui constitue l’approximation dite des “groupes” découplés (DCA en anglais). Cette approximation confère un caractère additif au paramètre de mélange  $\alpha$  qui s’exprime alors comme

$$\alpha \approx \alpha_0 + \sum_g \alpha_g \quad (\text{IV.7})$$

où  $\alpha_g$  est le mélange d’isospin associé au groupe  $g$ , défini par

$$\alpha_g = \sum_{\Psi_i \in g} \left| a_i^{(g)} \right|^2 \left( P_{\Phi_0}(0) - P_{\Psi_i}(0) \right). \quad (\text{IV.8})$$

Les états  $|\Psi_i\rangle$  sur lesquels porte la somme sont vecteurs propres de  $\hat{R}_z$  et quasiment vecteurs propres de  $\hat{T}^2$ . On leur attribue donc une valeur de  $T$  bien définie tout en gardant à l’esprit qu’ils possèdent un faible mélange d’isospin. Dans le canal ( $S = 0, T = 1$ ), l’approximation DCA s’avère d’une excellente qualité [Le Bloas12] et cela est également vrai dans le canal ( $S = 1, T = 0$ ), même pour des valeurs élevées de l’intensité  $V_0^{(T=0)}$ .

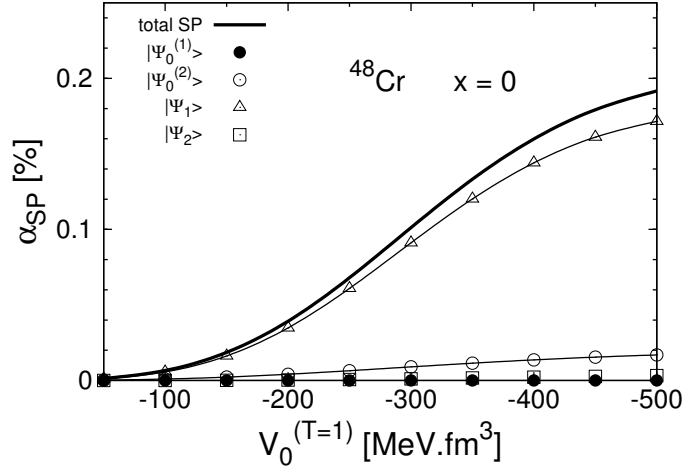
Grâce à la décomposition de  $\alpha$  selon la DCA, on déduit que le mélange d’isospin dans l’état fondamental apparié est le siège d’une compétition entre deux mécanismes : d’une part  $\alpha$  peut être alimenté par des états  $|\Psi_i\rangle$  associés à  $T = 0$  par un poids  $\left| a_i^{(g)} \right|^2$  grand mais une faible différence  $P_{\Phi_0}(0) - P_{\Psi_i}(0)$ , d’autre part  $\alpha$  peut être alimenté par des états  $|\Psi_i\rangle$  associés à  $T \neq 0$  par une différence  $P_{\Phi_0}(0) - P_{\Psi_i}(0)$  proche de 1 mais un poids  $\left| a_i^{(g)} \right|^2$  faible. Sous l’action du canal ( $S = 0, T = 1$ ) de l’interaction résiduelle, c’est le deuxième mécanisme qui est à l’œuvre comme le révèle la figure IV.5, avec une contribution majoritaire provenant des états de type  $|\Psi_1\rangle$  défini en (III.7).

### 3) Transitions de Fermi super-permises $0^+ \rightarrow 0^+$

Le seul mode de décroissance  $\beta$  entre deux états nucléaires ( $J^\pi = 0^+, T = 1$ ) est une transition de Fermi dite super-permise. La mesure de la force de transition  $ft$  peut directement être reliée à la constante de couplage vectorielle  $G_V$  de l’interaction faible selon

$$ft(1 + \delta_R)(1 + \delta_{NS} - \delta_c) \equiv \mathcal{F}t = \frac{K}{|M_F|^2 G_V^2 (1 + \Delta_R)}. \quad (\text{IV.9})$$

Dans cette expression  $K = 2\pi^3 \hbar (\hbar c)^6 \ln(2) / (m_e c^2)^5$  et  $|M_F|^2 = |\langle f | \hat{T}_+ | i \rangle|^2$  est le carré de l’élément de matrice nucléaire entre les états initial  $|i\rangle$  et final  $|f\rangle$  purs en isospin. Comme



**FIGURE IV.5** – Décomposition de la contribution des excitations SP au mélange d’isospin de l’état fondamental du noyau  $^{48}\text{Cr}$  selon l’approximation des “groupes” découplés en fonction de l’intensité de l’interaction résiduelle dans le canal ( $S = 0, T = 1$ ).

$T = 1$ , cet élément de matrice vaut  $\sqrt{2}$ . La constante de couplage vectorielle est égale au produit de l’élément  $V_{ud}$  de la matrice de mélange des quarks de Cabibbo–Kobayashi–Maskawa par la constante de couplage de Fermi  $G_F$ . Les quantités  $\Delta_R$  et  $\delta_R$  sont des corrections dites radiatives,  $\delta_{NS}$  est une correction dite de structure nucléaire et  $\delta_c$  est la correction due à la brisure de symétrie d’isospin (ISB). L’évaluation de ces corrections est présentée par exemple dans la référence [Towner10a]. La dernière d’entre elles relève de la structure nucléaire et a été étudiée dans de nombreuses approches [Towner10b], notamment HTDA [Le Bloas11a, Le Bloas11b] et HF (sans corrélations d’appariement) avec projections sur l’isospin et le moment angulaire puis rediagonalisation de l’interaction de Coulomb [Satuła12].

Dans cette section on s’intéresse aux transitions  $\beta^+$  de Fermi de l’état ( $0^+, T = 1$ ) (fondamental ou premier état excité) d’un noyau impair-impair  $N = Z$  vers l’état fondamental du noyau pair-pair ( $N + 1, Z - 1$ ) en prenant l’exemple de la décroissance du  $^{50}\text{Mn}$  vers le  $^{50}\text{Cr}$ .

### 3.a) Description des noyaux initial et final

Pour ne pas introduire de brisure non physique de symétrie d’isospin, la solution HFBCS du noyau impair-impair  $N = Z$  est décrite sans les effets de polarisation du cœur. De plus, pour générer une base à  $N$  corps de déterminants de Slater appariés qui préserve l’invariance d’isospin à la limite où les fonctions d’onde des neutrons et des protons sont identiques, les excitations de paires doivent être créées par rapport à l’état  $|\tilde{\Phi}^{(+)}\rangle$  défini en (III.12). Enfin, il faut décrire de façon cohérente du point de vue de la symétrie d’isospin l’isobare pair-pair de la transition considérée.

Dans ce contexte, deux types de calculs sont possibles : l’un à la Koopmans partant d’une solution HFBCS d’un des noyaux pair-pairs  $N = Z$  voisins (le  $^{48}\text{Cr}$  ou le  $^{52}\text{Fe}$  pour la décroissance du  $^{50}\text{Mn}$ ), l’autre utilisant l’approximation HFBCS+EFA pour générer directement les solutions de champ moyen (paires par renversement du temps) dans les deux noyaux de la transition. Pour des raisons de simplicité technique, la première approche a été



retenue<sup>2</sup>. On s’attend à ce qu’elle conduise à une minoration de  $\delta_c$ .

### 3.b) Correction d’isospin à l’élément de matrice de transition

Sur la figure IV.6, la correction  $\delta_c$  (en %) obtenue à l’issu de trois calculs HTDA est tracée en fonction de l’intensité  $V_0^{(T=1)}$  de l’interaction  $\hat{V}_\delta$  dans le canal ( $S = 0, T = 1$ ) seul pour la transition  $^{50}\text{Mn}(0^+) \rightarrow ^{50}\text{Cr}(0^+)$ . Dans le premier calcul, les termes d’échange de l’interaction cou-

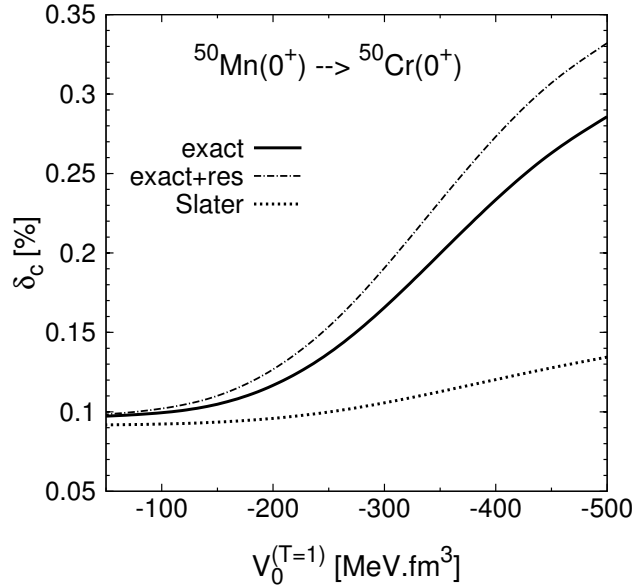


FIGURE IV.6 – Correction à l’élément de matrice de Fermi due à la brisure de symétrie d’isospin en fonction de l’intensité de  $\hat{V}_\delta$  dans le canal ( $S = 0, T = 1$ ) pour la transition  $^{50}\text{Mn}(0^+) \rightarrow ^{50}\text{Cr}(0^+)$ .

lombienne sont traités exactement mais la contribution résiduelle dans HTDA est négligée (courbe en trait plein). Dans le deuxième calcul on a ajouté cette dernière (courbe en pointillés-tirets). Enfin le dernier calcul sert de comparaison et est obtenu dans un schéma “minimal” à l’approximation de Slater sans interaction résiduelle coulombienne.

Ces trois séries de résultats montrent que les corrélations d’appariement produites par le canal  $T = 1$  de  $\hat{V}_\delta$  augmentent la correction  $\delta_c$ . Plus précisément on constate qu’avec un traitement exact des termes d’échange coulombiens,  $\delta_c$  est particulièrement sensible à  $|V_0^{(T=1)}|$  au-delà de  $200 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^3$  et que l’effet dominant provient de la réduction à un corps de l’interaction de Coulomb.

La gamme de valeurs obtenues pour  $\delta_c$  dans cette transition est plus faible d’un facteur 2 environ que celles de la référence [Satuła12]. La raison principale est probablement la minimisation de la brisure d’isospin dans le noyau fils  $^{50}\text{Cr}$  par l’utilisation dans la description de ce noyau du spectre et des fonctions d’onde à un corps du  $^{48}\text{Cr}$  pour lequel  $N = Z$ . Comme les résultats de Satuła et collaborateurs [Satuła12], qui ne tiennent pas compte des corrélations d’appariement, conduisent à un élément de matrice  $|V_{ud}|$  plus faible que celui nécessaire pour la condition d’unitarité de la première ligne de la matrice CKM, on en déduit que les corrélations d’appariement tendent à rapprocher de cette condition.

2. La seconde approche nécessite le formalisme de Löwdin [Löwdin55] car les déterminants de Slater impliqués sont construits sur des bases à un corps différentes. Ce formalisme a été utilisé dans la publication [Hao12] pour étudier l’effet de la restauration de symétrie de parité sur les barrières de fission.



# Chapitre V

## Polarisation du cœur dans les noyaux impairs

Dans un noyau contenant un nombre impair de neutrons et/ou de protons, la symétrie de renversement du temps ne peut jamais être une symétrie auto-cohérente d'une solution de Hartree–Fock–Bogoliubov ou Hartree–Fock–BCS avec blocage auto-cohérent. C'est le cas également des isomères  $K$  traités dans ces approches. La densité à un corps du cœur pair-pair sous-jacent est modifiée par la présence du nucléon supplémentaire : on parle alors de polarisation du cœur. Cette dernière est à la fois vectorielle à cause du caractère vectoriel de la densité de spin à un corps (impaire par renversement du temps), mais aussi scalaire comme l'est la densité nucléonique à un corps (paire par renversement du temps). Cette brisure spontanée de symétrie du hamiltonien à un corps est un mécanisme permettant d'inclure l'effet à un corps de certaines corrélations, tout comme la déformation vis-à-vis de la symétrie de rotation. C'est donc l'interaction résiduelle, au sens du partitionnement (I.3) de l'hamiltonien du noyau, qui doit restaurer la symétrie brisée en induisant des excitations particules-trous dans la solution au-delà du champ moyen. Ce faisant, on restaurerait par la même occasion la symétrie de rotation, ce qui requiert bien d'autres configurations que les excitations de paires.

Dans ce chapitre on étudie l'effet de la polarisation du cœur dans la solution de champ moyen puis des corrélations d'appariement sur deux types d'observables : des différences d'énergies de liaison et le moment dipolaire magnétique.

### 1) Différences d'énergie de liaison

Compte tenu de la dépendance en densité de l'interaction de Skyrme, les calculs de type champ moyen de différences d'énergie de liaison, entre différents noyaux ou différentes configurations d'un même noyau, sont en toute rigueur sujets à caution. Malgré cela, l'approche Skyrme–Hartree–Fock–BCS a rencontré un franc succès dans les calculs de barrières de fission. Il est alors légitime de l'appliquer à des différences d'énergie de liaison entre noyaux voisins pour la tester (comme on l'a fait au chapitre II avec le terme d'échange de l'interaction coulombienne) et étudier le rôle de la polarisation du cœur.

Par ailleurs, le caractère phénoménologique de l'interaction résiduelle et la troncation de la base à  $N$  corps dans HTDA introduisent a priori un biais supplémentaire. Toutefois on s'attend à ce que cette approche décrive correctement les corrélations d'appariement dans les noyaux impairs. C'est par conséquent dans cet esprit qu'ont été entrepris des calculs

de différences de masse pair-impair isovectorielles [Bonneau11] et de barrières de fission [Koh13].

### 1.a) Différences de masse pair-impair “isovectorielles”

La différence de masse pair-impair “isovectorielle”  $\delta(N, Z)$  est définie par [Bonneau11] :

$$\delta(N, Z) = \Delta_n^{(3)}(N, Z) - \Delta_p^{(3)}(N, Z) \quad (\text{V.1})$$

où  $\Delta_n^{(3)}(N, Z)$  et  $\Delta_p^{(3)}(N, Z)$  sont les formules à 3 points usuelles :

$$\begin{aligned} \Delta_n^{(3)}(N, Z) &= \frac{(-1)^N}{2} \left[ E(N-1, Z) + E(N+1, Z) - 2E(N, Z) \right] \\ \Delta_p^{(3)}(N, Z) &= \frac{(-1)^Z}{2} \left[ E(N, Z-1) + E(N, Z+1) - 2E(N, Z) \right], \end{aligned} \quad (\text{V.2})$$

de sorte que  $\delta(N, Z)$  de vient

$$\delta(N, Z) = \frac{1}{2} \left[ E(N-1, Z) + E(N+1, Z) - E(N, Z-1) - E(N, Z+1) \right]. \quad (\text{V.3})$$

Pour un noyau  $N = Z$  pair, cette quantité permet donc de s’affranchir de la contribution de Wigner à l’énergie de liaison  $E(N, Z)$ .

Le calcul HF auto-cohérent de  $\delta$  pour le  $^{24}\text{Mg}$  et le  $^{48}\text{Cr}$  dans la publication [Bonneau11] a été effectué avec les paramétrisations SIII et SLy4 de Skyrme utilisées dans un schéma dit “minimal”, c’est-à-dire sans les termes en  $\overleftrightarrow{\mathbf{J}}^2$  (constantes de couplage  $B_{14}$  et  $B_{15}$ ), ni s. $\Delta$ s (constantes de couplage  $B_{18}$  et  $B_{19}$ ), ni ceux de la force tenseur (constantes de couplage  $B_{16}$ ,  $B_{17}$ ,  $B_{20}$  et  $B_{21}$ ) dans la densité hamiltonienne (B.4) et les champs de Hartree–Fock (B.32) à (B.37). Ce calcul a été comparé avec celui de  $\delta$  à l’approximation de Koopmans qui ne produit aucun effet de polarisation et a montré l’importance capitale de cet effet. Comme on peut le voir sur la table V.1, l’accord avec les données expérimentales s’avère même très satisfaisant. De plus, d’après [Bonneau11], l’effet des corrélations d’appariement produites

**TABLE V.1** – Différences de masse pair-impair “isovectorielles” (en MeV) pour le  $^{24}\text{Mg}$  et le  $^{48}\text{Cr}$  dans les approximations de Koopmans et HF auto-cohérent (avec les paramétrisations SIII et SLy4 de Skyrme et l’approximation de Slater). Les paramètres de base d’oscillateur sont  $N_0 = 8$ ,  $b = 0.410$  et  $q = 1.10$  pour le  $^{24}\text{Mg}$  et  $N_0 = 8$ ,  $b = 0.625$  et  $q = 1.17$  pour le  $^{48}\text{Cr}$ . Résultats extraits de [Bonneau11].

