Centre d'Études Nucléaires de Bordeaux – Gradignan

N° d'ordre : 4309
CENBG 2011

THÈSE

PRÉSENTÉE À

L'UNIVERSITÉ BORDEAUX 1

ÉCOLE DOCTORALE DE

SCIENCES PHYSIQUES ET DE L'INGÉNIEUR

par M. JULIEN LE BLOAS

POUR OBTENIR LE GRADE DE

DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ BORDEAUX 1

SPÉCIALITÉ : ASTROPHYSIQUE, PLASMAS, CORPUSCULES

MÉLANGE D'ISOSPIN ET DÉSINTÉGRATION β

Soutenue le 19 septembre 2011

Après avis de MM. H. Goutte — Rapporteurs
N. Van Giai

Devant la commission d'examen formée de :

M.	B. Blank,	Directeur de recherche CNRS, CENBG	Président, rapporteur
MM.	J. Bartel,	Maître de Conférences, Université de Strasbourg	Examinateurs
	G. F. Bertsch,	Professeur, Université de Washington	
	H. Goutte,	Physicienne, GANIL	
	P. Quentin,	Professeur, Université Bordeaux 1	
	N. Van Giai,	Directeur de recherche CNRS, INPO	

Je voudrais en premier lieu remercier sincèrement Philippe Quentin d'avoir dirigé cette thèse. Par son dynamisme, il m'a constamment poussé en avant dans ce travail et a favorisé l'enrichissement de mon expérience scientifique, m'encourageant le plus souvent possible à présenter mon travail en France et à l'étranger. Je le remercie aussi pour toutes les discussions passionnantes durant lesquelles il me sortait de l'impasse à coup d'idées géniales malgré les décalages horaires. Il m'a également énormément éclairé sur bien des aspects conceptuels notamment lors de la rédaction de cette thèse.

Ma plus profonde gratitude s'adresse à Ludovic Bonneau qui a co-dirigé cette thèse. Je le remercie pour sa disponibilité et sa patience intarrissable. Il a toujours été d'une aide très précieuse, me guidant par sa rigueur scientifique, se penchant sur mes problèmes les plus techniques, qu'ils soient formels ou numériques. Je le remercie également pour son amitié et sa générosité, pour toutes les discussions physiques et autres que l'on a eu autour du café quasi-quotidien. Il m'a également été de très bon conseil lorsqu'il s'agissait de gérer des situations de stress ou de fatigue.

Je souhaite remercier l'ensemble des membres du jury, B. Blank d'avoir présidé la soutenance, H. Goutte et N. Van Ciai d'avoir rapporté ce travail et G. F. Bertsch d'avoir fait l'effort de lire mon manuscrit en français et de suivre ma présentation. Chacun d'eux m'a apporté des remarques et des conseils précieux qui m'ont servi dans l'élaboration de la soutenance.

Je souhaite remercier tout particulièrement J. Bartel pour son amitié et son accueil chaleureux. Je le remercie pour son enthousiasme dans le travail, ses échanges fructueux et pour l'attention particulière qu'il a portée à cette thèse. La forme actuelle de ce texte n'aurait pu aboutir sans ses corrections minutieuses.

J'aimerais également remercier l'ensemble des personnes avec qui j'ai travaillé au CENBG dans le cadre de l'enseignement à l'Université Bordeaux 1 : P. Barberet, J.-C. Caillon, J. Labarsouque, P. Gabinski, N. Smirnova...

J'ai eu beaucoup de plaisir a travailler durant ces trois années au CENBG, laboratoire animé par une ambiance très agréable. Les thésards et post-docs que j'y ai cotoyés en sont en grande partie responsables : Pauline, Benoît, Benjamin, Emmanuel, Lise, Lucas, Rémi, Damien, Hao, Houda, Jérémie, Mathieu, Yek Wah, Jérôme et les autres...

Merci également à l'ensemble des membres du laboratoire pour leur sympathie et leur bonne humeur.

Cette liste de remerciements ne serait pas complète sans mentionner ma famille, ma mère, mon père, mon frère.

Enfin, je remercie Valérie, ma compagne, qui m'a supporté et soutenu moralement pendant ces trois années.

Table des matières

Introduction **1**

I Résolution du problème à N corps nucléaire dans l'approche HTDA **3**

1 Construction du champ moyen nucléaire **5**
1.1 L'approximation de Hartree-Fock . . . 5
1.1.1 Principe . . . 5
1.1.2 L'interaction effective phénoménologique de Skyrme . . . 8
1.2 Traitement des corrélations d'appariement avec BCS . . . 12
1.2.1 La transformation de Bogoliubov-Valatin . . . 13
1.2.2 Les équations BCS . . . 14
1.3 Traitement de l'interaction coulombienne dans HF . . . 15
1.3.1 Calcul des éléments de matrice . . . 17
1.3.2 Tests de la validité de l'approximation de Slater . . . 20

2 L'approche HTDA **27**
Introduction . . . 27
2.1 Formalisme . . . 28
2.1.1 Principe général de la méthode . . . 28
2.1.2 Le hamiltonien HTDA . . . 29
2.1.3 Description des corrélations d'appariement avec l'interaction $\hat{V}_\delta$ . . . 31
2.2 Construction de la base à N corps . . . 34
2.2.1 Choix du schéma de troncation . . . 34
2.2.2 Contraintes de symétrie . . . 36
2.2.3 Excitations de paires pour l'appariement . . . 37

3 La physique de l'appariement dans HTDA **41**
Introduction . . . 41
3.1 Description d'une fonction d'onde corrélée HTDA . . . 42
3.2 Structure en isospin de la fonction d'onde corrélée . . . 43
3.3 Convergence de la fonction d'onde corrélée . . . 47
3.4 Influence de l'énergie de coupure E_0^* . . . 50

II Brisure d'isospin dans les noyaux atomiques **53**

4 La symétrie d'isospin et sa brisure **55**
4.1 La symétrie d'isospin : formalisme . . . 55
4.1.1 Formalisme $\mathbf{SU}(2)$ . . . 55
4.1.2 Système de plusieurs nucléons . . . 57

4.2 Estimation du degré de brisure d'isospin . . . 58
4.2.1 Introduction . . . 58
4.2.2 Techniques usuelles de projection de moments angulaires . . . 59
4.2.3 Calcul des probabilités d'isospin par une approche matricielle . . . 60
4.2.4 Projection approchée d'isospin . . . 62
4.3 L'opérateur $\hat{\mathbf{T}}^{2n}$ . . . 65
4.3.1 L'opérateur $\hat{\mathbf{T}}^{2n}$ en fonction de $\hat{T}_-^\ell \hat{T}_+^\ell$ . . . 65
4.3.2 Décomposition de l'opérateur $\hat{T}_-^\ell \hat{T}_+^\ell$ . . . 66
4.3.3 Applications à $\hat{\mathbf{T}}^2$ et $\hat{\mathbf{T}}^4$ . . . 67

5 Le mélange d'isospin dans une solution HTDA **69**
5.1 Brisure non physique d'isospin liée à la méthode . . . 69
5.1.1 Brisure non physique et restauration d'isospin dans l'approximation HF . . . 70
5.1.2 Brisure non physique d'isospin dans HTDA . . . 71
5.2 Corrélations d'appariement et approximation DCA . . . 73
5.2.1 Limite d'invariance d'isospin pour les fonctions d'ondes à un corps . . . 73
5.2.2 Brisure de la symétrie d'isospin et approximation DCA . . . 75
5.2.3 Approximation diagonale et mélange d'isospin approché . . . 76
5.2.4 Éléments de matrice de $\hat{\mathbf{T}}^2$ dans la base $\mathcal{B}_T$ . . . 79
5.2.5 Éléments de matrice de $\hat{H}$ dans la base $\mathcal{B}_T$ . . . 81
5.3 Invariance de la base HTDA $\mathcal{B}$ et approximation DCA généralisée . . . 83

6 Mélange d'isospin dans les noyaux $N = Z$ **85**
Introduction . . . 85
6.1 Aspects numériques . . . 86
6.2 Mélange d'isospin dans le vide $|\Phi_0\rangle$ . . . 86
6.2.1 Évolution en fonction Z . . . 87
6.2.2 Impact du traitement de l'interaction de Coulomb . . . 88
6.3 Influence des corrélations d'appariement sur α^2 . . . 88
6.3.1 Structure des fonctions d'onde corrélées . . . 88
6.3.2 Mélange d'isospin des fonctions d'onde corrélées . . . 90
6.4 Interprétation des résultats avec la DCA . . . 95
6.4.1 Contribution des différents ordres d'excitation . . . 95
6.4.2 Détail des simples paires . . . 97
6.4.3 Impact du traitement de l'interaction coulombienne . . . 102

III Application à l'étude des transitions β de Fermi $0^+ \to 0^+$ **103**

7 Décroissance β nucléaire et test du Modèle Standard **105**
Introduction . . . 106
7.1 Phénoménologie de l'interaction faible . . . 107
7.1.1 La théorie de Fermi . . . 107
7.1.2 Brisure de la symétrie de parité et modèle $V-A$ . . . 109
7.1.3 Propriétés du courant hadronique – hypothèse CVC . . . 111
7.1.4 La règle d'or de Fermi . . . 112
7.2 Classification des interactions faibles . . . 114
7.2.1 Interactions faibles purement leptoniques . . . 114
7.2.2 Interactions faibles semi-leptoniques . . . 114
7.2.3 Théorie de Cabibbo et matrice CKM . . . 115

7.3 La décroissance β nucléaire . . . 116
7.3.1 Prise en compte des effets du milieu . . . 116
7.3.2 Autres corrections . . . 118
7.4 Aspects expérimentaux . . . 121
7.4.1 Mesures des énergies de transitions Q_β . . . 122
7.4.2 Mesures des demi-vies totales $T_{1/2}$ . . . 122
7.4.3 Mesure des rapports d'embranchement BR . . . 123

8 Calcul de la correction δ_C dans HTDA **125**
Introduction . . . 125
8.1 Quel modèle pour la description de la transition ? . . . 126
8.1.1 Position du problème . . . 126
8.1.2 Choix du modèle . . . 128
8.2 Résultats . . . 132
8.2.1 Description des fonctions d'onde des noyaux initial et final . . . 133
8.2.2 Mélange d'isospin et correction δ_C . . . 138
8.2.3 Comparaison avec d'autres modèles . . . 147

Conclusion et perspectives **151**

Annexes **153**

A Comparaison de déterminants de Slater **155**
A.1 Convention d'écriture . . . 155
A.2 Quelques définitions . . . 156
A.3 Calcul de φ_{ij} . . . 157
A.4 Expression finale du facteur de phase . . . 159
A.4.1 Cas général . . . 159
A.4.2 Cas où $|\Phi_j\rangle = |\Phi_i\rangle$: vérification . . . 160
A.4.3 Cas de la conservation du nombre de neutrons et du nombre de protons . . . 160

B Calcul d'éléments de matrice à N corps **161**
B.1 Éléments de matrice d'opérateurs à p corps : cas général . . . 161
B.1.1 Définitions . . . 161
B.1.2 Élément de matrice d'un opérateur à p corps entre $|\Phi\rangle$ et $|\Phi'\rangle$ . . . 163
B.2 Éléments de matrice de produits normaux d'opérateurs . . . 165
B.2.1 Produit normal d'opérateur à 1 corps . . . 165
B.2.2 Produit normal d'opérateur à 2 corps . . . 166

C Représentation des états individuels HF **169**
C.1 La base B.O.H.S.A. . . . 169
C.2 Décomposition des états HF dans la B.O.H.S.A. . . . 171
C.3 Propriétés de symétrie de $\Phi_i(\mathbf{r}, \sigma)$ par renversement du temps . . . 171
C.3.1 État individuel de fermion et renversement du sens du temps . . . 171
C.3.2 Application aux fonctions $f_i^{\pm}(z, \rho)$ . . . 172