Calcul	$^{24}\text{Mg}$		$^{48}\text{Cr}$	
	SIII	SLy4	SIII	SLy4
Koopmans	0.033	0.035	-0.004	0.010
HF	-0.132	-0.136	-0.137	-0.131
Exp.	-0.110		-0.136	

par le canal  $T = 1$  de l’interaction  $\hat{V}_\delta$  dans la solution HTDA est nettement plus faible que celui de la polarisation du cœur et agit en sens opposé à ce dernier.

Avec l’incorporation très récente de tous les termes de la fonctionnelle de Skyrme B.2 négligés ci-dessus et la correction de l’erreur de programmation des éléments de matrice de

$\hat{V}_\delta$  dans le canal  $T = 0$  mentionnée page 20, un premier test de leur rôle a pu être effectué dans le  $^{48}\text{Cr}$  avec la paramétrisation de Skyrme SLyIII.0.8 (et les mêmes paramètres de calcul que ceux de la figure III.2, hormis l’approximation de Slater pour des raisons de temps de calcul). Avec une base à  $N$  corps contenant toutes les excitations de simples et doubles paires

**TABLE V.2** – Différences de masse pair-impair “isovectorielles” (en MeV) pour le  $^{48}\text{Cr}$  dans l’approche HTDA avec l’approximation de Slater. Les paramètres de calcul de la solution de champ moyen (contribution de  $|\Phi_0\rangle$  abrégée ch. moy.) sont ceux de la figure III.2, et l’intensité de  $\hat{V}_\delta$  dans le canal  $T = 1$  est  $V_0^{(T=1)} = -300 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^3$ . Le paramètre  $x$  est le rapport des intensités  $V_0^{(T=0)}/V_0^{(T=1)}$ . Les termes “min.” et “full” correspondent aux schémas “minimal” et complet de la fonctionnelle énergie, respectivement (voir texte page 38).

Paramétrisation	ch. moy.	corr.		tot.		exp.
		$x = 0$	$x = 1$	$x = 0$	$x = 1$	
SIII (min.)	-0.129	0.040	0.043	-0.088	-0.086	-0.136
SLyIII.0.8 (full)	-0.136	0.051	0.053	-0.085	-0.083	

construites à partir des 8 niveaux de trou les plus hauts et les 8 niveaux de particule les plus bas, on obtient les résultats de la table V.2, qui confirment les conclusions ci-dessus concernant les rôles de la polarisation du cœur et des corrélations d’appariement, même dans le canal  $T = 0$  qui s’avère contribuer beaucoup moins que le canal  $T = 1$ .

Cependant, en regard de l’effet systématique de l’approximation de Slater sur les différences d’énergie de liaison considérées au chapitre II, il est nécessaire d’étudier la sensibilité de  $\delta$  au traitement des termes d’échange coulombiens.

### 1.b) Barrières et isomères de fission

On s’intéresse ici à la région des actinides pour en étudier les propriétés de fission telles que la hauteur de barrière et l’énergie d’excitation de l’isomère de fission.

Dans l’hypothèse simplificatrice où le noyau fissionnant conserve la symétrie axiale et les nombres quantiques de projection de moment angulaire  $K$  sur l’axe de fission et de parité  $\pi$  jusqu’au minimum super-déformé (correspondant à l’isomère de fission), la hauteur de la première barrière et l’énergie d’excitation de l’état super-déformé ont été calculées dans l’approche HFBCS avec bloquage auto-cohérent puis HTDA pour les noyaux composés  $^{235}\text{U}$  et  $^{239}\text{Pu}$ . La solution de champ moyen est obtenue avec différentes paramétrisations de Skyrme (SIII, SkM\* et SLyIII.0.8), et la solution HTDA est calculée avec une base à  $N$  corps contenant toutes les excitations de simples, doubles et triples paires d’énergie inférieure ou égale à  $3\hbar\omega(A)$ .

Les résultats HFBCS pour la hauteur de la première barrière sont reportés dans la table V.3, et ceux pour l’énergie d’excitation de l’isomère de fission figurent dans la table V.4.

Il est important de noter que ces hauteurs bien supérieures (de 4 à 5 MeV) à celles déduites des données expérimentales de section efficace de fission (voir par exemple l’article de revue [Bjornholm80]) ne tiennent pas compte de plusieurs corrections systématiques, par ordre décroissant d’importance : triaxialité, rotationnelle, centre de masse à deux corps, de Coulomb échange (voir chapitre II). En outre, un effet non physique de quelques centaines de keV est également présent à cause de la taille de base d’oscillateur utilisée ici (correspon-

**TABLE V.3** – Hauteurs de la première barrière de fission (en MeV) des noyaux  $^{235}\text{U}$  et  $^{239}\text{Pu}$  pour différentes valeurs de  $K^\pi$  (celle de l'état fondamental apparaît en gras sur la première ligne) dans les approches HFBCS et HTDA.

Nucleus	$K^\pi$	SIII		SkM*		SLyIII.0.8	
		HFBCS	HTDA	HFBCS	HTDA	HFBCS	HTDA
$^{235}\text{U}$	<b>7/2<sup>-</sup></b>	8.15	8.40	9.03	10.16	9.07	9.88
	1/2 <sup>+</sup>	8.71	8.73	8.79	9.93	9.74	10.22
	3/2 <sup>+</sup>	8.01	8.01	-	-	9.51	10.08
	5/2 <sup>+</sup>	6.70	6.86	8.42	9.63	8.53	9.76
	7/2 <sup>+</sup>	6.79	6.98	6.96	8.36	8.72	9.94
$^{239}\text{Pu}$	<b>1/2<sup>+</sup></b>	10.48	11.12	9.48	10.71	10.84	11.46
	7/2 <sup>-</sup>	9.76	9.93	9.88	11.26	10.47	11.06
	7/2 <sup>+</sup>	9.74	9.74	-	-	10.46	11.68
	5/2 <sup>+</sup>	9.56	9.52	9.54	11.05	10.20	11.35

**TABLE V.4** – Energies isomériques  $E_{II}$  (en MeV) calculées avec trois paramétrisations de Skyrme pour les noyaux  $^{235}\text{U}$  et  $^{239}\text{Pu}$ . Les nombres quantiques  $K^\pi$  de l'état fondamental calculé dans le puits super-déformé sont donnés entre parenthèses. La valeur expérimentale est prise de la référence [Browne03].

Noyau	Exp.	SIII	SkM*	SLyIII.0.8
$^{235}\text{U}$	-	5.74 (3/2 <sup>+</sup> )	3.52 (3/2 <sup>-</sup> )	7.04 (3/2 <sup>+</sup> )
$^{239}\text{Pu}$	3.1 (5/2 <sup>+</sup> )	5.03 (5/2 <sup>+</sup> )	2.96 (5/2 <sup>+</sup> )	6.51 (5/2 <sup>+</sup> )

dant à  $N_0 = 12$  pour des raisons de temps de calcul). On note toutefois le bon accord avec l'expérience de la valeur de  $E_{II}$  calculée avec SkM\*.

Le rôle du traitement des corrélations d'appariement est visible sur la table V.3 : dans l'approche HTDA, conservant le nombre de particules, les hauteurs de barrière sont systématiquement supérieures à celles obtenues dans l'approximation HFBCS. En effet, la densité de niveaux autour de l'énergie de Fermi au sommet d'une barrière, qui est un point selle dans la surface d'énergie potentielle de déformation, étant très supérieure à celle obtenue à un minimum local, l'énergie de corrélations d'appariement (négative) est en valeur absolue plus grande au point selle qu'au minimum, aussi bien dans l'approche HTDA que BCS. Mais cette dernière sous-estime, par rapport à HTDA, l'effet de l'appariement au minimum car la densité de niveaux y est plutôt faible. Cette étude comparative met ainsi en évidence l'effet systématique de la brisure non physique de symétrie du nombre de particules sur les variations d'énergie de liaison en fonction de la déformation du noyau.

Enfin, le rôle des contributions à la fonctionnelle énergie (B.2) provenant des termes en  $t_1$  et  $t_2$  non retenues dans la paramétrisation SIII a été étudié dans le noyau  $^{239}\text{Pu}$  à  $K^\pi$  fixé. Comme le montre la table V.5, ces contributions diminuent significativement la hauteur de

la première barrière de 0.5 à 1 MeV suivant les valeurs de  $K$  et  $\pi$  considérées.

**TABLE V.5** – Hauteurs de la première barrière de fission du  $^{239}\text{Pu}$  (en MeV) à l'approximation HFBCS avec la paramétrisation SIII dans le schéma minimal et complet.

schéma	1/2 <sup>+</sup>	7/2 <sup>-</sup>	7/2 <sup>+</sup>	5/2 <sup>+</sup>
min.	10.48	9.76	9.74	9.56
full	9.53	9.04	9.20	8.52

## 2) Moments dipolaires magnétiques

Parmi les observables sensibles à la polarisation vectorielle du cœur, le moment dipolaire magnétique permet de sonder les effets dûs au champ de spin.

La déviation par rapport aux valeurs de Schmidt des moments magnétiques (de l'état fondamental) à l'approximation de particules indépendantes provient de trois effets : (i) la polarisation du cœur de type M1 (voir par exemple [Bochnacki65]), (ii) l'interaction spin-orbite à deux corps, et (iii) les courants d'échange de mésoniques (pour ces deux derniers effets, voir par exemple [Chemtob69]). Dans l'étude du premier effet à l'approximation de Hartree-Fock avec l'interaction de Skyrme, Lipparini et collaborateurs ont montré la nécessité de remplacer le terme original à trois corps de contact de SIII [Beiner75] par un terme dépendant de la densité afin de pouvoir reproduire les moments magnétiques des noyaux impairs à couches fermés plus ou moins un nucléons [Lipparini77].

De même, dans les noyaux impairs déformés traités par le modèle unifié de Bohr et Mottelson avec des états intrinsèques issus du modèle en couches déformé de Nilsson, la valeur théorique du moment dipolaire magnétique dans l'état fondamental dévie systématiquement de la valeur expérimentale. Cette déviation est interprétée comme un effet de polarisation de spin du cœur mesuré par un facteur d'atténuation  $\eta$  du rapport gyromagnétique de spin  $g_s$ . L'analyse de Bohr et Mottelson menée dans la région des terres rares indique un effet de 30 % environ, conduisant à un facteur gyromagnétique effectif de spin  $g_s^{(\text{eff})} \approx 0.7g_s$  [Bohr69].

Dans les publications [Quentin10, Bonneau11, Bonneau12], des calculs auto-cohérents de moment magnétique intrinsèque à l'approximation HF (voir table V.6) avec blocage auto-cohérent ont montré que l'on obtient un facteur d'atténuation d'environ 22 % avec les paramétrisations de Skyrme SIII, SkM\* et SLy4 (utilisées dans leur cadre d'ajustement, c'est-à-dire dans le schéma minimal discuté dans la section précédente).

De plus, comme le montre la table V.7, les corrélations d'appariement  $nn$  et  $pp$  ne jouent pratiquement aucun rôle, tandis que les corrélations  $np$  induites par le canal  $T = 1$  de  $\hat{V}_\delta$  dans l'approche HTDA contribuent de façon notable à augmenter le facteur d'atténuation de  $g_s$ .

Cependant, avec l'incorporation très récente de tous les termes de la fonctionnelle de Skyrme B.2, y compris les termes dûs à la partie tenseur, des calculs préliminaires dans le  $^{49}\text{Cr}$  indiquent que :

- (i) l'effet de polarisation est sur-estimé par la non prise en compte dans SIII, SLy4 et SkM\* des termes en  $\overleftrightarrow{J}^2$ ;
- (ii) les termes  $s.\Delta s$  apportent une contribution négligeable au facteur d'atténuation ;

**TABLE V.6** – Valeur moyenne  $\langle \hat{s}_z \rangle_{\text{odd}}$  de la projection du spin sur l’axe de symétrie pour le nucleon célibataire et facteur d’atténuation du rapport gyromagnétique de spin  $\eta = g_s^{(\text{eff})}/g_s$  pour des noyaux impairs bien déformés à l’approximation de Hartree–Fock. La valeur expérimentale de  $J^\pi$  et la valeur de  $K^\pi$  pour l’état fondamental calculé sont indiquées. Le calcul HF n’a pas convergé (n.c.) pour le  $^{179}\text{Ta}$  avec SkM\*. Les trois paramétrisations considérées sont utilisées dans le schéma “minimal”. (Table extraite de [Quentin10])

Noyau	$(J^\pi)_{\text{exp}}$	$(K^\pi)_{\text{th}}$			$\langle \hat{s}_z \rangle_{\text{odd}}$			$g_s^{(\text{eff})}/g_s$		
		SIII	SkM*	SLy4	SIII	SkM*	SLy4	SIII	SkM*	SLy4
$^{49}\text{Cr}$	$\frac{5^-}{2}$	$\frac{5^-}{2}$	$\frac{5^-}{2}$	$\frac{5^-}{2}$	0.429	0.427	0.431	0.742	0.785	0.766
$^{49}\text{Mn}$	$\frac{5^-}{2}$	$\frac{5^-}{2}$	$\frac{5^-}{2}$	$\frac{5^-}{2}$	0.429	0.428	0.431	0.843	0.839	0.811
$^{99}\text{Sr}$	$\frac{3^+}{2}$	$\frac{5^-}{2}$	$\frac{3^+}{2}$	$\frac{3^+}{2}$	0.386	0.013	0.235	0.712	–	0.752
$^{99}\text{Y}$	$\frac{5^+}{2}$	$\frac{5^+}{2}$	$\frac{5^+}{2}$	$\frac{5^+}{2}$	0.432	0.420	0.428	0.840	0.839	0.834
$^{103}\text{Mo}$	$\frac{3^+}{2}$	$\frac{3^+}{2}$	$\frac{3^+}{2}$	$\frac{3^+}{2}$	0.355	0.023	0.248	0.763	–	0.743
$^{103}\text{Tc}$	$\frac{5^+}{2}$	$\frac{3^-}{2}$	$\frac{5^-}{2}$	$\frac{5^-}{2}$	0.486	–0.461	–0.464	0.803	0.784	0.841
$^{175}\text{Yb}$	$\frac{7^-}{2}$	$\frac{7^-}{2}$	$\frac{9^+}{2}$	$\frac{7^-}{2}$	–0.421	0.443	–0.409	0.693	0.729	0.765
$^{175}\text{Lu}$	$\frac{7^+}{2}$	$\frac{7^+}{2}$	$\frac{9^-}{2}$	$\frac{1^-}{2}$	–0.479	0.481	0.064	0.794	0.833	–
$^{179}\text{Hf}$	$\frac{9^+}{2}$	$\frac{9^+}{2}$	$\frac{7^-}{2}$	$\frac{9^+}{2}$	0.437	–0.362	0.439	0.700	0.684	0.704
$^{179}\text{Ta}$	$\frac{7^+}{2}$	$\frac{9^-}{2}$	$\frac{5^+}{2}$	$\frac{5^+}{2}$	0.479	n.c.	0.493	0.821	n.c.	0.828
$^{235}\text{U}$	$\frac{7^-}{2}$	$\frac{7^-}{2}$	$\frac{1^+}{2}$	$\frac{1^+}{2}$	0.364	–0.149	–0.257	0.717	0.622	0.755
$^{235}\text{Np}$	$\frac{5^+}{2}$	$\frac{5^-}{2}$	$\frac{5^+}{2}$	$\frac{5^-}{2}$	–0.386	0.357	–0.377	0.823	0.802	0.819

(iii) le facteur d’atténuation  $\eta$  est très peu sensible au terme en  $t_e$  de l’interaction tenseur (couplant les ondes partielles  $^3S_1$  et  $^3D_1$  paires en  $L$ , voir sous-section 5.b) de l’annexe A) lorsque la valeur de ce paramètre varie entre  $-100$  et  $100 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^5$ , alors que pour des variations de  $t_o$  (correspondant aux ondes partielles  $^3P_J$  impaires en  $L$ ) sur le même intervalle,  $\eta$  décroît de quelques pourcents avec  $t_o$  (entre  $-100$  et  $75$  pour des raisons de stabilité).