D Compléments sur l'isospin **173**
D.1 Décomposition de $(\hat{T}_-\hat{T}_+)^k$ en puissances partagées 173
D.2 Éléments de matrice de $\hat{T}_-\hat{T}_+$ et de $\hat{T}_-^2\hat{T}_+^2$ dans la base HTDA 176
D.2.1 Éléments de matrice de $\hat{T}_-\hat{T}_+$ 176
D.2.2 Éléments de matrice de $\hat{T}_-^2\hat{T}_+^2$ 177

Bibliographie **181**

Introduction

La physique de l'interaction faible au niveau nucléaire fournit un moyen puissant de tester les prédictions du Modèle Standard des interactions fondamentales entre les particules élémentaires. C'est le cas notamment de la décroissance double β sans émission de neutrinos ($2\beta0\nu$) et des transitions β super-permises de Fermi $0^+ \rightarrow 0^+$. Ces dernières permettent notamment d'éprouver des hypothèses comme celle de la conservation du courant vectoriel dans l'interaction faible (hypothèse CVC) ou encore celle de l'unitarité de la matrice de Cabibbo, Kobayashi et Maskawa (matrice CKM) comme une conséquence de l'hypothèse de l'existence de seulement trois familles de quarks dans la nature.

L'exemple de ces transitions montre que la structure nucléaire peut jouer un rôle important dans des tests du Modèle Standard. Sur le plan théorique, un paramètre clé de telles études est la correction de brisure d'isospin δ_C à l'élément de matrice de transition de Fermi. Cette correction est connue pour être faible (quelques dixièmes de pourcent) et son évaluation précise nécessite l'utilisation d'approches microscopiques sophistiquées.

Plusieurs études théoriques ont été menées pour calculer cette correction mais certaines questions restent cependant sans réponse. La principale interrogation qui anime notre travail est de connaître le rôle des corrélations d'appariement dans cette correction (valeur et mécanismes).

Comme son nom l'indique, la correction δ_C mesure l'impact de la brisure de la symétrie d'isospin sur la valeur de l'élément de matrice de la transition β de Fermi super-permise. Dans la nature, les deux sources possibles responsables de cette brisure sont les interactions fortes et électromagnétiques (l'interaction faible conserve l'isospin au sens de l'opérateur $\hat{\mathbf{T}}^2$ même si elle ne conserve pas T_z). Au niveau nucléaire, la composante de l'interaction forte nucléon–nucléon qui brise l'isospin est très faible devant sa composante isoscalaire. Cette source est donc souvent négligée. Concernant l'interaction électromagnétique, une excellente approximation est donnée par la force coulombienne en considérant les nucléons ponctuels.

Les différents modèles de structure existants peuvent être classés en trois catégories : les approches de type modèle en couches, celles de type champ moyen et au-delà et les approches basées sur le concept de goutte liquide chargée. Les approches de type modèle en couches fournissent une description très riche des corrélations avec des fonctions d'onde à un corps qui sont solutions d'un champ moyen peu réaliste comme l'oscillateur harmonique. À l'inverse, les approches de type champ moyen fournissent une excellente description du potentiel moyen à un corps. La prise en compte des corrélations liées aux symétries brisées par le champ moyen est en général peu aisée. Enfin, les approches dynamiques de type « goutte liquide » ne peuvent prétendre fournir une évaluation du mélange d'isospin ou de la correction δ_C avec suffisamment de précision.

Une question fondamentale pour la structure nucléaire est de savoir par quels mécanismes cette brisure est véhiculée, notamment par le biais des corrélations au-delà du champ moyen. Dans ce contexte, en plus de calculer l'apport des corrélations d'appariement au mélange d'isospin, ce travail de thèse a pour but de mettre en évidence les mécanismes de brisure de symétrie d'isospin spécifiques à ce type de corrélations.

Pour tenter de répondre à cette question, il nous faut utiliser une approche qui va au-delà du

champ moyen dans la description des corrélations d'appariement et qui limite au maximum tout effet non physique de brisure de cette symétrie. Un pré-requis nécessaire est une approche qui préserve le nombre de particules dans le système. C'est pourquoi notre choix s'est porté sur l'approche *Highly Truncated Diagonalization Approach* (HTDA) qui conserve, par construction, le nombre de neutrons et de protons (contrairement aux approches usuelles comme Hartree-Fock+Bardeen-Cooper-Schrieffer (HF+BCS) ou HF-Bogoliubov qui nécessitent une projection sur le nombre de particules). De plus cette approche fournit une description simple et une interprétation claire des corrélations au-delà du champ moyen dans une approche de type Modèle en Couches tronqué. Nous l'appliquerons donc aux corrélations d'appariement.

Avant d'aborder le calcul et l'étude de la correction δ_C dans le cadre d'une transition entre deux états nucléaires, nous nous intéresserons aux mécanismes de brisure d'isospin au sein d'un seul noyau. Le degré de brisure de cette symétrie est caractérisé par le paramètre de mélange d'isospin α^2. Les questions qui nous motivent tout d'abord sont les suivantes :

- Quel est l'impact du traitement de l'interaction de Coulomb sur le paramètre α^2 ?
- Ce paramètre est connu pour être faible et son évaluation a longtemps reposé sur une approximation de faible mélange d'isospin d'une fonction d'onde nucléaire. Cette approximation est-elle réellement justifiée et, si oui, dans quelle mesure ?
- Enfin, quel est l'apport des corrélations d'appariement au-delà du champ moyen sur ce paramètre de mélange d'isospin et par quels mécanismes se manifeste-t-il ?

Ce travail de thèse a pour but de répondre à ces questions et se fera en trois temps.

Dans une première partie, nous présenterons les approches de champ moyen que sont HF et HF+BCS. Puis nous présenterons le formalisme de l'approche HTDA. Nous détaillerons également les caractéristiques de cette approche vis-à-vis du traitement des corrélations d'appariement.