La table V.8 présente les valeurs du facteur d’atténuation dans la solution HFBCS obtenue avec la paramétrisation SLyIII.0.8 (mêmes paramètre de base d’oscillateur de BCS que pour la figure III.2), puis HTDA avec  $V_0^{(T=1)} = -300 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^3$  et  $x = V_0^{(T=0)}/V_0^{(T=1)}$  compris entre 0 et 1.5 pour le  $^{49}\text{Cr}$  et le  $^{179}\text{Hf}$ . Pour le premier noyau, la base à  $N$  corps comprend toutes les excitations SP et DP construites à partir des 8 niveaux de trous et des 8 niveaux de particules les plus proches de l’énergie de Fermi du  $^{48}\text{Cr}$ , tandis que pour le  $^{179}\text{Hf}$ , elle contient toutes les excitations SP, DP et TP d’énergie inférieure ou égale à  $3\hbar\omega(A)$  (voir le chapitre III pour les paramètres de base d’oscillateur et de BCS). Ces résultats montrent que les corrélations d’appariement  $np$  (de type  $\alpha\bar{\alpha}$  seulement) issues du canal ( $S = 1, T = 0$ ) de l’interaction résiduelle jouent un rôle nettement plus faible que celles du canal ( $S = 0, T = 1$ ) et en sens opposé.

Notons pour finir que la comparaison des moments magnétiques calculés aux données expérimentales requiert la prise en compte, dans le cadre du modèle unifié de Bohr et Motelson, de la contribution collective  $\mu_{\text{coll}}$  proportionnelle au rapport gyromagnétique collectif



**TABLE V.7** – Facteur d’atténuation de  $g_s$  calculé dans l’approche HTDA et structure de la solution fondamentale correspondante (table extraite de [Bonneau12]).

Noyau	$K^\pi$	$\langle \hat{s}_z \rangle_{\text{odd}}$	$g_s^{(\text{eff})}/g_s$		Canal de $\hat{V}_\delta$	Poids [%]			DP
			HF	HTDA		SP			
						$qq$	$\bar{q}\bar{q}$	$np$	
$^{49}\text{Cr}$	$5/2^-$	0.426	0.77	0.56	$T = 1$	3.2	11.0	8.2	1.3
				0.77	$T_z = \pm 1$	3.9	15.3	0.0	1.0
$^{177}\text{Lu}$	$7/2^+$	-0.480	0.78	0.78		3.8	31.6	0.0	3.6
$^{177}\text{Hf}$	$7/2^-$	-0.415	0.71	0.71		13.4	11.6	0.1	2.2
$^{179}\text{Hf}$	$9/2^+$	0.438	0.73	0.73	$T = 1$	7.1	13.1	0.0	1.4
$^{179}\text{Ta}$	$9/2^-$	0.478	0.82	0.82		5.0	25.4	0.1	3.0
$^{235}\text{U}$	$7/2^-$	0.364	0.72	0.72		7.3	24.9	0.0	3.7

**TABLE V.8** – Facteur d’atténuation de  $g_s$  calculé dans les approches HFBCS (pour le déterminant de Slater  $|\Phi_0\rangle$  de référence, abrégé ch. moy.) et HTDA. La solution de champ moyen est obtenue avec la paramétrisation SLyIII.0.8 (en retenant tous les termes dans l’énergie et les champs) et l’intensité de  $\hat{V}_\delta$  dans le canal  $T = 1$  est  $V_0^{(T=1)} = -300 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^3$ . Le paramètre  $x$  est le rapport des intensités  $V_0^{(T=0)}/V_0^{(T=1)}$ .

Noyau ( $K^\pi$ )	ch. moy.	HTDA			
		$x = 0$	$x = 0.5$	$x = 1$	$x = 1.5$
$^{49}\text{Cr} (5/2^-)$	0.873	0.667	0.690	0.711	0.716
$^{179}\text{Hf} (9/2^+)$	0.865	0.865	–	–	–

$g_R$  du cœur :

$$\mu = \underbrace{\frac{K}{K+1} \langle \Psi | \hat{\mu}_z | \Psi \rangle}_{\mu_{\text{intr}}} + \underbrace{\frac{K}{K+1} g_R}_{\mu_{\text{coll}}} \quad (\text{V.4})$$

où  $|\Psi\rangle$  désigne l’état intrinsèque du noyau et  $\hat{\mu}_z = g_\ell \hat{\ell}_z + g_s \hat{s}_z$ . De l’ordre de  $Z/A$ , le rapport gyromagnétique  $g_R$  peut subir des fluctuations autour de cette valeur. On peut estimer ces dernières à l’approximation d’Inglis–Belyaev comme cela a été fait par exemple dans la référence [Sprung79]. En utilisant la paramétrisation SIII (qui omet les termes en  $\hat{J}^2$ ), on obtient par exemple  $g_R = 0.38$  pour le  $^{178}\text{Hf}$  conduisant à un très bon accord avec les données expérimentales pour le  $^{179}\text{Hf}$  [Bonneau12]. A la lumière de la discussion du paragraphe précédent, il conviendra toutefois de tester l’impact des termes omis dans la fonctionnelle énergie.



# Conclusion et perspectives

Dans le cadre de l'approche de champ moyen auto-cohérent et au-delà par mélange de configurations particules-trous, les études à basse énergie d'excitation de noyaux déformés menées dans diverses régions de masse permettent de comprendre les mécanismes à l'œuvre dans certaines observables en révélant le lien entre l'interaction nucléon-nucléon, les corrélations qu'elle produit et ses symétries.

Ces études reposent sur une interaction résiduelle de contact dans les canaux  $^1S_0$  ( $S = 0$ ,  $T = 1$ ) et  $^3P_1$  ( $S = 1$ ,  $T = 0$ ), sous forme de produit normal associé à une solution de champ moyen. Quelle que soit la région de masse considérée et le caractère pair ou impair du nombre de nucléons, l'état fondamental corrélé est constitué essentiellement d'excitations de paires de nucléons par rapport à la solution de champ moyen  $|\Phi_0\rangle$ . De plus la convergence en ordre d'excitation est rapide puisque les simples et doubles paires suffisent. Par conséquent l'approche HTDA est tout à fait pertinente pour la description des corrélations d'appariement et l'étude de leurs effets sur les propriétés de basse énergie des noyaux rigide-ment déformés.

Bien qu'approchée, la symétrie d'isospin s'avère très féconde dans l'analyse de la structure des états nucléaires appariés. En effet, de l'étude du cas particulier  $N = Z$  pair menée dans le chapitre IV on tire deux conclusions de portée générale :

- (i) la base à  $N$  corps limitée aux excitations de paires est structurée en groupes d'états appariés d'ordre fixé et construits à partir d'un jeu donné de niveaux de trous et de particules par rapport à  $|\Phi_0\rangle$  ;
- (ii) ces états sont avec une très bonne approximation états propres de  $\hat{T}^2$  associés à des valeurs propres de la forme  $T(T + 1) + \varepsilon$  avec  $|\varepsilon| \ll 1$  ; par conséquent les groupes d'états associés à des jeux différents de niveaux individuels sont découplés vis-à-vis de l'opérateur  $\hat{T}^2$  avec une très bonne approximation.

Cette structuration de l'espace des états à  $N$  corps appariés permet d'interpréter aisément la nature des corrélations induites par l'interaction résiduelle dans l'état fondamental : le canal ( $S = 0$ ,  $T = 1$ ) de l'interaction engendre toutes les excitations de simples paires ( $nn$ ,  $pp$  et  $np$ ) combinées en pseudo-états propres de  $\hat{T}^2$  associés à  $T = T_0$  (où  $T_0 = |N - Z|/2$ ), tandis que le canal ( $S = 1$ ,  $T = 0$ ) génère les excitations de simples paires  $np$  combinées en pseudo-états propres de  $\hat{T}^2$  associés à  $T = T_0$ . La notion de groupes et l'approximation de découplage vis-à-vis de  $\hat{T}^2$ , valable a priori également dans les noyaux  $N = Z$  impair et  $N \neq Z$ , permettent la construction d'une base à  $N$  corps pertinente aussi bien pour l'étude de l'état fondamental que des états excités, en particulier les états isobariques analogues. En outre elles constituent le cadre naturel d'étude de la brisure de symétrie d'isospin. Dans les noyaux  $N = Z$  pair (déformés) on a ainsi pu identifier le mécanisme par lequel les corrélations d'appariement ajoutent une contribution au mélange d'isospin au-delà du champ moyen : le canal ( $S = 0$ ,  $T = 1$ ) introduit de l'impureté d'isospin par le biais essentiellement des pseudo-états propres  $T = 1$  (différences d'une excitation de simple paire  $nn$  et d'une excitation de simple

paire  $pp$ ), tandis que le canal ( $S = 1, T = 0$ ) joue un rôle négligeable. Quant à l'interaction résiduelle coulombienne, elle n'augmente le mélange d'isospin que faiblement. En revanche elle joue un rôle plus important dans la correction de brisure d'isospin à l'élément de matrice de transition  $\beta$  de Fermi super-permise de type  $0^+ \rightarrow 0^+$ . Enfin, comme  $\hat{T}^2$  préserve l'ordre d'excitation dans la limite de symétrie exacte d'isospin et que la brisure de symétrie d'isospin est faible dans les noyaux, on peut s'attendre à ce que la notion de groupes découplés vis-à-vis de  $\hat{T}^2$  puisse être étendue aux états non appariés, ce qui permettrait d'étudier, également dans le cadre de l'approche HTDA, d'autres corrélations que celles dues à l'appariement.

Par ailleurs les travaux effectués sur les noyaux impairs dans l'approximation de champ moyen HFBCS avec blocage auto-cohérent ont montré l'importance de la polarisation du cœur sur certaines observables comme les différences de masse pair-impair isovectorielles (pour s'affranchir de l'énergie de Wigner) et le moment dipolaire magnétique. Par contre l'approximation de remplissage égal (préservant la symétrie de renversement du temps) se révèle plutôt bonne pour le calcul de l'énergie de liaison. D'après les calculs effectués dans l'approche HTDA avec l'interaction résiduelle  $\delta$ , les corrélations d'appariement n'affectent que faiblement les différences de masse pair-impair isovectorielles, tandis que le moment magnétique révèle une forte sensibilité à l'appariement  $np$  et une très faible sensibilité à l'appariement  $nn$  et  $pp$ . Comme ces études ont été menées dans l'approximation de Slater, il reste toutefois à étudier le rôle du traitement des termes d'échange coulombiens (dans le champ moyen et l'interaction résiduelle).

Enfin des travaux sur les effets systématiques de termes approchés ou omis dans la fonctionnelle énergie de Skyrme ont permis de tirer trois conclusions :

- (i) les termes d'échange coulombiens traités à l'approximation de Slater conduisent à une sous-estimation des effets d'anti-pairing, du mélange d'isospin et de la hauteur des barrières de fission ;
- (ii) les termes en  $\overleftrightarrow{J}^2$  (tenseur spin-courant au carré) limitent l'effet de polarisation du cœur dû principalement aux termes en  $s^2$  (densité de spin au carré) et diminuent les barrières de fission ;
- (iii) les termes tenseur de l'interaction de Skyrme ont un effet plutôt faible sur l'atténuation du rapport gyromagnétique de spin causée par la polarisation du cœur : cette atténuation est légèrement sensible au terme en  $t_o$  (canaux  ${}^3P_J$ ) et insensible au terme  $t_e$  (canal  ${}^3S_1 - {}^3D_1$ ).

Dans un avenir à moyen et long terme, afin de rendre ce type d'études plus prédictif, il apparaît nécessaire de porter un effort accru sur le lien entre les différentes parties de l'interaction nucléaire et les observables considérées. Au premier rang de ces perspectives se trouve la cohérence interne du modèle : l'usage dans une approche de type HTDA d'interactions de formes différentes dans le champ moyen et l'interaction résiduelle introduit un biais qu'il convient de supprimer. Pour ce faire il est prévu de mettre en œuvre une interaction nucléon-nucléon réaliste à cœur mou de type  $V_{\text{low } k}$  complétée par une interaction à trois corps phénoménologique (de contact par exemple). Comme ce type d'interaction est représenté commodément dans l'espace des impulsions, il semble approprié de travailler directement dans cette représentation pour résoudre les équations de Hartree-Fock-BCS. Enfin, il conviendra de restaurer les symétries brisées par la solution de champ moyen (surtout celle de rotation) soit par des mélanges de configuration de type mpmh, soit par projection après variation. Pour les noyaux simplement ou doublement impairs, ainsi que les isomères  $K$  de noyaux pair-pairs, restaurer la symétrie de rotation permettra de restaurer également la symétrie de renversement du temps.

# Annexe A

## Interaction nucléon-nucléon

On rappelle ici les propriétés générales de l'interaction nucléon-nucléon ( $NN$ ) en explicitant les notations utilisées pour ses représentations (position et impulsion). En outre on présentera la forme générale de la décomposition en onde partielle de l'interaction  $NN$ , que l'on appliquera à la partie centrale de l'interaction de Skyrme.

### 1) Classification des interactions $NN$ dans l'espace d'isospin

L'opérateur  $\hat{v}$  à deux corps le plus général agissant dans  $\mathcal{E}_s \otimes \mathcal{E}_s \otimes \mathcal{E}_t \otimes \mathcal{E}_t$ , où  $\mathcal{E}_s$  et  $\mathcal{E}_t$  sont les espaces de spin et d'isospin à un corps, peut s'écrire

$$\begin{aligned} \hat{v} = & \hat{a}_0 \otimes \mathbb{1}_t + \hat{b}_0 \otimes \hat{\boldsymbol{\tau}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{\tau}}_2 + \sum_{\alpha} \left[ \hat{a}_{1\alpha} \otimes (\hat{\boldsymbol{\tau}}_1 + \hat{\boldsymbol{\tau}}_2)_{\alpha} + \hat{b}_{1\alpha} \otimes (\hat{\boldsymbol{\tau}}_1 - \hat{\boldsymbol{\tau}}_2)_{\alpha} + \hat{c}_{1\alpha} \otimes (\hat{\boldsymbol{\tau}}_1 \times \hat{\boldsymbol{\tau}}_2)_{\alpha} \right] \\ & + \sum_{\mu=-2}^2 \hat{d}_{2\mu} \otimes \{\hat{\boldsymbol{\tau}} \otimes \hat{\boldsymbol{\tau}}\}_{2\mu}, \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

où  $\hat{a}_0$ ,  $\hat{a}_{1\alpha}$ ,  $\hat{b}_{1\alpha}$ ,  $\hat{c}_{1\alpha}$  et  $\hat{d}_{2\mu}$  sont des opérateurs de spin agissant dans  $\mathcal{E}_s \otimes \mathcal{E}_s$  et  $\mathbb{1}_t$  désigne l'opérateur identité dans  $\mathcal{E}_t \otimes \mathcal{E}_t$ . Notons  $\hat{\mathbf{T}}$  l'opérateur d'isospin total

$$\hat{\mathbf{T}} = \frac{1}{2}(\hat{\boldsymbol{\tau}}_1 + \hat{\boldsymbol{\tau}}_2), \quad (\text{A.2})$$

$\hat{Q} = e \left( \frac{1}{2} - \hat{T}_z \right)$  l'opérateur de charge électrique ( $e$  étant la charge élémentaire), et  $\hat{P}_{cs}$  l'opérateur de symétrie de charge

$$\hat{P}_{cs} = e^{i\pi \hat{T}_y}. \quad (\text{A.3})$$

Puisque l'interaction forte conserve la charge électrique et le nombre de nucléons, l'opérateur  $\hat{v}$  doit commuter avec  $\hat{T}_z$  (de valeurs propres  $(N - Z)/2$ ). Cela restreint les formes possibles de  $\hat{v}$  à

$$\hat{v} = \underbrace{\hat{a} \otimes \mathbb{1}_t + \hat{b} \otimes (\hat{\boldsymbol{\tau}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{\tau}}_2)}_{\text{class I}} + \underbrace{\hat{c} \otimes \{\hat{\boldsymbol{\tau}} \otimes \hat{\boldsymbol{\tau}}\}_{20}}_{\text{class II}} + \underbrace{\hat{d} \otimes (\hat{\tau}_{1,0} + \hat{\tau}_{2,0})}_{\text{class III}} + \underbrace{\hat{e} \otimes (\hat{\tau}_{1,0} - \hat{\tau}_{2,0}) + \hat{f} \otimes (\hat{\boldsymbol{\tau}}_1 \times \hat{\boldsymbol{\tau}}_2)_0}_{\text{class IV}} \quad (\text{A.4})$$

d'après la classification de Henley et Miller [Henley79], avec :

- class I :  $[\hat{v}_I, \hat{\mathbf{T}}] = 0$ , invariante d'isospin ;

- class II :  $[\hat{v}_{II}, \hat{\mathbf{T}}] \neq 0$ ,  $[\hat{v}_{II}, \hat{P}_{cs}] = 0$ ,  $[\hat{v}_{II}, \hat{\mathbf{T}}^2] = 0$ , brisant l'indépendance de charge (CIB) mais pas la symétrie de charge ;
- class III :  $[\hat{v}_{III}, \hat{\mathbf{T}}] \neq 0$ ,  $[\hat{v}_{III}, \hat{P}_{cs}] \neq 0$ ,  $[\hat{v}_{III}, \hat{\mathbf{T}}^2] = 0$ , brisant l'indépendance de charge et la symétrie de charge (CIB et CSB) mais sans mélange d'isospin (c'est le cas de l'interaction de Coulomb) ;
- class IV :  $[\hat{v}_{IV}, \hat{\mathbf{T}}] \neq 0$ ,  $[\hat{v}_{IV}, \hat{P}_{cs}] \neq 0$ ,  $[\hat{v}_{IV}, \hat{\mathbf{T}}^2] \neq 0$ , brisant l'indépendance de charge et la symétrie de charge avec mélange d'isospin.

## 2) Symétries de l'interaction $NN$

L'interaction entre deux nucléons dans le vide (dite nue) est invariante dans les transformations suivantes :

1. translation dans le temps (conservation de l'énergie totale) : l'opérateur  $\hat{v}$  est hermitique ;
2. translation dans l'espace (conservation de l'impulsion totale)
3. changement de référentiel galiléen ;
4. rotation du référentiel (conservation du moment angulaire total) : l'opérateur  $\hat{v}$  se comporte comme un scalaire du point de vue des rotations (cette transformation n'affecte pas la partie d'isospin de  $\hat{v}$ ) ;
5. réflexions du référentiel (conservation de la parité) :

$$\begin{cases} \mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r} \\ \mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k} \\ \hat{\boldsymbol{\sigma}} \rightarrow \hat{\boldsymbol{\sigma}} \\ \hat{\boldsymbol{\tau}} \rightarrow \hat{\boldsymbol{\tau}} . \end{cases}$$

où  $\mathbf{k}$  est le vecteur d'onde assimilé au vecteur impulsion dans une unité où  $\hbar = 1$ . La partie d'isospin de l'interaction  $NN$  (quelle que soit sa classe) est donc invariante par réflexion d'espace ;

6. renversement du temps :

$$\begin{cases} \mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r} \\ \mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k} \\ \hat{\boldsymbol{\sigma}} \rightarrow -\hat{\boldsymbol{\sigma}} \\ \hat{\tau}_\mu \rightarrow \hat{\tau}_\mu , \end{cases}$$

où  $\{\hat{\tau}_\mu, \mu = 0, \pm 1\}$  sont les composantes sphériques [Varshalovich88] de l'opérateur d'isospin  $\hat{\boldsymbol{\tau}}$ . Avec la définition habituelle des matrices de Pauli  $\hat{\tau}_x$ ,  $\hat{\tau}_y$  et  $\hat{\tau}_z$ , on a donc la loi de transformation suivante [Eisenberg72]

$$\hat{\tau}_x \rightarrow \hat{\tau}_x , \hat{\tau}_y \rightarrow -\hat{\tau}_y , \hat{\tau}_z \rightarrow \hat{\tau}_z .$$

Par conséquent les interactions  $NN$  de classe I, II et III sont invariantes par renversement du temps tandis que celles de classe IV sont impaires sous cette transformation ;

7. permutation des deux nucléons : les indices 1 et 2 de quantités similaires sont échangées, de sorte que la partie d'isospin des interactions de classe I, II et III sont invariantes par permutation, alors que celles de classe IV sont impaires par permutation.

### 3) Dépendence en impulsion et non localité

L'action d'un opérateur à deux corps  $\hat{v}$  sur un état à deux particules sans spin ni isospin peut s'écrire dans les représentations position et impulsion comme

$$\langle \mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 | \hat{v} | ab \rangle = \int d^3 \mathbf{r}'_1 \int d^3 \mathbf{r}'_2 \langle \mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 | \hat{v} | \mathbf{r}'_1 \mathbf{r}'_2 \rangle \psi_a(\mathbf{r}'_1) \psi_b(\mathbf{r}'_2) \quad (\text{A.5})$$

$$\langle \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 | \hat{v} | ab \rangle = \int d^3 \mathbf{k}'_1 \int d^3 \mathbf{k}'_2 \langle \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 | \hat{v} | \mathbf{k}'_1 \mathbf{k}'_2 \rangle \tilde{\psi}_a(\mathbf{k}'_1) \tilde{\psi}_b(\mathbf{k}'_2), \quad (\text{A.6})$$

où  $\psi_a(\mathbf{r})$  et  $\tilde{\psi}_a(\mathbf{k})$  sont les fonctions d'onde de l'état  $|a\rangle$  dans les représentations position et impulsion, respectivement. En effectuant le changement de variables

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, \quad \mathbf{R} = \frac{1}{2}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2), \quad \mathbf{k} = \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2, \quad \mathbf{K} = \frac{1}{2}(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2), \quad (\text{A.7})$$

on peut exprimer la représentation position de l'action de  $\hat{v}$  sous la forme

$$\langle \mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 | \hat{v} | ab \rangle = \int d^3 \mathbf{r}' \int d^3 \mathbf{R}' v(\mathbf{r}, \mathbf{R}, \mathbf{r}', \mathbf{R}') \psi_a\left(\mathbf{R}' + \frac{\mathbf{r}'}{2}\right) \psi_b\left(\mathbf{R}' - \frac{\mathbf{r}'}{2}\right) \quad (\text{A.8})$$

$$\langle \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 | \hat{v} | ab \rangle = \int d^3 \mathbf{k}' \int d^3 \mathbf{K}' \tilde{v}(\mathbf{k}, \mathbf{K}, \mathbf{k}', \mathbf{K}') \tilde{\psi}_a\left(\mathbf{K}' + \frac{\mathbf{k}'}{2}\right) \tilde{\psi}_b\left(\mathbf{K}' - \frac{\mathbf{k}'}{2}\right), \quad (\text{A.9})$$

avec  $v(\mathbf{r}, \mathbf{R}, \mathbf{r}', \mathbf{R}') = \langle \mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 | \hat{v} | \mathbf{r}'_1 \mathbf{r}'_2 \rangle$  et  $\tilde{v}(\mathbf{k}, \mathbf{K}, \mathbf{k}', \mathbf{K}') = \langle \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 | \hat{v} | \mathbf{k}'_1 \mathbf{k}'_2 \rangle$ .

L'interaction  $\hat{v}$  est invariante par translation si  $v(\mathbf{r}, \mathbf{R}, \mathbf{r}', \mathbf{R}')$  dépend de  $\mathbf{R}$  et  $\mathbf{R}'$  seulement par leur différence

$$\langle \mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 | \hat{v} | \mathbf{r}'_1 \mathbf{r}'_2 \rangle = v(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \mathbf{R} - \mathbf{R}'). \quad (\text{A.10})$$

Une telle interaction commute avec l'opérateur  $\hat{\mathbf{P}}$  d'impulsion totale, qui est donc une quantité conservée

$$\langle \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 | \hat{v} | \mathbf{k}'_1 \mathbf{k}'_2 \rangle = \delta(\mathbf{K} - \mathbf{K}') \tilde{v}(\mathbf{k}, \mathbf{K}, \mathbf{k}'). \quad (\text{A.11})$$

En outre  $\hat{v}$  est invariante par changement de référentiel galiléen si ses éléments de matrice en représentation impulsion sont de la forme

$$\langle \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 | \hat{v} | \mathbf{k}'_1 \mathbf{k}'_2 \rangle = \tilde{v}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{K} - \mathbf{K}'). \quad (\text{A.12})$$

En combinant ces deux symétries, on obtient

$$\langle \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 | \hat{v} | \mathbf{k}'_1 \mathbf{k}'_2 \rangle = \delta(\mathbf{K} - \mathbf{K}') \tilde{v}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'), \quad (\text{A.13})$$

ce qui permet d'écrire  $\hat{v}$  en représentation "mixte" position-impulsion comme une fonction  $f$  de  $\mathbf{r}$  et  $\mathbf{k}$

$$\frac{\langle \mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 | \hat{v} | \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \rangle}{\langle \mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 | \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \rangle} = \int d^3 \mathbf{k}' e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}} \tilde{v}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = f(\mathbf{r}, \mathbf{k}). \quad (\text{A.14})$$

On peut alors distinguer deux types d'interactions :

- les interactions locales dans l'espace des positions : elles correspondent au cas particulier où

$$\langle \mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 | \hat{v} | \mathbf{r}'_1 \mathbf{r}'_2 \rangle = \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1) \delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}'_2) v(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(\mathbf{R} - \mathbf{R}') v(\mathbf{r}), \quad (\text{A.15})$$

donc  $\tilde{v}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$  est une fonction de la différence de ses arguments seulement

$$\tilde{v}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \tilde{v}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') . \quad (\text{A.16})$$

Dans ce cas, l'élément de matrice de  $\hat{v}$  en représentation mixte position-impulsion ne dépend pas de  $\mathbf{k}$  et vaut :

$$\frac{\langle \mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 | \hat{v} | \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \rangle}{\langle \mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 | \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \rangle} = v(\mathbf{r}) ; \quad (\text{A.17})$$

- les interactions non locales dans l'espace des positions : c'est le cas général dans lequel l'élément de matrice (A.14) de  $\hat{v}$  a une dépendance en  $\mathbf{k}$ .

**Remarque :** Une interaction invariante par translation et par changement de référentiel galiléen a des éléments de matrice en représentation position de la forme

$$\langle \mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 | \hat{v} | \mathbf{r}'_1 \mathbf{r}'_2 \rangle = \delta(\mathbf{R} - \mathbf{R}') v(\mathbf{r}, \mathbf{r}') . \quad (\text{A.18})$$

Par ailleurs, une interaction locale (en espace) et invariante par translation est nécessairement invariante par changement de référentiel galiléen.

## 4) Forme générale de l'interaction $NN$

La partie d'isospin d'une interaction de classe I, II ou III est invariante par réflexion de l'espace, renversement du temps et permutation des deux nucléons. Compte tenu de l'invariance par rotation, la fonction  $f(\mathbf{r}, \mathbf{k})$  définie en (A.14) est soit un scalaire, soit un vecteur (pondéré éventuellement par un scalaire), soit un tenseur irréductible de rang 2 (pondéré éventuellement par un scalaire), les seuls scalaires possibles étant  $r = \|\mathbf{r}\|$ ,  $k = \|\mathbf{k}\|$  et  $L^2$  (avec  $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{k}$ ). On peut alors montrer que la forme la plus générale d'une interaction  $NN$  respectant les sept symétries de la section 2) est, d'après notamment [Okubo58]

$$\begin{aligned} \hat{v} = & \left[ V_1^{(I)} \mathbb{1}_s + V_2^{(I)} (\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_2) + V_{LS}^{(I)} \mathbf{L} \cdot \hat{\mathbf{S}} + V_T^{(I)} \hat{S}_{12} + V_{T'}^{(I)} \hat{T}_{12} + V_{LL}^{(I)} \hat{Q}_{12} \right] \otimes \left[ \alpha_1 \mathbb{1}_t + \beta_1 (\hat{\boldsymbol{\tau}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{\tau}}_2) \right] \\ & + \left[ V_1^{(II)} \mathbb{1}_s + V_2^{(II)} (\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_2) + V_{LS}^{(II)} \mathbf{L} \cdot \hat{\mathbf{S}} + V_T^{(II)} \hat{S}_{12} + V_{T'}^{(II)} \hat{T}_{12} + V_{LL}^{(II)} \hat{Q}_{12} \right] \otimes \{ \hat{\boldsymbol{\tau}} \otimes \hat{\boldsymbol{\tau}} \}_2 \\ & + \left[ V_1^{(III)} \mathbb{1}_s + V_2^{(III)} (\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_2) + V_{LS}^{(III)} \mathbf{L} \cdot \hat{\mathbf{S}} + V_T^{(III)} \hat{S}_{12} + V_{T'}^{(III)} \hat{T}_{12} + V_{LL}^{(III)} \hat{Q}_{12} \right] \otimes (\hat{\boldsymbol{\tau}}_1 + \hat{\boldsymbol{\tau}}_2)_0 \\ & + \left[ V_1^{(IV)} \mathbf{L} \cdot (\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1 - \hat{\boldsymbol{\sigma}}_2) + V_2^{(IV)} (\mathbf{r} \cdot \mathbf{k}) \mathbf{L} \cdot (\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \times \hat{\boldsymbol{\sigma}}_2) \right] \otimes (\hat{\boldsymbol{\tau}}_1 - \hat{\boldsymbol{\tau}}_2)_0 \\ & + \left[ V_3^{(IV)} (\mathbf{r} \cdot \mathbf{k}) \mathbf{L} \cdot (\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1 - \hat{\boldsymbol{\sigma}}_2) + V_4^{(IV)} \mathbf{L} \cdot (\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \times \hat{\boldsymbol{\sigma}}_2) \right] \otimes (\hat{\boldsymbol{\tau}}_1 \times \hat{\boldsymbol{\tau}}_2)_0 , \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

où les  $V$ ,  $\alpha_1$  et  $\beta_1$  sont des fonctions de  $r$ ,  $k$  et  $L^2$ , et  $\hat{S}_{12}$ ,  $\hat{T}_{12}$  et  $\hat{Q}_{12}$  des opérateurs scalaires couplant les variables d'espace et de spin

$$\hat{S}_{12} = \{ \mathbf{r} \otimes \mathbf{r} \}_2 \cdot \{ \hat{\boldsymbol{\sigma}} \otimes \hat{\boldsymbol{\sigma}} \}_2 = (\mathbf{r} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_1)(\mathbf{r} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_2) - \frac{1}{3} r^2 (\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_2) , \quad (\text{A.20})$$

$$\hat{T}_{12} = \{ \mathbf{k} \otimes \mathbf{k} \}_2 \cdot \{ \hat{\boldsymbol{\sigma}} \otimes \hat{\boldsymbol{\sigma}} \}_2 = (\mathbf{k} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_1)(\mathbf{k} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_2) - \frac{1}{3} k^2 (\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_2) , \quad (\text{A.21})$$

$$\hat{Q}_{12} = \{ \mathbf{L} \otimes \mathbf{L} \}_2 \cdot \{ \hat{\boldsymbol{\sigma}} \otimes \hat{\boldsymbol{\sigma}} \}_2 = (\mathbf{L} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_1)(\mathbf{L} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_2) - \frac{1}{3} L^2 (\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_2) . \quad (\text{A.22})$$

On en déduit que les interactions de classe I, II et III commutent avec  $\hat{\mathbf{S}}^2 = \frac{3}{2} \mathbb{1}_s + \frac{1}{2} (\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_2)$ , contrairement aux interactions de classe IV, et par conséquent conservent le spin total  $S$  des deux nucléons interagissant.