Dans un deuxième temps, nous nous intéresserons à la brisure de symétrie d'isospin dans une fonction d'onde corrélée. Nous tenterons alors de répondre aux diverses questions mentionnées ci-dessus à travers l'étude de quatre noyaux $N = Z$ pairs-pairs, le ^{28}Si, le ^{48}Cr, le ^{68}Se (ses deux minima oblate et prolate seront considérés) et le ^{76}Sr.

Enfin, dans la dernière partie, nous nous intéresserons à l'évaluation de la correction δ_C dans HTDA appliquée au cas de la transition super-permise β^+ du noyau impair-impair ^{50}Mn. L'étude de cette correction sera mise en lien avec les informations déduites des études des parties I et II.

Première partie

Résolution du problème à N corps nucléaire dans l'approche HTDA

Chapitre 1

Construction du champ moyen nucléaire

Contenu du chapitre

1.1 L'approximation de Hartree-Fock
- 1.1.1 Principe
- 1.1.2 L'interaction effective phénoménologique de Skyrme
  - ◦ Description
  - ◦ La fonctionnelle énergie de Skyrme

1.2 Traitement des corrélations d'appariement avec BCS
- 1.2.1 La transformation de Bogoliubov-Valatin
- 1.2.2 Les équations BCS

1.3 Traitement de l'interaction coulombienne dans HF
- 1.3.1 Calcul des éléments de matrice
  - ◦ Détails de la méthode
  - ◦ Calcul des intégrales $\mathcal{I}^{\beta_z,\beta_\perp}_{k,\ell,m,n}$
- 1.3.2 Tests de la validité de l'approximation de Slater
  - ◦ Position du problème
  - ◦ Étude en fonction du nombre de particules
  - ◦ Étude en fonction de la déformation
  - ◦ Impact sur les différences d'énergie de liaison

1.1 L'approximation de Hartree-Fock

1.1.1 Principe

Du fait du principe d'exclusion de Pauli, le libre parcours moyen des nucléons dans le noyau est du même ordre que la taille du noyau. Cette constatation est à la base de l'approximation de particules indépendantes qui est connue pour être une très bonne approximation à en juger par les succès du Modèle en Couches nucléaire (voir par exemple [1]). Tous les nucléons du noyau peuvent alors être considérés comme indépendants les uns des autres mais toutefois confinés dans un potentiel moyen généré par l'ensemble du système.

Plutôt que de supposer une forme analytique simple de ce champ moyen à un corps comme cela est fait traditionnellement dans le Modèle en Couches, l'approximation de Hartree-Fock (HF) est une procédure de construction de ce potentiel à un corps à partir de la force à deux corps $\hat{V}$ au moyen d'un principe variationnel.

Le principe variationnel de Ritz stipule que la résolution de l'équation de Schrödinger

$$\hat{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle \tag{1.1}$$

est équivalente à la minimisation de la fonctionnelle énergie $E[\Psi]$

$$\delta E[\Psi] = 0 \qquad \text{avec} \qquad E[\Psi] = \frac{\langle\Psi|\hat{H}|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle}\,, \tag{1.2}$$

où $\hat{H}$ est le hamiltonien du système.

Compte tenu du succès de l'approximation de particules indépendantes, les fonctions d'ondes d'essai pour l'application de ce principe variationnel sont, dans le cadre de l'approximation de HF, des déterminants de Slater à A fermions, définis par

$$|\Phi\rangle = \sqrt{A!}\,\hat{\mathcal{A}}\,|\phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{A!}}\sum_P \varepsilon(P)\,\hat{P}\,|\phi_1\phi_2\cdots\phi_A\rangle \tag{1.3}$$

où $\hat{\mathcal{A}}$ est l'antisymétriseur et $\varepsilon(P)$ est la signature de la permutation P (voir annexe B).

L'application du principe variationnel de Ritz permet ainsi de déterminer les fonctions d'onde à un corps $\{\phi_k\}$ définissant l'état HF $|\Phi\rangle$ telles que $\delta E^{\text{HF}}[\Phi] = 0$. L'énergie E^{HF} est appelée énergie de HF. Celle-ci est définie par

$$E^{\text{HF}} = \langle\Phi|\hat{H}|\Phi\rangle \tag{1.4}$$

où

$$\hat{H} = \hat{K} + \hat{V} = \sum_{ij}\langle i|\hat{k}|j\rangle\hat{\text{a}}_i^\dagger\hat{\text{a}}_j + \frac{1}{4}\sum_{jik\ell}\langle ij|\hat{v}|\widetilde{k\ell}\rangle\hat{\text{a}}_i^\dagger\hat{\text{a}}_j^\dagger\hat{\text{a}}_\ell\hat{\text{a}}_k\,. \tag{1.5}$$

En définissant la densité réduite $\hat{\rho}$ à un corps pour l'état HF $|\Phi\rangle$ par

$$\hat{\rho}_{ij} = \langle\Phi|\hat{\text{a}}_j^\dagger\hat{\text{a}}_i|\Phi\rangle\,, \tag{1.6}$$

l'énergie de HF est donc une fonctionnelle de la densité

$$E^{\text{HF}} \equiv E^{\text{HF}}[\rho] = \text{Tr}(k\rho) + \frac{1}{2}\text{TrTr}(\rho\widetilde{v}\rho)\,. \tag{1.7}$$

Dans la base canonique $\{\phi_k\}$ (base qui diagonalise la densité $\hat{\rho}$), on obtient ainsi

$$E^{\text{HF}} = \sum_{i=1}^{A}\langle\phi_i|\hat{k}|\phi_i\rangle + \frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{A}\langle\phi_i\phi_j|\hat{v}|\widetilde{\phi_i\phi_j}\rangle\,. \tag{1.8}$$

Pendant le processus variationnel, on souhaite également contraindre la densité $\hat{\rho}$ à satisfaire deux propriétés :

– Rester un projecteur : $\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$,

– $|\Phi\rangle$ doit rester un déterminant de Slater de A particules : $\text{Tr}(\rho) = A$.

On va alors effectuer un principe variationnel sur une nouvelle énergie $E'[\rho]$, déduite de E^{HF} par l'utilisation de multiplicateurs de Lagrange scalaire λ pour $\text{Tr}(\rho)$ et tensoriel Λ_{ij} pour la matrice $(\rho^2-\rho)_{ij}$,

$$E'[\rho] = E^{\text{HF}}[\rho] - \lambda\text{Tr}(\rho) - \sum_{ij}\Lambda_{ij}(\rho^2-\rho)_{ji} \tag{1.9}$$

$$E'[\rho] = E^{\text{HF}}[\rho] - \lambda\text{Tr}(\rho) - \text{Tr}\left[\Lambda(\rho^2-\rho)\right] \tag{1.10}$$

La dérivée fonctionnelle de l'énergie $E'[\rho]$ conduit donc à

$$\left(\frac{\delta E'[\rho]}{\delta\rho}\right)^T = \hat{h}_{\rm HF} - \lambda - (\Lambda\rho + \rho\Lambda) + \Lambda = 0 \tag{1.11}$$

où,

$$\hat{h}_{\rm HF} = \hat{k} + {\rm Tr}(\rho\widetilde{v}) = \frac{\delta E^{\rm HF}[\rho]}{\delta\rho} \tag{1.12}$$

est le hamiltonien de HF. En prenant le commutateur de (1.11) avec la densité $\hat{\rho}$ et en utilisant sa propriété d'idempotence ($\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$), on aboutit à la condition de Brillouin

$$\left[\hat{h}_{\rm HF}, \hat{\rho}\right] = 0\,. \tag{1.13}$$

Cette équation indique que la base des états propres de la densité $\{\phi_k\}$ (la base canonique) forme une base pour le hamiltonien de HF. On associera à chaque ϕ_k une énergie individuelle ϵ_k

$$\hat{h}_{\rm HF}\phi_k = \epsilon_k\phi_k\,. \tag{1.14}$$

La méthode HF permet donc de remplacer la résolution d'un problème à A particules interagissantes par un système de A équations non linéaires mais indépendantes basées sur un potentiel moyen auto-cohérent.

Dans la base canonique, les éléments de matrice du hamiltonien de HF seront donnés par

$$\langle\phi_i|\hat{h}_{\rm HF}|\phi_j\rangle = \langle\phi_i|\hat{k}|\phi_j\rangle + \langle\phi_i\phi_k|\hat{v}|\widetilde{\phi_j\phi_k}\rangle\,. \tag{1.15}$$

En représentation position, les équations de HF, équivalentes à (1.13), se ramènent à un système d'équations aux valeurs propres non linéaire satisfait par les fonctions d'ondes à un corps ϕ_k

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\hat{\Delta} + \hat{V}_{\rm H}(\mathbf{r})\right\}\phi_k(\mathbf{r}) + \int d\mathbf{r}'\,\hat{V}_{\rm F}(\mathbf{r},\mathbf{r}')\,\phi_k(\mathbf{r}') = \epsilon_k\phi_k(\mathbf{r})\,, \tag{1.16}$$

où l'on a distingué deux contributions du potentiel de HF, le champ local de Hartree

$$\hat{V}_{\rm H}(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{r}'\,v(\mathbf{r},\mathbf{r}')\sum_{i=1}^{A}|\phi_i(\mathbf{r}')|^2 = \int d\mathbf{r}'\,v(\mathbf{r},\mathbf{r}')\,\rho(\mathbf{r}')\,, \tag{1.17}$$

et le champ non local d'échange (ou de Fock), s'exprimant en fonction de la densité non locale $\rho(\mathbf{r},\mathbf{r}')$,

$$\hat{V}_{\rm F}(\mathbf{r},\mathbf{r}') = -v(\mathbf{r},\mathbf{r}')\sum_{i=1}^{A}\phi_i^*(\mathbf{r}')\phi_i(\mathbf{r}) = -v(\mathbf{r},\mathbf{r}')\,\rho(\mathbf{r},\mathbf{r}')\,. \tag{1.18}$$

Cette équation est non linéaire puisque la détermination du hamiltonien de HF passe par la connaissance de la densité réduite $\hat{\rho}$ qui dépend elle-même des fonctions d'ondes propres de ce hamiltonien.

La résolution de telles équations non linéaires se fait numériquement de façon itérative. L'idée générale est de partir d'un champ moyen à un corps simple mais néanmoins relativement réaliste, comme un potentiel de Woods-Saxon par exemple. On en déduit les fonctions propres à un corps d'un tel potentiel ϕ_k que l'on insère dans (1.16). La résolution de (1.16) nous donne un nouveau potentiel de HF différent du potentiel de départ que l'on espère un peu plus réaliste. On réitère ainsi le processus jusqu'à convergence de certaines observables comme l'énergie totale du système, les rayons neutron et proton, le moment quadrupolaire etc. Un critère de convergence plus sûr peut être fait sur les éléments

de matrice de la densité réduite $\hat{\rho}$. La rapidité de la convergence du processus, si convergence il y a, dépend évidemment du choix du point de départ.

Un tel processus permet donc d'aboutir à une solution dont l'énergie est un minimun local dans l'espace restreint au sous-ensemble des déterminants de Slater. Cette méthode est donc particulièrement bien adaptée à la description d'états fondamentaux.

Si toutefois on souhaite aboutir à une solution caratérisée par une valeur particulière d'un paramètre donné (la déformation par exemple) il faut contraindre le principe variationnel à conserver ce paramètre tout au long du processus auto-cohérent.