## 5) Développement en ondes partielles

### 5.a) Forme générale

Le développement en onde partielle des états de base position et impulsion appartenant à la partie spatiale  $\mathcal{E}_r$  de l'espace des états d'un nucléon est donné par

$$|\mathbf{r}\rangle = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m_{\ell}=-\ell}^{\ell} \left( Y_{\ell}^{m_{\ell}}(\hat{r}) \right)^* |r \ell m_{\ell}\rangle \quad (\text{A.23})$$

$$|\mathbf{k}\rangle = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m_{\ell}=-\ell}^{\ell} i^{\ell} \left( Y_{\ell}^{m_{\ell}}(\hat{k}) \right)^* |k \ell m_{\ell}\rangle \quad (\text{A.24})$$

avec  $\hat{r} = (\theta, \phi)$  et  $\langle r \ell m_{\ell} | k \ell' m_{\ell}' \rangle = \delta_{\ell \ell'} \delta_{m_{\ell} m_{\ell}'} \sqrt{\frac{2}{\pi}} j_{\ell}(kr)$  où  $j_{\ell}$  est la fonction de Bessel sphérique d'ordre  $\ell$ . En ajoutant les degrés de liberté de spin au ket impulsion, on peut écrire, avec la notation  $C_{\ell m_{\ell} s m_s}^{jm}$  pour les coefficients de Clebsch–Gordan

$$|\mathbf{k} s m_s\rangle = \sum_{\ell=0}^{\infty} i^{\ell} \sum_{j=|\ell-s|}^{\ell+s} \sum_{m=-j}^j \left[ \sum_{m_{\ell}=-\ell}^{\ell} \left( Y_{\ell}^{m_{\ell}}(\hat{k}) \right)^* C_{\ell m_{\ell} s m_s}^{jm} \right] |k(\ell s) j m\rangle, \quad (\text{A.25})$$

où  $|k(\ell s) j m\rangle \in \mathcal{E}_r \otimes \mathcal{E}_s$  est défini par

$$|k(\ell s) j m\rangle = \sum_{m_{\ell}=-\ell}^{\ell} \sum_{m_s=-s}^s C_{\ell m_{\ell} s m_s}^{jm} |k \ell m_{\ell}\rangle \otimes |s m_s\rangle. \quad (\text{A.26})$$

En introduisant le spineur correspondant aux harmoniques sphériques tensorielles (avec  $s = 1/2$  ici) [Varshalovich88]

$$\mathcal{Y}_{jm}^{\ell s}(\hat{k}) = \sum_{m_s=-s}^s \sum_{m_{\ell}=-\ell}^{\ell} Y_{\ell}^{m_{\ell}}(\hat{k}) C_{\ell m_{\ell} s m_s}^{jm} |s m_s\rangle \quad (\text{A.27})$$

et en notant  $\left( \mathcal{Y}_{jm}^{\ell s}(\hat{k}) \right)_{m_s}$  sa composante  $m_s$ , on obtient finalement

$$|\mathbf{k} s m_s\rangle = \sum_{\ell=0}^{\infty} i^{\ell} \sum_{j=|\ell-s|}^{\ell+s} \sum_{m=-j}^j \left( \mathcal{Y}_{jm}^{\ell s}(\hat{k}) \right)_{m_s}^* |k(\ell s) j m\rangle. \quad (\text{A.28})$$

L'élément de matrice de l'interaction  $\hat{v}$  entre deux nucléons ayant, avant interaction, les nombres quantiques totaux  $S, S_z, T, T_z$  et une impulsion relative  $\mathbf{k}$ , et ayant, après interaction, les nombres quantiques  $S', S'_z, T', T'_z$  et une impulsion relative  $\mathbf{k}'$  peut alors être décomposé en ondes partielles sous la forme

$$\langle \mathbf{k}', S' S'_z, T' T'_z | \hat{v} | \mathbf{k}, S S_z, T T_z \rangle = 4\pi \sum_{L, L'} \sum_{J, J_z} \sum_{J', J'_z} i^{L'-L} \left( \mathcal{Y}_{J' J'_z}^{L' S'}(\hat{k}') \right)_{S'_z} \left( \mathcal{Y}_{J J_z}^{L S}(\hat{k}) \right)_{S_z}^* \times \langle k'(L' S') J' J'_z T' T'_z | \hat{v} | k(L S) J J_z T T_z \rangle. \quad (\text{A.29})$$

Puisque l'interaction  $\hat{v}$  est un scalaire vis-à-vis des rotations, elle conserve  $J$  et ne dépend pas de  $J_z$ . De plus elle conserve  $T_z$ . On peut donc considérer l'élément de matrice du membre de droite de (A.29) comme une fonction de  $k$  et  $k'$  dans les ondes partielles  $({}^{2S+1}L_J, {}^{2S'+1}L'_J)$  pour les nombres quantiques  $T, T'$  et  $T_z$  donnés

$$\langle k'(L'S')J'J'_zT'T'_z|\hat{v}|k(LS)JJ_zTT_z\rangle = \delta_{T_zT'_z}\delta_{JJ'}\delta_{J_zJ'_z}v^{T'T'T_z}({}^{2S+1}L_J - {}^{2S'+1}L'_J, k, k'), \quad (\text{A.30})$$

où l'on a utilisé la notation dite spectroscopique :

- pour les canaux diagonaux  $L = L'$  (ou une interaction centrale) :  ${}^{2S+1}X_J$  avec  $X = S$  pour  $L = 0$ ,  $X = P$  pour  $L = 1$ ,  $X = D$  pour  $L = 2$  puis l'ordre alphabétique pour  $L \geq 3$ ;
- pour les canaux non diagonaux (dits couplés) pour une interaction tensorielle :  ${}^3X_J - {}^3Y_J = \epsilon_J$  avec  $X$  correspondant à  $L = J - 1$  et  $Y$  correspondant à  $L = J + 1$ .

## 5.b) Application à l'interaction de Skyrme

L'interaction originale à deux corps de Skyrme [Skyrme59] est la somme d'une contribution centrale (termes en  $t_0, t_1$  et  $t_2$  ci-dessous), spin-orbite (terme en  $W$ ) et tenseur (termes en  $t_e$  et  $t_o$ ) exprimée par ses éléments de matrice partiels en représentation impulsion selon [Hellemans12]

$$\begin{aligned} \tilde{v}_{\text{Sk}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= t_0(1 + x_0\hat{P}_\sigma) + \frac{t_1}{2}(1 + x_1\hat{P}_\sigma)(\mathbf{k}^2 + \mathbf{k}'^2) + t_2(1 + x_2\hat{P}_\sigma)\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}' \\ &+ iW(\hat{\sigma}_1 + \hat{\sigma}_2) \cdot \mathbf{k} \times \mathbf{k}' \\ &+ \frac{t_e}{2} \left[ 3(\hat{\sigma}_1 \cdot \mathbf{k})(\hat{\sigma}_2 \cdot \mathbf{k}) - (\hat{\sigma}_1 \cdot \hat{\sigma}_2)\mathbf{k}^2 + 3(\hat{\sigma}_1 \cdot \mathbf{k}')(\hat{\sigma}_2 \cdot \mathbf{k}') - (\hat{\sigma}_1 \cdot \hat{\sigma}_2)\mathbf{k}'^2 \right] \\ &+ \frac{t_o}{2} \left[ 3\left( (\hat{\sigma}_1 \cdot \mathbf{k})(\hat{\sigma}_2 \cdot \mathbf{k}') + (\hat{\sigma}_2 \cdot \mathbf{k})(\hat{\sigma}_1 \cdot \mathbf{k}') \right) - 2(\hat{\sigma}_1 \cdot \hat{\sigma}_2)\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}' \right], \end{aligned} \quad (\text{A.31})$$

où  $\mathbf{k}'$  et  $\mathbf{k}$  désignent les impulsions relatives des deux nucléons avant et après interaction, respectivement, et  $\hat{P}_\sigma = \frac{1}{2}(1 + \hat{\sigma}_1 \cdot \hat{\sigma}_2)$  est l'opérateur d'échange de spin.

L'élément de matrice direct de la partie centrale dans le développement en ondes partielles (A.29) est diagonal en  $L, S$  et  $T$ , et ne dépend ni de  $S_z$  ni de  $T_z$  :

$$\langle k'(L'S')J'J'_zT'T'_z|\hat{v}_{\text{Sk}}^{(c)}|k(LS)JJ_zTT_z\rangle = \frac{\delta_{TT'}\delta_{T_zT'_z}\delta_{JJ'}\delta_{J_zJ'_z}\delta_{LL'}\delta_{SS'}}{2L+1}v_{\text{Sk}}^{(c)}({}^{2S+1}L_J, k, k'), \quad (\text{A.32})$$

où  $v_{\text{Sk}}^{(c)}({}^{2S+1}L_J, k, k')$  est l'élément de matrice dans l'onde partielle  ${}^{2S+1}L_J$

$$v_{\text{Sk}}^{(c)}({}^{2S+1}L_J, k, k') = \begin{cases} t_0 \left( 1 + x_0(-1)^{S+1} \right) + \frac{t_1}{2} \left( 1 + x_1(-1)^{S+1} \right) (k^2 + k'^2) & \text{si } L = 0 \\ t_2 \left( 1 + x_2(-1)^{S+1} \right) k k' & \text{si } L = 1 \\ 0 & \text{si } L \geq 2. \end{cases} \quad (\text{A.33})$$

Pour des valeurs fixées de  $L$  et  $S$ , la valeur de  $T$  donnant une contribution non nulle à l'élément de matrice antisymétrisé à deux corps est déterminé par le principe d'exclusion de Pauli qui impose la condition  $(-1)^{L+S+T} = -1$ . Les seuls canaux contribuant sont donc

$$\begin{aligned} v_{\text{Sk}}^{(c)}({}^1S_0, k, k') &= t_0(1 - x_0) + \frac{t_1}{2}(1 - x_1)(k^2 + k'^2) \quad (S = 0, T = 1) \\ v_{\text{Sk}}^{(c)}({}^3S_1, k, k') &= t_0(1 + x_0) + \frac{t_1}{2}(1 + x_1)(k^2 + k'^2) \quad (S = 1, T = 0) \\ v_{\text{Sk}}^{(c)}({}^1P_1, k, k') &= t_2(1 - x_2)kk' \quad (S = 0, T = 0) \\ v_{\text{Sk}}^{(c)}({}^3P_J, k, k') &= t_2(1 + x_2)kk' \quad \forall J \in \{0, 1, 2\} \quad (S = 1, T = 1). \end{aligned} \quad (\text{A.34})$$

Pour les parties spin-orbite et tenseur  $t_o$  on montre que l'élément de matrice direct est diagonal et que seuls les canaux  ${}^3P_J$  contribuent, avec

$$v_{\text{Sk}}^{(so+t_o)}({}^3P_0, k, k') = (4W - 5t_o)kk' \quad (\text{A.35})$$

$$v_{\text{Sk}}^{(so+t_o)}({}^3P_1, k, k') = \left(2W + \frac{5}{2}t_o\right)kk' \quad (\text{A.36})$$

$$v_{\text{Sk}}^{(so+t_o)}({}^3P_2, k, k') = -\left(2W + \frac{1}{2}t_o\right)kk' . \quad (\text{A.37})$$

Quant à la partie tenseur  $t_e$ , elle n'agit que dans le canal couplé  $\epsilon_1 = {}^3S_1 - {}^3D_1$  avec l'élément de matrice direct

$$\langle k'(L'S')JJ_zTT_z | \hat{v}_{\text{Sk}}^{(t_e)} | k(LS)JJ_zTT_z \rangle = \delta_{SS'}\delta_{J1}\delta_{S1}\sqrt{2}t_e \left( \delta_{L2}\delta_{L'0}k^2 + \delta_{L0}\delta_{L'2}k'^2 \right) . \quad (\text{A.38})$$

Les éléments de matrice d'échange étant égaux aux termes directs pour chaque partie de l'interaction, il suffit de multiplier par 2 chaque expression ci-dessus pour obtenir les éléments de matrice antisymétrisés.



# Annexe B

## Formalisme de Skyrme–Hartree–Fock–BCS

### 1) Interaction de Skyrme

En plus des termes central, spin-orbite et tenseur exprimés dans la représentation impulsion en (A.31), l'interaction de Skyrme utilisée dans ce travail contient un terme dépendant de la densité  $\hat{V}_{\text{DD}}$  (pour simuler les effets à plus de deux corps et n'induisant pas d'instabilité de spin comme le terme de contact à trois d'origine [Stringari76]) défini en représentation position par

$$V_{\text{DD}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{t_3}{6}(1 + x_3 P_\sigma) \rho^\alpha \left( \frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2} \right) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2), \quad (\text{B.1})$$

où  $\rho$  est la densité de nucléons définie dans la section 3). Le hamiltonien<sup>1</sup> dit de Skyrme est alors la somme de l'énergie cinétique à un corps  $\hat{K}$ , de l'interaction de Skyrme  $\hat{V}_{\text{Sk}}$  et de l'interaction de Coulomb  $\hat{V}_{\text{Coul}}$ .

Dans le contexte de calculs brisant la symétrie de renversement du temps, le terme  $V_{\text{DD}}$  n'est pas équivalent à une interaction à trois corps de portée nulle (voir par exemple [Passler76]). De plus, notons que très récemment une interaction indépendante de la densité contenant les termes à deux corps usuels et des termes de portée nulle à trois et quatre corps (SLyMR0) a été développée pour des calculs au-delà du champ moyen de type restauration de symétries et méthode de la coordonnée génératrice [Sadoudi13]. Cette indépendance vis-à-vis de la densité garantit l'absence de divergences ou de discontinuités dans la fonctionnelle énergie que l'on rencontre en présence de termes dépend de  $\rho$  par des puissances non entières de celle-ci [Lacroix09] (telles que les paramétrisations courantes SkM\* [Bartel82] et SLy4, SLy5 [Chabanat98]).

### 2) Fonctionnelle énergie

La valeur moyenne  $E$  de l'hamiltonien de Skyrme calculée pour un déterminant de Slater normalisé est une fonctionnelle paire par renversement du temps de densités locales

$$E = \int d\mathbf{r} \left( \mathcal{H}_{\text{kin}}(\mathbf{r}) + \mathcal{H}_{\text{c+t}}(\mathbf{r}) + \mathcal{H}_{\text{DD}} + \mathcal{H}_{\text{s.o.}}(\mathbf{r}) + \mathcal{H}_{\text{Coul}}(\mathbf{r}) \right) \quad (\text{B.2})$$

---

1. Il s'agit d'un abus de langage compte tenu de la dépendance en densité. De même on ne peut, au sens strict, parler d'interaction dépendant de la densité.

où  $\mathcal{H}_{\text{kin}}(\mathbf{r})$ ,  $\mathcal{H}_{\text{c+tt}}(\mathbf{r})$ ,  $\mathcal{H}_{\text{DD}}(\mathbf{r})$ ,  $\mathcal{H}_{\text{s.o.}}(\mathbf{r})$  et  $\mathcal{H}_{\text{Coul}}(\mathbf{r})$  sont les contributions de densité d'énergie cinétique, centrale-plus-tenseur, dépendant de la densité, spin-orbite and coulombienne, respectivement. Pour chaque état de charge  $q$ , ces densités locales sont classées en deux catégories selon leur comportement par renversement du temps (représenté par l'opérateur anti-linéaire et unitaire  $\mathcal{T}$ ) :

- densités paires par  $\mathcal{T}$ , qui commutent avec  $\mathcal{T}$  et sont des quantités scalaires ou tensorielles de rang 2 vis-à-vis des rotations : densité de nucléons  $\rho_q(\mathbf{r})$ , densité d'énergie cinétique  $\tau_q(\mathbf{r})$  et tenseur "spin-courant"  $J_q^{\mu\nu}(\mathbf{r})$  ;
- densités impaires par  $\mathcal{T}$ , qui anticommulent avec  $\mathcal{T}$  et sont des quantités vectorielles : densité de spin  $\mathbf{s}_q(\mathbf{r})$ , densité de courant  $\mathbf{j}_q(\mathbf{r})$ , densité "spin-cinétique"  $\mathbf{T}_q(\mathbf{r})$  et tenseur "spin-cinétique"  $\mathbf{F}_q(\mathbf{r})$ .