Pour notre étude, nous ne considérerons que des noyaux rigides à déformation axiale. Nous serons parfois intéressés par des solutions de déformation fixée. L'élongation du noyau est alors caractérisée par la valeur moyenne de l'opérateur *moment quadrupolaire* $\hat{Q}_{20}$. Pour contraindre la variation, on a alors recours à une contrainte quadratique. Cela revient à appliquer un principe variationnel libre sur la quantité

$$E' = E'[\rho] - \frac{C}{2}\left(\langle \hat{Q}_{20} \rangle - \mu\right)^2 , \tag{1.19}$$

où C et μ sont deux constantes.

1.1.2 L'interaction effective phénoménologique de Skyrme

◦ Description

Un des problèmes majeurs qui complique la résolution du problème à N corps nucléaire est la méconnaissance de l'expression de la force nucléon–nucléon (N-N) effective dans le milieu nucléaire. En 1955, Brueckner proposa une méthode pour construire une telle interaction prenant en compte les effets de milieu à partir d'une force N-N nue [2]. Cette interaction effective est connue sous le nom de matrice G de Brueckner et est utilisée dans le cadre de l'équation de Bethe-Goldstone [3].

À l'heure actuelle il est impossible de dériver, du niveau le plus fondamental (QCD), une expression pour la force nucléon–nucléon (N-N) nue. Ce n'est qu'à partir de certaines données expérimentales, tirées d'expériences de diffusion N-N, que l'on peut extraire quelques propriétés de cette force nue. Plusieurs potentiels de ce type existent aujourd'hui. On peut en citer quelques-uns, les potentiels de Paris [4], Bonn [5], Nijmegen [6], Argonne [7] et CD Bonn [8,9]. La dérivation d'une force effective par une telle méthode a donné naissance à la force V_{UCOM} (*Unitary Correlation Operator Method*) [10,11].

Une autre approche consiste à construire une force effective à partir des potentiels N-N nus cités plus haut à l'aide de groupes de renormalisation (méthode SRG [12]). Les auteurs de la référence [13] ont montré que tous ces potentiels conduisaient à la même force connue sous le nom de $V_{\mathrm{low}\,k}$. Cette force a été testée dans diverses méthodes de résolutions du problème à N corps nucléaire comme *HF+Many-Body Perturbation Theory*, *No-Core Shell Model*, *Coupled Cluster*, *Brückner-HF* etc.

Cependant la mise sur pied de telles forces effectives à partir de potentiels réalistes et leur utilisation dans des calculs auto-cohérents reste aujourd'hui encore une tâche très lourde qui n'est applicable, pour le moment, qu'aux noyaux les plus légers. Historiquement, une tout autre approche a évidemment été développée pour permettre des calculs plus rapides. Il s'agit d'approches phénoménologiques.

La forme de ces interactions est construite empiriquement de façon à respecter les symétries du problème et à reproduire les principales propriétés des noyaux atomiques (énergie de liaison, densité à saturation, rayons, nombres magiques...) et de la matière nucléaire. Ces interactions contiennent alors plusieurs paramètres indéterminés qui sont habituellement ajustés pour reproduire les propriétés des noyaux magiques. Ces interactions phénoménologiques se révèlent être très simples quant à leur

utilisation dans des approches auto-cohérentes de type HF et performantes quant à la qualité des prédictions qu'elles fournissent.

Évidemment, il existe beaucoup d'interactions de cette nature et chacune d'elles possède son domaine de validité et de qualité. Parmi les forces effectives phénoménologiques les plus utilisées aujourd'hui on peut citer la famille des forces de Skyrme [14,15] et la force de Gogny [16] qui sont dépendantes de la densité. Ces deux types de force diffèrent essentiellement par la forme de leur partie centrale. Tandis que la partie centrale des forces de Skyrme est principalement de portée nulle (terme de contact $\hat{\delta}$ auquel s'ajoute des termes correctifs de portée finie), celle de la force de Gogny est de portée finie, représentée par deux gaussiennes.

Dans ce travail, nous avons utilisé l'interaction effective phénoménologique de Skyrme. La forme générale de cette force à deux et trois corps ($\hat{v}_{\rm Sk} = \hat{v}^{(2)}_{\rm Sk} + \hat{v}^{(3)}_{\rm Sk}$) en représentation position est donnée par [17]

$$\begin{aligned}\hat{v}^{(2)}_{\rm Sk}(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) = {} & t_0\,(1+x_0\,\hat{P}^\sigma)\,\hat{\delta}(\mathbf{r}) && \text{(terme central)}\\ & + \tfrac{1}{2}\,t_1\,(1+x_1\,\hat{P}^\sigma)\left[\hat{\delta}(\mathbf{r})\hat{\mathbf{k}}^2 + \hat{\mathbf{k}}'^2\hat{\delta}(\mathbf{r})\right] + t_2\,(1+x_2\,\hat{P}^\sigma)\,\hat{\mathbf{k}}'\cdot\hat{\delta}(\mathbf{r})\hat{\mathbf{k}} && \text{(termes non locaux)}\\ & + {\rm i}W_0\,\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\left[\hat{\mathbf{k}}'\times\hat{\delta}(\mathbf{r})\hat{\mathbf{k}}\right] && \text{(terme spin-orbite)}\end{aligned}$$

et

$$\hat{v}^{(3)}_{\rm Sk}(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_3) = t_3\,\hat{\delta}(\mathbf{r})\,\hat{\delta}(\mathbf{r}') \quad \text{(terme à trois corps de contact)}$$

avec les notations,

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2\ , \quad \mathbf{r}' = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3\ , \tag{1.20}$$

$$\hat{\mathbf{k}} = \frac{1}{2{\rm i}}\,(\boldsymbol{\nabla}_1 - \boldsymbol{\nabla}_2)\ \text{agissant à droite}\ , \quad \hat{\mathbf{k}}' = -\frac{1}{2{\rm i}}\,(\boldsymbol{\nabla}_1 - \boldsymbol{\nabla}_2)\ \text{agissant à gauche} \tag{1.21}$$