Leur définition est donnée dans la section suivante. Lorsque l'indice  $q$  est omis, on sous-entend la somme sur les deux états de charge (densité isoscalaire). Les contributions à la densité d'énergie ont les expressions suivantes en fonction des densités locales (dont la dépendance en  $\mathbf{r}$  est sous-entendue) dans un système de coordonnées quelconque

$$\mathcal{H}_{\text{kin}}(\mathbf{r}) = \left(1 - \frac{1}{A}\right) \frac{\hbar^2}{2m} \tau, \quad (\text{B.3})$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{c+tt}}(\mathbf{r}) = & B_1 \rho^2 + B_{10} \mathbf{s}^2 + B_3 (\rho \tau - \mathbf{j}^2) + B_{14} (\overleftrightarrow{\mathbf{J}}^2 - \mathbf{s} \cdot \mathbf{T}) + B_5 \rho \Delta \rho + B_{18} \mathbf{s} \cdot \Delta \mathbf{s} \\ & + B_{16} \left[ (\overleftrightarrow{g} \cdot \overleftrightarrow{\mathbf{J}})^2 + J_{\mu\nu} J^{\nu\mu} - 2 \mathbf{s} \cdot \mathbf{F} \right] + B_{20} (\nabla \cdot \mathbf{s})^2 \\ & + \sum_q \left\{ B_2 \rho_q^2 + B_{11} \mathbf{s}_q^2 + B_4 (\rho_q \tau_q - \mathbf{j}_q^2) + B_{15} (\overleftrightarrow{\mathbf{J}}_q^2 - \mathbf{s}_q \cdot \mathbf{T}_q) + B_6 \rho_q \Delta \rho_q + B_{19} \mathbf{s}_q \cdot \Delta \mathbf{s}_q \right. \\ & \left. + B_{17} \left[ (\overleftrightarrow{g} \cdot \overleftrightarrow{\mathbf{J}}_q)^2 + J_{q,\mu\nu} J_q^{\nu\mu} - 2 \mathbf{s}_q \cdot \mathbf{F}_q \right] + B_{21} (\nabla \cdot \mathbf{s}_q)^2 \right\}, \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

$$\mathcal{H}_{\text{DD}}(\mathbf{r}) = \rho^\alpha \left[ B_7 \rho^2 + B_{12} \mathbf{s}^2 + \sum_q (B_8 \rho_q^2 + B_{13} \mathbf{s}_q^2) \right], \quad (\text{B.5})$$

$$\mathcal{H}_{\text{s.o.}}(\mathbf{r}) = B_9 \left[ \rho \nabla \cdot \mathbf{J} + \mathbf{j} \cdot \nabla \times \mathbf{s} + \sum_q \left( \rho_q \nabla \cdot \mathbf{J}_q + \mathbf{j}_q \cdot \nabla \times \mathbf{s}_q \right) \right], \quad (\text{B.6})$$

$$\mathcal{H}_{\text{Coul}}(\mathbf{r}) \approx \frac{1}{2} \rho_p(\mathbf{r}) V_{\text{Coul}}^{(\text{dir})}(\mathbf{r}) - \frac{3}{4} e^2 \left( \frac{3}{\pi} \right)^{\frac{1}{3}} \rho_p^{\frac{4}{3}}(\mathbf{r}), \quad (\text{B.7})$$

avec le potentiel direct de Coulomb  $V_{\text{Coul}}^{(\text{dir})}(\mathbf{r}) = e^2 \int d^3 \mathbf{r}' \frac{\rho_p(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}$ ,  $\overleftrightarrow{\mathbf{J}}_q^2 = J_{q,\mu\nu} J_q^{\mu\nu}$  (en utilisant la convention de sommation d'Einstein),  $g$  est le tenseur métrique et  $\mathbf{J}_q$  la partie antisymétrique du tenseur spin-courant [Engel75]. Ci-dessus le terme d'échange coulombien est exprimé dans l'approximation de Slater [Slater51]. Dans les expressions (B.3) à (B.6), les coefficients  $B_i$  sont des fonctions des paramètres de Skyrme  $t_i$ ,  $x_i$  et  $W$  [Lesinski07] rappelées ici :

- pour la partie centrale seule :

$$B_1 = \frac{t_0}{2} \left(1 + \frac{x_0}{2}\right) \quad B_2 = -\frac{t_0}{2} \left(\frac{1}{2} + x_0\right) \quad (\text{B.8})$$

$$B_3 = \frac{1}{4} \left[ t_1 \left(1 + \frac{x_1}{2}\right) + t_2 \left(1 + \frac{x_2}{2}\right) \right] \quad B_4 = -\frac{1}{4} \left[ t_1 \left(\frac{1}{2} + x_1\right) - t_2 \left(\frac{1}{2} + x_2\right) \right] \quad (\text{B.9})$$

$$B_5 = -\frac{1}{16} \left[ 3t_1 \left(1 + \frac{x_1}{2}\right) - t_2 \left(1 + \frac{x_2}{2}\right) \right] \quad B_6 = \frac{1}{16} \left[ 3t_1 \left(\frac{1}{2} + x_1\right) + t_2 \left(\frac{1}{2} + x_2\right) \right] \quad (\text{B.10})$$

$$B_{10} = \frac{1}{4} t_0 x_0 \quad B_{11} = -\frac{1}{4} t_0 \quad (\text{B.11})$$

– pour la partie centrale-plus-tenseur :

$$B_{14} = -\frac{1}{8}(t_1x_1 + t_2x_2) + \frac{1}{4}(t_e + t_o) \quad B_{15} = \frac{1}{8}(t_1 - t_2) - \frac{1}{4}(t_e - t_o) \quad (\text{B.12})$$

$$B_{18} = -\frac{1}{32}(3t_1x_1 - t_2x_2) + \frac{1}{16}(3t_e - t_o) \quad B_{19} = \frac{1}{32}(3t_1 + t_2) - \frac{1}{16}(3t_e + t_o) \quad (\text{B.13})$$

– pour la partie tenseur seule :

$$B_{16} = -\frac{3}{8}(t_e + t_o) \quad B_{17} = \frac{3}{8}(t_e - t_o) \quad (\text{B.14})$$

$$B_{20} = \frac{3}{16}(3t_e - t_o) \quad B_{21} = -\frac{3}{16}(3t_e + t_o), \quad (\text{B.15})$$

– pour la partie dépendante de la densité :

$$B_7 = \frac{t_3}{12} \left(1 + \frac{x_3}{2}\right) \quad B_8 = -\frac{t_3}{12} \left(\frac{1}{2} + x_3\right) \quad (\text{B.16})$$

$$B_{12} = \frac{1}{24}t_3x_3 \quad B_{13} = -\frac{t_3}{24}, \quad (\text{B.17})$$

– pour la partie spin-orbite :

$$B_9 = -\frac{W}{2}. \quad (\text{B.18})$$

### 3) Densités locales

On peut trouver les définitions des densités locales par exemple dans les références [Engel75, Bonche87, Hellemans12] mais elles sont données ci-dessous par souci de complétude en tenant compte des facteurs d'occupation de BCS [Vautherin73] et en utilisant la notation spinorielle

$$[\phi_k](\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \phi_k^{(+)}(\mathbf{r}) \\ \phi_k^{(-)}(\mathbf{r}) \end{pmatrix}. \quad (\text{B.19})$$

Les densités locales paires par renversement du temps  $\rho(\mathbf{r})$ ,  $\tau(\mathbf{r})$  et  $J_{\mu\nu}(\mathbf{r})$  générées par les termes central et spin-orbite de l'interaction de Skyrme ont pour expression

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_k v_k^2 [\phi_k]^\dagger(\mathbf{r}) [\phi_k](\mathbf{r}) \quad (\text{B.20})$$

$$\tau(\mathbf{r}) = \sum_k v_k^2 \left( \nabla [\phi_k]^\dagger(\mathbf{r}) \right) \cdot \nabla [\phi_k](\mathbf{r}) \quad (\text{B.21})$$

$$J_{\mu\nu}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2i} \sum_k v_k^2 \left\{ [\phi_k]^\dagger(\mathbf{r}) \nabla_\mu (\sigma_\nu [\phi_k](\mathbf{r})) - \left( \nabla_\mu [\phi_k]^\dagger(\mathbf{r}) \right) \sigma_\nu [\phi_k](\mathbf{r}) \right\}, \quad (\text{B.22})$$

où  $\nabla_\mu$  désigne la dérivée covariante (avec  $\nabla_\mu \sigma_\nu = 0$ ), tandis que leurs homologues impaires s'écrivent

$$\mathbf{s}(\mathbf{r}) = \sum_k v_k^2 [\phi_k]^\dagger(\mathbf{r}) \boldsymbol{\sigma} [\phi_k](\mathbf{r}) \quad (\text{B.23})$$

$$T_\mu(\mathbf{r}) = \sum_k v_k^2 \left( \nabla [\phi_k]^\dagger(\mathbf{r}) \right) \cdot \sigma_\mu \nabla [\phi_k](\mathbf{r}) \quad (\text{B.24})$$

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2i} \sum_k v_k^2 \left\{ [\phi_k]^\dagger(\mathbf{r}) \nabla [\phi_k](\mathbf{r}) - \left( \nabla [\phi_k]^\dagger(\mathbf{r}) \right) [\phi_k](\mathbf{r}) \right\} \quad (\text{B.25})$$

L'interaction tenseur produit la densité locale  $\mathbf{F}(\mathbf{r})$  indépendante des autres et dont les composantes sont définies par

$$F_\mu(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \sum_k v_k^2 \left\{ \left( \nabla_\mu [\phi_k]^\dagger(\mathbf{r}) \right) \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla [\phi_k](\mathbf{r}) + \left( \nabla [\phi_k]^\dagger(\mathbf{r}) \right) \cdot \boldsymbol{\sigma} \nabla_\mu [\phi_k](\mathbf{r}) \right\}. \quad (\text{B.26})$$

## 4) Hamiltonien et champs de Hartree–Fock

Dans les calculs de champ moyen présentés dans ce mémoire, l'effet à un corps des corrélations d'appariement est pris en compte dans l'approximation de Hartree–Fock–BCS. Comme expliqué dans la référence [Vautherin73], l'usage de l'interaction de Skyrme se traduit alors par les facteurs de poids  $v_k^2$  dans les définitions des densités locales et l'ajout à  $E$  (B.2) de l'énergie d'appariement. La variation de l'énergie totale obtenue par rapport aux fonctions d'onde individuelles  $[\phi_k](\mathbf{r})$ , avec une contrainte de normalisation imposée par des multiplicateurs de Lagrange interprétés comme les énergies individuelles  $e_k$ , et par rapport aux facteurs d'occupation  $v_k^2$ , conduit aux équations de Hartree–Fock–BCS [Ring80]. La première variation donne l'équation aux valeurs propres  $\hat{h}_{\text{HF}}^{(q)} |\phi_k\rangle = e_k |\phi_k\rangle$  du hamiltonien à un corps de Hartree–Fock  $\hat{h}_{\text{HF}}^{(q)}$  (pour l'état de charge  $q$ ) dont l'action sur  $|\phi_k\rangle$  en représentation position est

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r} | \hat{h}_{\text{HF}}^{(q)} | \phi_k \rangle = & - \nabla \cdot \left( \frac{\hbar^2}{2m_q^*(\mathbf{r})} \nabla [\phi_k](\mathbf{r}) \right) + \left( U_q(\mathbf{r}) + \delta_{qp} V_{\text{Coul}}(\mathbf{r}) \right) [\phi_k](\mathbf{r}) + i \mathbf{W}_q(\mathbf{r}) \cdot \left( \boldsymbol{\sigma} \times \nabla [\phi_k](\mathbf{r}) \right) \\ & - i \sum_{\mu, \nu} \left\{ \left( W_{q, \mu\nu}^{(J)}(\mathbf{r}) \sigma_\nu \nabla_\mu [\phi_k](\mathbf{r}) \right) + \nabla_\mu \left( W_{q, \mu\nu}^{(J)}(\mathbf{r}) \sigma_\nu [\phi_k](\mathbf{r}) \right) \right\} \\ & - \frac{i}{2} \left\{ \mathbf{A}_q(\mathbf{r}) \cdot \nabla [\phi_k](\mathbf{r}) + \nabla \cdot \left( \mathbf{A}_q(\mathbf{r}) [\phi_k](\mathbf{r}) \right) \right\} + \mathbf{S}_q(\mathbf{r}) \cdot \boldsymbol{\sigma} [\phi_k](\mathbf{r}) \\ & - \nabla \cdot \left( \left( \mathbf{C}_q(\mathbf{r}) \cdot \boldsymbol{\sigma} \right) \nabla [\phi_k](\mathbf{r}) \right) \\ & - \frac{1}{2} \left\{ \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \left( \mathbf{D}_q(\mathbf{r}) \cdot \nabla [\phi_k](\mathbf{r}) \right) + \nabla \cdot \left[ \mathbf{D}_q(\mathbf{r}) \left( \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla [\phi_k](\mathbf{r}) \right) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (\text{B.27})$$

Dans cette expression, les champs pairs par renversement du temps  $m^*(\mathbf{r})$ ,  $U_q(\mathbf{r})$ ,  $V_{\text{Coul}}(\mathbf{r})$ ,  $\mathbf{W}_q(\mathbf{r})$  et  $W_{q, \mu\nu}^{(J)}(\mathbf{r})$  désignent respectivement la masse effective, le champ central avec dépendance en densité, le champ coulombien, le champ spin-orbite et le champ "spin-courant", tandis que  $\mathbf{S}_q(\mathbf{r})$  (champ de spin),  $\mathbf{A}_q(\mathbf{r})$  (champ de courant),  $\mathbf{C}_q(\mathbf{r})$  et  $\mathbf{D}_q(\mathbf{r})$  (appelés génériquement champs spin-gradient) sont des champs impairs par renversement du temps. Ils sont fonction des densités locales local densities (voir par exemple [Hellemans12] pour les expressions complètes suivantes) :

– masse effective (avec correction à un corps du mouvement du centre de masse) :

$$\frac{\hbar^2}{2m_q^*(\mathbf{r})} = \left( 1 - \frac{1}{A} \right) \frac{\hbar^2}{2m} + B_3 \rho + B_4 \rho_q, \quad (\text{B.28})$$

– champ central :

$$\begin{aligned} U_q(\mathbf{r}) = & 2 (B_1 \rho + B_2 \rho_q) + B_3 \tau + B_4 \tau_q + 2 (B_5 \Delta \rho + B_6 \Delta \rho_q) \\ & + \rho^{\alpha-1} \left[ (2 + \alpha) B_7 \rho^2 + B_8 \alpha (\rho_n^2 + \rho_p^2 + 2 \rho \rho_q) \right] + B_9 (\nabla \cdot \mathbf{J} + \nabla \cdot \mathbf{J}_q), \end{aligned} \quad (\text{B.29})$$



– champ coulombien :

$$V_{\text{Coul}}(\mathbf{r}) = V_{\text{Coul}}^{(\text{dir})}(\mathbf{r}) + V_{\text{Coul}}^{(\text{ech})}(\mathbf{r}) \quad (\text{B.30})$$

avec, dans l'approximation de Slater :

$$V_{\text{Coul}}^{(\text{ech})}(\mathbf{r}) = - \left( \frac{3}{\pi} \right)^{1/3} e^2 \rho_p^{1/3}, \quad (\text{B.31})$$

– champs spin-orbite et spin-courant :

$$\mathbf{W}_q(\mathbf{r}) = -B_9(\nabla\rho + \nabla\rho_q) \quad (\text{B.32})$$

$$W_{q,\mu\nu}^{(J)}(\mathbf{r}) = B_{14}J_{\mu\nu} + B_{15}J_{q,\mu\nu} + B_{16}\left(g_{\mu\nu}\overleftrightarrow{\mathbf{g}} \cdot \overleftrightarrow{\mathbf{J}} + J_{\nu\mu}\right) + B_{17}\left(g_{\mu\nu}\overleftrightarrow{\mathbf{g}} \cdot \overleftrightarrow{\mathbf{J}}_q + J_{q,\nu\mu}\right) \quad (\text{B.33})$$