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}} = \hat{\boldsymbol{\sigma}}_1 + \hat{\boldsymbol{\sigma}}_2 \quad \text{et l'opérateur d'échange de spin} \quad \hat{P}^\sigma = \frac{1}{2}(\hat{\mathbb{1}} + \hat{\boldsymbol{\sigma}}_1\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}_2)\,. \tag{1.22}$$

Dans le cadre de l'approximation de HF et pour des déterminants de Slater pairs par renversement du sens du temps, il a été montré [17] que le terme de contact à trois corps $\hat{v}^{(3)}_{\rm Sk}$ est équivalent à un terme à deux corps dépendant de la densité

$$\hat{v}^{(3)}_{\rm Sk} \equiv \hat{v}^{(3\to2)}_{\rm Sk} = \frac{1}{6}\,t_3\,\hat{\rho}(\mathbf{R})\,\hat{\delta}(\mathbf{r})\,, \tag{1.23}$$

avec $\mathbf{R} = \frac{1}{2}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)$. Par la suite, ce terme a été généralisé (voir par exemple la référence [18]) pour prendre la forme

$$\hat{v}^{(3\to2)}_{\rm Sk} = \frac{1}{6}\,t_3\,(1+x_3\hat{P}^\sigma)\,\hat{\rho}^\alpha(\mathbf{R})\,\hat{\delta}(\mathbf{r})\,. \tag{1.24}$$

Il a été montré [19] que certaines forces à trois corps présentent une instabilité ferromagnétique contrairement à leur contrepartie à deux corps (1.24). C'est pourquoi cette dernière forme est couramment retenue.

Les valeurs des paramètres t_i, x_i et W_0 ont été ajustées pour reproduire les principales propriétés des états fondamentaux de noyaux sphériques (énergie de liaison, rayons...) par D. Vautherin et D. M. Brink [17, 20] (pour SI et SII). Plus tard, M. Beiner *et al.* ont dérivé une nouvelle paramétrisation, SIII [21] qui est l'une des premières à reproduire convenablement les propriétés statiques des noyaux sur l'ensemble de la charte des nucléides. Parmi les plus utilisées et les plus performantes, on peut citer SIII, SkM* développée par J. Bartel *et al.* [22] pour reproduire les barrières de fission du ^{240}Pu,

	SIII	SkM*	SLy4	SkP
t_0 (MeV.fm^3)	-1128.75	-2645.00	-2488.91	-2931.70
t_1 (MeV.fm^5)	395.00	410.00	486.82	320.62
t_2 (MeV.fm^5)	-95.00	-135.00	-546.39	-337.41
t_3 (MeV.fm$^{(3+3\alpha)}$)	14000.00	15595.0	13777.0	18708.97
x_0	0.450	0.090	0.834	0.29215
x_1	0.0	0.0	-0.344	0.65218
x_2	0.0	0.0	-1.0	-0.53732
x_3	1.0	0.0	1.354	0.18103
α	1	1/6	1.6	1/6
W_0 (MeV.fm^5)	120.0	130.0	123.0	100.0

TABLEAU 1.1 – Quelques paramétrisations de la force de Skyrme.

SkP [23] capable de rendre compte des corrélations d'appariement dans l'approche HF-Bogoliubov (voir par exemple la référence [1]) ou encore SLy4 [24] développée par E. Chabanat *et al.* pour décrire les propriétés spectroscopiques des noyaux loin de la vallée de la stabilité. Les valeurs des paramètres de quelques-unes d'entre elles sont données dans le tableau 1.1.

◦ La fonctionnelle énergie de Skyrme

L'utilisation de la force de Skyrme dans la méthode de HF permet de résoudre très simplement les équations de HF [17, 20]. En effet, dans ce cas, la fonctionnelle énergie $E^{\rm HF}$, décrite au paragraphe précédent s'écrit en termes d'une densité hamiltonienne $\mathcal{H}(\mathbf{r})$

$$E^{\rm HF} = \int d\mathbf{r}\, \mathcal{H}(\mathbf{r}) \tag{1.25}$$

avec

$$\mathcal{H}(\mathbf{r}) = \mathcal{H}_{\rm Sk}(\mathbf{r}) + \mathcal{H}_{\rm Coul}(\mathbf{r})\,. \tag{1.26}$$

Le cas de la densité d'énergie coulombienne sera traité à la section 1.3. Pour la partie Skyrme, la densité hamiltonienne se décompose de la façon suivante [1] pour des solutions paires par renversement du sens du temps (noyaux saturés en spin)

$$\mathcal{H}_{\rm Sk}(\mathbf{r}) = \mathcal{H}_{\rm kin}(\mathbf{r}) + \mathcal{H}_{\rm vol}(\mathbf{r}) + \mathcal{H}_{\rm surf}(\mathbf{r}) + \mathcal{H}_{\rm s.o.}(\mathbf{r}) \tag{1.27}$$

avec,

$$\mathcal{H}_{\rm kin}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar^2}{2m}\tau^2(\mathbf{r})\,, \tag{1.28}$$

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{\rm vol}(\mathbf{r}) = {} & B_1\,\rho^2(\mathbf{r}) + B_2\sum_q \rho_q^2(\mathbf{r}) + B_3\,\rho(\mathbf{r})\tau(\mathbf{r}) + B_4\sum_q \rho_q(\mathbf{r})\tau_q(\mathbf{r}) \\ & + B_7\,\rho^{\alpha+2}(\mathbf{r}) + B_8\,\rho^{\alpha}(\mathbf{r})\sum_q \rho_q^2(\mathbf{r})\,,\end{aligned} \tag{1.29}$$

1. Les notations de chacun des termes sont arbitraires car il n'y a pas de correspondance réelle entre eux et les termes d'énergie du même nom dans la formule de masse de Bethe et Weisäcker [25, 26] du modèle de la goutte liquide.