– champs de spin, de courant et spin-gradient :

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_q(\mathbf{r}) = & 2(B_{10} + B_{12}\rho^\alpha)\mathbf{s} + 2(B_{11} + B_{13}\rho^\alpha)\mathbf{s}_q + B_9\nabla \times (\mathbf{j} + \mathbf{j}_q) \\ & - (B_{14}\mathbf{T} + B_{15}\mathbf{T}_q) - 2(B_{16}\mathbf{F} + B_{17}\mathbf{F}_q) + 2(B_{18}\Delta\mathbf{s} + B_{19}\Delta\mathbf{s}_q) \\ & - 2\left[B_{20}\nabla(\nabla \cdot \mathbf{s}) + B_{21}\nabla(\nabla \cdot \mathbf{s}_q)\right] \end{aligned} \quad (\text{B.34})$$

$$\mathbf{A}_q(\mathbf{r}) = -2(B_3\mathbf{j} + B_4\mathbf{j}_q) + B_9\nabla \times (\mathbf{s} + \mathbf{s}_q) \quad (\text{B.35})$$

$$\mathbf{C}_q(\mathbf{r}) = -B_{14}\mathbf{s} - B_{15}\mathbf{s}_q \quad (\text{B.36})$$

$$\mathbf{D}_q(\mathbf{r}) = -2(B_{16}\mathbf{s} + B_{17}\mathbf{s}_q). \quad (\text{B.37})$$

Les équations de Hartree–Fock sont résolues par diagonalisation itérative de  $\hat{h}_{\text{HF}}^{(q)}$  dans la base de l'oscillateur harmonique cylindrique [Vautherin73, Flocard73]. Les éléments de matrice de  $\hat{h}_{\text{HF}}^{(q)}$  sont calculés par intégration numérique dans l'espace des positions comme suit, après intégration par parties et utilisation de l'identité  $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$  valide dans le cadre indépendant du temps considéré ici :

$$\begin{aligned} \langle \alpha | \hat{h}_{\text{HF}}^{(q)} | \beta \rangle = & \int d^3\mathbf{r} \left\{ \frac{\hbar^2}{2m_q^*(\mathbf{r})} \left( \nabla[\phi_\alpha]^\dagger(\mathbf{r}) \cdot \nabla[\phi_\beta](\mathbf{r}) + \left( U_q(\mathbf{r}) + \delta_{qp} V_{\text{Coul}}(\mathbf{r}) \right) [\phi_\alpha]^\dagger(\mathbf{r})[\phi_\beta](\mathbf{r}) \right. \right. \\ & + i[\phi_\alpha]^\dagger(\mathbf{r})\mathbf{W}_q(\mathbf{r}) \cdot (\boldsymbol{\sigma} \times \nabla[\phi_\beta](\mathbf{r})) \\ & - i \sum_{\mu,\nu} W_{q,\mu\nu}^{(J)}(\mathbf{r}) \left( [\phi_\alpha]^\dagger(\mathbf{r})\sigma_\nu \nabla_\mu[\phi_\beta](\mathbf{r}) - \left( \nabla_\mu[\phi_\alpha]^\dagger(\mathbf{r}) \right) \sigma_\nu [\phi_\beta](\mathbf{r}) \right) \\ & - i[\phi_\alpha]^\dagger(\mathbf{r})\mathbf{A}_q(\mathbf{r}) \cdot \nabla[\phi_\beta](\mathbf{r}) + [\phi_\alpha]^\dagger(\mathbf{r})\mathbf{S}_q(\mathbf{r}) \cdot \boldsymbol{\sigma}[\phi_\beta](\mathbf{r}) \\ & + \left( \nabla[\phi_\alpha]^\dagger(\mathbf{r}) \right) \cdot (\mathbf{C}_q(\mathbf{r}) \cdot \boldsymbol{\sigma}) \nabla[\phi_\beta](\mathbf{r}) \\ & + \frac{1}{2} \left[ \left( \nabla[\phi_\alpha]^\dagger(\mathbf{r}) \right) \cdot \boldsymbol{\sigma} \right] \left( \mathbf{D}_q(\mathbf{r}) \cdot \nabla[\phi_\beta](\mathbf{r}) \right) \\ & \left. + \frac{1}{2} \left[ \left( \nabla[\phi_\alpha]^\dagger(\mathbf{r}) \right) \cdot \mathbf{D}_q(\mathbf{r}) \right] \left( \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla[\phi_\beta](\mathbf{r}) \right) \right\} \end{aligned} \quad (\text{B.38})$$

Enfin, les deux derniers termes du champ de spin (désignés par  $\mathbf{S}_q^{(\nabla s)}$  et générés par l'interaction tenseur seulement) contenant un gradient, il est plus facile d'en calculer la contribution

à l'élément de matrice (B.38) après une intégration par parties

$$\langle \alpha | \mathbf{S}_q^{(\nabla^s)} \cdot \boldsymbol{\sigma} | \beta \rangle = 2 \int d^3 \mathbf{r} (B_{20} \boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{s} + B_{21} \boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{s}_q) \left\{ \left( \boldsymbol{\nabla} [\phi_\alpha]^\dagger(\mathbf{r}) \right) \cdot \boldsymbol{\sigma} [\phi_\beta](\mathbf{r}) + [\phi_\alpha]^\dagger(\mathbf{r}) \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\nabla} [\phi_\beta](\mathbf{r}) \right\}. \quad (\text{B.39})$$

# Annexe C

## Théorie de perturbation à $N$ corps

On partitionne l'hamiltonien  $\hat{H}$  du noyau selon  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$  avec  $\hat{H}_0$  un opérateur à un corps (typiquement de champ moyen) et  $\hat{V}$  un opérateur à deux corps (appelé interaction résiduelle). Soit  $\{E_i^{(0)}, i \geq 0\}$  le spectre lié de  $\hat{H}_0$  (classé par énergie croissante) et  $\{|\Phi_i\rangle, i = 0, 1, \dots\}$  une base orthonormée de vecteurs propres associés :

$$\hat{H}_0|\Phi_i\rangle = E_i^{(0)}|\Phi_i\rangle . \quad (\text{C.1})$$

Tous les états  $|\Phi_i\rangle$  avec  $i \neq 0$  sont des excitations particules-trous par rapport au déterminant de Slater  $|\Phi_0\rangle$ .

On suppose que  $E_0^{(0)}$  est non dégénérée. La valeur propre  $E_0 = E_0^{(0)} + \Delta E$  la plus basse de  $\hat{H}$  est alors également non dégénérée. Le vecteur propre associé  $|\Psi_0\rangle$  représente l'état fondamental corrélé du noyau. En outre, afin de garantir la convergence des développements ci-dessous en puissance de  $\hat{V}$ , on fait l'hypothèse que l'énergie de première excitation  $E_1^{(0)*} = E_1^{(0)} - E_0^{(0)}$  est assez grande pour ne pas avoir besoin de considérer la théorie de perturbation quasi-dégénérée [Bloch58a, Bloch58b, Brandow67] et que l'opérateur de perturbation  $\hat{V}$  est assez "faible" par rapport à  $\hat{H}_0$  (ses valeurs propres sont petites en valeur absolue par rapport aux énergies d'excitation non perturbées).

### 1) Développement de Goldstone

On appelle  $\hat{P}$  et  $\hat{Q}$  les opérateurs de projection orthogonale sur le sous-espace engendré par  $|\Phi_0\rangle$  et le sous-espace supplémentaire, respectivement, et  $\hat{R}_0(\zeta)$  la résolvante de  $\hat{H}_0$  définie par

$$\forall \zeta \notin \{E_1^{(0)}, E_2^{(0)} \dots\}, \hat{R}_0(\zeta) = \frac{\hat{Q}}{\zeta - \hat{H}_0} = \sum_{i \neq 0} \frac{|\Phi_i\rangle\langle\Phi_i|}{\zeta - E_i^{(0)}} . \quad (\text{C.2})$$

Dans une formulation diagrammatique Goldstone a montré que l'état fondamental perturbé  $|\Psi_0\rangle$  (non normalisé) et son énergie  $E_0$  pouvaient s'exprimer par les développements

$$|\Psi_0\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} [(\hat{R}_0(E_0^{(0)})\hat{W})^n|\Phi_0\rangle]_L , \quad (\text{C.3})$$

$$E_0 = E_0^{(0)} + \underbrace{\langle\Phi_0|\hat{V}|\Phi_0\rangle + \sum_{n=1}^{\infty} \langle\Phi_0|\hat{V}(\hat{R}_0(E_0^{(0)})\hat{W})^n|\Phi_0\rangle_L}_{\Delta E} , \quad (\text{C.4})$$

avec  $\hat{W} = \hat{V} - \langle \Phi_0 | \hat{V} | \Phi_0 \rangle$ , restreints aux diagrammes liés [Goldstone57, Brandow67]. De plus l'état perturbé  $|\Psi_0^{(n-1)}\rangle$  et la correction d'énergie  $\Delta E^{(n)}$  obtenus en tronquant les développements (C.3) et (C.4) aux ordre  $n - 1$  et  $n$ , respectivement, vérifient la relation

$$\Delta E^{(n)} = \langle \Phi_0 | \hat{V} | \Psi_0^{(n-1)} \rangle. \quad (\text{C.5})$$

Pour un état  $|\Phi_i\rangle$  donné, les contributions d'ordre  $k$  proviennent de termes faisant intervenir  $k - 1$  états intermédiaires excités non perturbés dans la transition induite par  $\hat{V}$  entre  $|\Phi_0\rangle$  et  $|\Phi_i\rangle$ .

Par ailleurs, lorsque l'on normalise l'état développé (C.3) l'amplitude d'une configuration  $m$ pmh (avec  $0 \leq m \leq 2n$ ) est diminuée (en valeur absolue) d'un facteur différant de 1 par des termes d'ordre au moins égal à  $[(m + 1)/2] + 2$ , où  $[x]$  est la partie entière de  $x$ .

## 2) Ordres 1 et 2 pour le vecteur d'état

Si l'on tronque à  $n = 1$  le développement (C.3) de  $|\Psi_0\rangle$ , on trouve :

$$|\Psi_0\rangle = |\Phi_0\rangle - \sum_{i \neq 0} \frac{\langle \Phi_i | \hat{V} | \Phi_0 \rangle}{E_i^{(0)*}} |\Phi_i\rangle, \quad (\text{C.6})$$

tandis que pour  $n = 2$  il vient :

$$|\Psi_0\rangle = |\Phi_0\rangle - \sum_{i \neq 0} \left[ \frac{\langle \Phi_i | \hat{V} | \Phi_0 \rangle}{E_i^{(0)*}} \left( 1 + \frac{\langle \Phi_0 | \hat{V} | \Phi_0 \rangle}{E_i^{(0)*}} \right) - \sum_{j \neq 0} \frac{\langle \Phi_i | \hat{V} | \Phi_j \rangle \langle \Phi_j | \hat{V} | \Phi_0 \rangle}{E_i^{(0)*} E_j^{(0)*}} \right] |\Phi_i\rangle. \quad (\text{C.7})$$

Si  $\hat{V}$  est sous forme de produit normal par rapport à  $|\Phi_0\rangle$  (comme c'est le cas dans l'approche HTDA), on en déduit qu'à l'ordre 1 l'interaction résiduelle n'induit que des corrélations 2p2h et qu'à l'ordre 2, elle peut alimenter les excitations 1p1h jusque 4p4h.

## 3) Correction à l'énergie jusqu'à l'ordre 2

A l'ordre 1 en  $\hat{V}$  on retrouve facilement le résultat connu

$$\Delta E = \langle \Phi_0 | \hat{V} | \Phi_0 \rangle. \quad (\text{C.8})$$

A l'ordre 2 on obtient une contribution supplémentaire au deuxième membre de (C.8). Puisque  $\hat{R}_0(\zeta)|\Phi_0\rangle = 0$ ,  $\Delta E$  jusqu'à l'ordre 2 s'écrit alors :

$$\Delta E = \langle \Phi_0 | \hat{V} | \Phi_0 \rangle - \sum_{i \neq 0} \frac{|\langle \Phi_i | \hat{V} | \Phi_0 \rangle|^2}{E_i^{(0)*}}, \quad (\text{C.9})$$

où  $E_i^{(0)*} = E_i^{(0)} - E_0^{(0)} > 0$  est l'énergie d'excitation de l'état non perturbé  $|\Phi_i\rangle$ . Par conséquent la contribution d'ordre 2 seule des perturbations est toujours négative. Notons que si  $\hat{V}$  est sous forme de produit normal par rapport à  $|\Phi_0\rangle$ , alors la contribution d'ordre 1 à  $\Delta E$  s'annule.

# Annexe D

## Eléments de matrice de l'opérateur $\hat{\mathbf{T}}^4$

L'opérateur  $\hat{\mathbf{T}}^2$  peut s'écrire sous la forme

$$\hat{\mathbf{T}}^2 = \hat{T}_z(\hat{T}_z + 1) + \hat{T}_- \hat{T}_+, \quad (\text{D.1})$$

où  $\hat{T}_-$  et  $\hat{T}_+$  sont les opérateurs d'isospin habituels définis par  $\hat{T}_\pm = \hat{T}_x \pm i\hat{T}_y$ . Ces derniers obéissent aux relations de commutation suivantes

$$[\hat{T}_+, \hat{T}_-] = 2\hat{T}_z, \quad (\text{D.2})$$

$$[\hat{T}_z, \hat{T}_\pm] = \pm \hat{T}_\pm, \quad (\text{D.3})$$

et leur produit  $\hat{T}_- \hat{T}_+$  commute avec toute fonction de l'opérateur  $\hat{T}_z$ . Par conséquent l'opérateur  $\hat{\mathbf{T}}^4$  peut s'exprimer en fonction des puissances de  $\hat{T}_-$  et  $\hat{T}_+$  selon

$$\hat{\mathbf{T}}^4 = (\hat{T}_z + 1)^2(\hat{T}_z^2 + 2\hat{T}_- \hat{T}_+) + \hat{T}_-^2 \hat{T}_+^2. \quad (\text{D.4})$$

Le terme nouveau dans les éléments de matrice de  $\hat{\mathbf{T}}^4$  par rapport à ceux de  $\hat{\mathbf{T}}^2$  est donc celui provenant de l'opérateur  $\hat{T}_-^2 \hat{T}_+^2$ . Comme ce dernier est la somme d'opérateurs à deux, trois et quatre corps séparables

$$\begin{aligned} \hat{T}_-^2 \hat{T}_+^2 = & 2 \sum_{i \neq j} (\hat{t}_- \hat{t}_+)(i) \otimes (\hat{t}_- \hat{t}_+)(j) \\ & + 4 \sum_{i \neq j \neq k} (\hat{t}_- \hat{t}_+)(i) \otimes \hat{t}_-(j) \otimes \hat{t}_+(k) \\ & + \sum_{i \neq j \neq k \neq \ell} \hat{t}_-(i) \otimes \hat{t}_-(j) \otimes \hat{t}_+(k) \otimes \hat{t}_+(\ell), \end{aligned} \quad (\text{D.5})$$

les éléments de matrice de  $\hat{T}_-^2 \hat{T}_+^2$  entre deux déterminants de Slater  $|\Phi\rangle$  et  $|\Phi'\rangle$  de la base à  $N$  corps constituée d'états appariés ne peuvent être non nuls que dans les trois cas suivants :

– cas diagonal  $|\Phi'\rangle = |\Phi\rangle$  :

$$\langle \Phi | \hat{T}_-^2 \hat{T}_+^2 | \Phi \rangle = 2(Z - 1)(Z - \langle \Phi | \hat{F} | \Phi \rangle) + \frac{1}{2} \langle \Phi | \hat{F} | \Phi \rangle^2 - \langle \Phi | \hat{F} \hat{\rho}_\Phi \hat{F} | \Phi \rangle, \quad (\text{D.6})$$

où l'opérateur à un corps  $\hat{F}$  est défini en termes de l'opérateur densité réduite à un corps  $\hat{\rho}_\Phi$  associé au déterminant de Slater  $|\Phi\rangle$  et des opérateurs d'isospin  $\hat{t}_\pm$  par

$$\hat{F} = \hat{t}_- \hat{\rho}_\Phi \hat{t}_+ + \hat{t}_+ \hat{\rho}_\Phi \hat{t}_-; \quad (\text{D.7})$$

– excitation relative 2p2h  $|\Phi'\rangle = \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\beta^\dagger \hat{a}_b \hat{a}_a |\Phi\rangle$  :

$$\langle \Phi | \hat{T}_-^2 \hat{T}_+^2 | \Phi' \rangle = 4 \left[ \left( Z - 1 - \frac{1}{2} \langle \Phi | \hat{F} | \Phi \rangle \right) \langle ab | \hat{G} | \widetilde{\alpha\beta} \rangle + \langle ab | \hat{F} \otimes \hat{F} | \widetilde{\alpha\beta} \rangle + \langle ab | \hat{F} \hat{\rho}_\Phi \hat{G} | \widetilde{\alpha\beta} \rangle \right], \quad (\text{D.8})$$

avec l'opérateur à 2 corps  $\hat{G} = \hat{t}_- \otimes \hat{t}_+ + \hat{t}_+ \otimes \hat{t}_-$ , dont le produit par  $\hat{F} \hat{\rho}_\Phi$  doit être compris comme  $(\hat{F} \hat{\rho}_\Phi \otimes 1 + 1 \otimes \hat{F} \hat{\rho}_\Phi) \hat{G}$ , et  $|\widetilde{\alpha\beta}\rangle = |\alpha\beta\rangle - |\beta\alpha\rangle$  ;

– excitation relative 4p4h  $|\Phi'\rangle = \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\beta^\dagger \hat{a}_\gamma^\dagger \hat{a}_\delta^\dagger \hat{a}_d \hat{a}_c \hat{a}_b \hat{a}_a |\Phi\rangle$  :

$$\langle \Phi | \hat{T}_-^2 \hat{T}_+^2 | \Phi' \rangle = 4 \langle abcd | (\hat{G} \otimes \hat{G}) + (\hat{t}_- \otimes \hat{t}_-) \otimes (\hat{t}_+ \otimes \hat{t}_+) + (\hat{t}_+ \otimes \hat{t}_+) \otimes (\hat{t}_- \otimes \hat{t}_-) | \widetilde{\alpha\beta\gamma\delta} \rangle, \quad (\text{D.9})$$

avec

$$\begin{aligned} |\widetilde{\alpha\beta\gamma\delta}\rangle &= |\widetilde{\alpha\beta}\rangle \otimes |\widetilde{\gamma\delta}\rangle - |\widetilde{\alpha\gamma}\rangle \otimes |\widetilde{\beta\delta}\rangle + |\widetilde{\alpha\delta}\rangle \otimes |\widetilde{\beta\gamma}\rangle \\ &\quad + |\widetilde{\beta\gamma}\rangle \otimes |\widetilde{\alpha\delta}\rangle - |\widetilde{\beta\delta}\rangle \otimes |\widetilde{\alpha\gamma}\rangle + |\widetilde{\gamma\delta}\rangle \otimes |\widetilde{\alpha\beta}\rangle. \end{aligned} \quad (\text{D.10})$$

# Références et publications

- [Anguiano01] M. Anguiano, J. L. Egido and L. M. Robledo, Nucl. Phys. A **683**, 227 (2001).
- [Bartel82] J. Bartel, P. Quentin, M. Brack, C. Guet and H.-B. Hakansson, Nucl. Phys. A **386**, 79 (1982).
- [Beiner75] M. Beiner, H. Flocard and Nguyen Van Giai, Nucl. Phys. A **238**, 29 (1975).
- [Bjornholm80] S. Bjornholm and J. E. Lynn, Rev. Mod. Phys. **52**, 725 (1980).
- [Bloch58a] C. Bloch, Nucl. Phys. **6**, 329 (1958).
- [Bloch58b] C. Bloch and J. Horowitz, Nucl. Phys. **8**, 91 (1958).
- [Bochnacki65] Z. Bochnacki and S. Ogaza, Nucl. Phys. **69**, 186 (1965).
- [Bogner03] S. K. Bogner, T. T. S. Kuo and A. Schwenk, Phys. Rep. **386**, 1 (2003).
- [Bohr67] Å. Bohr, J. Damgård and B. R. Mottelson, *Nuclear structure* (North Holland, Amsterdam, 1967).
- [Bohr69] Å. Bohr and B. R. Mottelson, in *Nuclear structure*, volume 2, p. 304 (Benjamin, New York, 1969).
- [Bonche87] P. Bonche, H. Flocard and P.-H. Heenen, Nucl. Phys. A **467**, 115 (1987).
- [Bonneau07] L. Bonneau, P. Quentin and K. Sieja, Phys. Rev. C **76**, 014304 (2007).
- [Bonneau11] L. Bonneau, J. L. Bloas, P. Quentin and N. Minkov, Int. J. Mod. Phys. E **20**, 252 (2011).
- [Bonneau12] L. Bonneau, P. Quentin, N. Minkov, J. Bartel and J. L. Bloas, in *Structure of complex nuclei*, edited by A. Georgieva and N. Minkov, p. 164 (Heron Press, Sofia, 2012).
- [Brandow67] B. H. Brandow, Rev. Mod. Phys. **39**, 771 (1967).
- [Brémond66] B. Brémond, Nucl. Phys. **77**, 559 (1966).
- [Brenner90] D. S. Brenner, C. Wesselborg, R. F. Casten, D. D. Warner and J.-Y. Zhang, Phys. Lett. B **243**, 1 (1990).
- [Browne03] E. Browne, Nucl. Data Sheets **98**, 665 (2003).
- [Brueckner58] K. A. Brueckner, J. L. Gammel and H. Weitzner, Phys. Rev. **110**, 431 (1958).
- [Caurier94] E. Caurier, A. P. Zuker, A. Poves and G. Martínez-Pinedo, Phys. Rev. C **50**, 225 (1994).
- [Caurier95] E. Caurier, J. L. Egido, G. Martínez-Pinedo, A. Poves, J. Retamosa, L. M. Robledo and A. P. Zuker, Phys. Rev. Lett. **75**, 2466 (1995).
- [Caurier05] E. Caurier, G. Martínez-Pinedo, F. Nowacki, A. Poves and A. P. Zuker, Rev. Mod. Phys. **77**, 427 (2005).

- [Chabanat98] E. Chabanat, P. Bonche, P. Haensel, J. Meyer and R. Schaeffer, Nucl. Phys. A **635**, 231 (1998).
- [Chemtob69] M. Chemtob, Nucl. Phys. A **123**, 449 (1969).
- [Coraggio03] L. Coraggio, N. Itaco, A. Covello, A. Gargano and T. T. S. Kuo, Phys. Rev. C **68**, 034320 (2003).
- [Dean03] D. J. Dean and M. Hjorth-Jensen, Rev. Mod. Phys. **75**, 607 (2003).
- [Dechargé80] J. Dechargé and D. Gogny, Phys. Rev. C **21**, 1568 (1980).
- [Dufour96] M. Dufour and A. P. Zucker, Phys. Rev. C **54**, 1641 (1996).
- [Eisenberg72] J. M. Eisenberg and W. Greiner, *Microscopic Theory of the Nucleus* (North-Holland, Amsterdam, 1972).
- [Engel75] J. Engel, D. M. Brink, K. Goeke, S. J. Krieger and D. Vautherin, Nucl. Phys. A **249**, 215 (1975).
- [Flocard73] H. Flocard, P. Quentin, A. K. Kerman and D. Vautherin, Nucl. Phys. A **203**, 433 (1973).
- [Goldstone57] Goldstone, Proc. Phys. Soc. (London) A **239**, 267 (1957).
- [Goodman72] A. L. Goodman, Nucl. Phys. A **186**, 475 (1972).
- [Goodman74] A. L. Goodman, Nucl. Phys. A **230**, 466 (1974).
- [Hao12] T. Hao, P. Quentin and L. Bonneau, Phys. Rev. C **86**, 064307 (2012).
- [Hellemans12] V. Hellemans, P.-H. Heenen and M. Bender, Phys. Rev. C **85**, 014326 (2012).
- [Henley79] E. M. Henley and G. A. Miller, in *Mesons in nuclei*, p. 405 (North-Holland, Amsterdam, 1979).
- [Koh13] M. H. Koh, L. Bonneau and P. Quentin, *Fission barriers of odd-mass nuclei within the HF-BCS and HTDA approaches* (à paraître dans EPJ Web of Conferences, 2013).
- [Lacombe80] M. Lacombe, B. Loiseau, J. M. Richard, R. V. Mau, J. Côté, P. Pirès and R. de Tourreil, Phys. Rev. C **21**, 861 (1980).
- [Lacroix09] D. Lacroix, T. Duguet and M. Bender, Phys. Rev. C **79**, 044318 (2009).
- [Lafchiev10] H. Lafchiev, J. Libert, P. Quentin and T. L. Hà, Nucl. Phys. A **845**, 33 (2010).
- [Lanczos50] C. Lanczos, J. Res. Natl. Bur. Stand. **45**, 252 (1950).
- [Le Bloas11a] J. Le Bloas, *Mélange d'isospin et désintégration  $\beta$* , Ph.D. thesis, Université Bordeaux 1 (2011).
- [Le Bloas11b] J. Le Bloas, L. Bonneau, P. Quentin and J. Bartel, Int. J. Mod. Phys. E **20**, 274 (2011).
- [Le Bloas11c] J. Le Bloas, Meng Hock Koh, P. Quentin, L. Bonneau and J. I. A. Ithnin, Phys. Rev. C **84**, 014310 (2011).
- [Le Bloas12] J. Le Bloas, L. Bonneau, P. Quentin, J. Bartel and D. D. Strottman, Phys. Rev. C **86**, 034332 (2012).
- [Lenzi96] S. M. Lenzi and D. R. Napoli et al., Z. Phys. A **354**, 117 (1996).
- [Lesinski07] T. Lesinski, M. Bender, K. Bennaceur, T. Duguet and J. Meyer, Phys. Rev. C **76**, 014312 (2007).



- [Lipparini77] E. Lipparini, S. Stringari and M. Traini, Nucl. Phys. A **293**, 29 (1977).
- [Löwdin55] P.-O. Löwdin, Phys. Rev. **97**, 1490 (1955).
- [Machleidt87] R. Machleidt, K. Holinde and C. Elster, Phys. Rep. **149**, 1 (1987).
- [Moshinsky59] M. Moshinsky, Nucl. Phys. **13**, 104 (1959).
- [Naidja10] H. Naidja, P. Quentin, T. L. Hà and D. Samsøen, Phys. Rev. C **81**, 044320 (2010).
- [Nilsson61] S. G. Nilsson and O. Prior, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. **32**, No. 16 (1961).
- [Okubo58] S. Okubo and R. E. Marshak, Ann. Phys. **4**, 166 (1958).
- [Passler76] K.-H. Passler, Nucl. Phys. A **257**, 253 (1976).
- [Pastore12] A. Pastore, D. Davesne, Y. Lallouet, M. Martini, K. Bennaceur and J. Meyer, Phys. Rev. C **85**, 054317 (2012).
- [Pastore13] A. Pastore, D. Davesne, K. Bennaceur, J. Meyer and V. Hellemans, Phys. Scr. **T154**, 1 (2013).
- [Perez08] S. Perez and L. M. Robledo, Phys. Rev. C **78**, 014304 (2008).
- [Perlinska04] E. Perlinska, S. G. Rohozinski, J. Dobaczewski and W. Nazarewicz, Phys. Rev. C **69**, 014316 (2004).
- [Petrovici99] A. Petrovici, K. W. Schmid and A. Faessler, Nucl. Phys. A **647**, 197 (1999).
- [Pillet02] N. Pillet, P. Quentin and J. Libert, Nucl. Phys. A **697**, 141 (2002).
- [Pillet08] N. Pillet, J.-F. Berger and E. Caurier, Phys. Rev. C **78**, 024305 (2008).
- [Poves98] A. Poves and G. Martinez-Pinedo, Phys. Lett. B **430**, 203 (1998).
- [Quentin72] P. Quentin, J. Phys. France **33**, 457 (1972).
- [Quentin10] P. Quentin, L. Bonneau, N. Minkov and D. Samsøen, Int. J. Mod. Phys. E **19**, 611 (2010).
- [Ring80] P. Ring and P. Schuck, *The Nuclear Many-Body Problem* (Springer, Berlin, 1980).
- [Sadoudi13] J. Sadoudi, M. Bender, K. Bennaceur, D. Davesne, R. Jodon and T. Duguet, Phys. Scr. **T154**, 014013 (2013).
- [Satuła97a] W. Satuła, D. J. Dean, J. Gary, S. Mizutori and W. Nazarewicz, Phys. Lett. B **407**, 103 (1997).
- [Satuła97b] W. Satuła and R. Wyss, Phys. Lett. B **393**, 1 (1997).
- [Satuła00] W. Satuła and R. Wyss, Nucl. Phys. A **676**, 120 (2000).
- [Satuła01a] W. Satuła and R. Wyss, Phys. Rev. Lett. **87**, 052504 (2001).
- [Satuła01b] W. Satuła and R. Wyss, Phys. Rev. Lett. **86**, 4488 (2001).
- [Satuła10] W. Satuła, J. Dobaczewski, W. Nazarewicz and M. Rafalski, Phys. Rev. C **81**, 054310 (2010).
- [Satuła12] W. Satuła, J. Dobaczewski, W. Nazarewicz and T. R. Werner, Phys. Rev. C **86**, 054316 (2012).
- [Sieja07a] K. Sieja, *Extended approach to correlations beyond mean field in atomic nuclei*, Ph.D. thesis, Université Bordeaux 1 (2007).

- [Sieja07b] K. Sieja, T. L. Ha, P. Quentin and A. Baran, *Int. J. Mod. Phys. E* **16**, 289 (2007).
- [Skyrme59] T. H. R. Skyrme, *Nucl. Phys.* **9**, 615 (1959).
- [Slater51] J. C. Slater, *Phys. Rev.* **81**, 385 (1951).
- [Soloviev61] V. G. Soloviev, *Kgl. Dan. Vid. Selsk. Mat. Fys. Skr.* **1**, No. 11 (1961).
- [Sprung79] D. W. L. Sprung, S. . G. Lie, M. Vallières and P. Quentin, *Nucl. Phys. A* **326**, 37 (1979).
- [Stoks94] V. G. J. Stoks, R. A. M. Klomp, C. P. F. Terheggen and J. J. de Swart, *Phys. Rev. C* **49**, 2950 (1994).
- [Stringari76] S. Stringari, R. Leonardi and D. M. Brink, *Nucl. Phys. A* **269**, 87 (1976).
- [Towner10a] I. S. Towner and J. C. Hardy, *Rep. Prog. Phys.* **73**, 046301 (2010).
- [Towner10b] I. S. Towner and J. C. Hardy, *Phys. Rev. C* **82**, 065501 (2010).
- [Varshalovich88] D. A. Varshalovich, A. N. Moskalev and V. K. Kherkenskii, *Quantum Theory of Angular Momentum* (World Scientific, Singapore, 1988).
- [Vautherin73] D. Vautherin, *Phys. Rev. C* **7**, 296 (1973).
- [Wahlborn62] S. Wahlborn, *Nucl. Phys.* **37**, 554 (1962).
- [Wapstra03] A. Wapstra, G. Audi and C. Thibault, *Nucl. Phys. A* **729**, 129 (2003).
- [Washiyama12] K. Washiyama, K. Bennaceur, B. Avez, M. Bender, P.-H. Heenen and V. Hellemans, *Phys. Rev. C* **86**, 054309 (2012).
- [Weinberg90] S. Weinberg, *Phys. Lett. B* **251**, 288 (1990).
- [Wiringa95] R. B. Wiringa, V. G. J. Stoks and R. Schiavilla, *Phys. Rev. C* **51**, 38 (1995).
- [Zeng83a] J. Y. Zeng and T. S. Cheng, *Nucl. Phys. A* **405** (1983).
- [Zeng83b] J. Y. Zeng, T. S. Cheng, L. Cheng and C. S. Wu, *Nucl. Phys. A* **411** (1983).