$$\mathcal{H}_{\rm surf}(\mathbf{r}) = B_5\,\rho(\mathbf{r})\Delta\rho(\mathbf{r}) + B_6\sum_q \rho_q(\mathbf{r})\Delta\rho_q(\mathbf{r})\,, \tag{1.30}$$

$$\mathcal{H}_{\rm s.o.}(\mathbf{r}) = B_9\Big[\rho(\mathbf{r})\boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{J}(\mathbf{r}) + \sum_q \rho_q(\mathbf{r})\boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{J}_q(\mathbf{r})\Big]\,. \tag{1.31}$$

Les expressions (1.28) à (1.31) sont exprimées en fonction des densités locales suivantes :

– La densité de particules :

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{i,\sigma} |\phi_i(\mathbf{r},\sigma)|^2\,,$$

– la densité d'énergie cinétique :

$$\tau(\mathbf{r}) = \sum_{i,\sigma} |\boldsymbol{\nabla}\phi_i(\mathbf{r},\sigma)|^2\,,$$

– et la densité de spin-orbite :

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}) = -\mathrm{i}\sum_{i,\sigma,\sigma'} \phi_i^*(\mathbf{r},\sigma)\big[\boldsymbol{\nabla}\phi_i(\mathbf{r},\sigma')\times\langle\sigma|\boldsymbol{\sigma}|\sigma'\rangle\big]\,.$$

Les sommes $\sum_q$ balayent les différents états de charges neutron et proton ($q = n, p$). Les coefficients B_i sont des combinaisons des paramètres de la force de Skyrme. Leurs expressions sont données dans le tableau 1.2.

B_1	$\frac{1}{2}t_0(1+\frac{1}{2}x_0)$	B_6	$\frac{1}{16}\big[3t_1(\frac{1}{2}+x_1)+t_2(\frac{1}{2}+x_2)\big]$
B_2	$-\frac{1}{2}t_0(\frac{1}{2}+x_0)$	B_7	$\frac{1}{12}t_3(1+\frac{1}{2}x_3)$
B_3	$\frac{1}{4}\big[t_1(1+\frac{1}{2}x_1)+t_2(1+\frac{1}{2}x_2)\big]$	B_8	$-\frac{1}{12}t_3(\frac{1}{2}+x_3)$
B_4	$-\frac{1}{4}\big[t_1(\frac{1}{2}+x_1)-t_2(\frac{1}{2}+x_2)\big]$	B_9	$-\frac{1}{2}W_0$
B_5	$-\frac{1}{16}\big[3t_1(1+\frac{1}{2}x_1)-t_2(1+\frac{1}{2}x_2)\big]$		

TABLEAU 1.2 – Expression des coefficients B_i en fonction des paramètres de la force de Skyrme.

Avec l'interaction effective phénoménologique de Skyrme, les équations de HF prennent la forme suivante :

$$\Big[-\boldsymbol{\nabla}\cdot\frac{\hbar^2}{2m_q^*(\mathbf{r})}\boldsymbol{\nabla} + U_q(\mathbf{r}) + \mathbf{W}_q(\mathbf{r})\cdot(-\mathrm{i})\,(\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{\sigma})\Big]\phi_i^{(q)}(\mathbf{r},\sigma) = \epsilon_i^{(q)}\phi_i^{(q)}(\mathbf{r},\sigma)\,. \tag{1.32}$$

Dans cette équation le potentiel est composé de trois termes :

– Un potentiel de masse effective :

$$\frac{\hbar^2}{2m_q^*(\mathbf{r})} = \frac{A-1}{A}\frac{\hbar^2}{2m} + B_3\rho(\mathbf{r}) + B_4\rho_q(\mathbf{r})\,,$$

– un potentiel appelé central :

$$\begin{aligned} U_q(\mathbf{r}) = {} & 2\big[B_1\,\rho(\mathbf{r}) + B_2\,\rho_q(\mathbf{r})\big] + \big[B_3\,\tau(\mathbf{r}) + B_4\,\tau_q(\mathbf{r})\big] \\ & + 2\big[B_5\,\Delta\rho(\mathbf{r}) + B_6\,\Delta\rho_q(\mathbf{r})\big] \\ & + (2+\alpha)\,B_7\,\rho^{\alpha+1}(\mathbf{r}) + B_8\,\rho^{\alpha-1}(\mathbf{r})\Big[\alpha\,(\rho_n^2(\mathbf{r})+\rho_p^2(\mathbf{r})) + 2\rho(\mathbf{r})\,\rho_q(\mathbf{r})\Big] \\ & + B_9\big[\boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{J} + \boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{J}_q\big] + \delta_{q,p}V_{\rm Coul}(\mathbf{r}) \end{aligned}$$

– et le potentiel vecteur spin-orbite :

$$\mathbf{W}_q(\mathbf{r}) = -B_9\big[\boldsymbol{\nabla}\rho(\mathbf{r}) + \boldsymbol{\nabla}\rho_q(\mathbf{r})\big] + \frac{1}{8}(t_1 - t_2)\mathbf{J}_q(\mathbf{r}) \,.$$

Le terme $\frac{A-1}{A}$ dans le potentiel de masse effective est un terme correctif de centre de masse pris en compte pour le calcul variationnel [21]. Il s'agit d'une approximation de Lipkin tenant compte seulement de la partie à un corps de l'opérateur $\mathbf{P}^2$. Une discussion détaillée de cette correction est présentée dans la référence [27].

Le potentiel coulombien $V_{\text{Coul}}(\mathbf{r})$, discuté à la section 1.3, est traditionnellement incorporé dans le champ central. De plus, le terme $\frac{1}{8}(t_1 - t_2)\mathbf{J}_q(\mathbf{r})$ est une faible contribution au potentiel spin-orbite qui, de plus, est difficile à calculer pour des solutions déformées. Ce terme est donc négligé dans nos calculs comme dans les travaux fondateurs [17, 20].

En pratique, les fonctions d'onde à un corps sont développées dans une base d'oscillateur harmonique à symétrie axiale (B.O.H.S.A.) décrite dans l'annexe B.

$$\phi_i(\mathbf{r}, \sigma) = \sum_\alpha C_\alpha^i \varphi_\alpha(\mathbf{r}, \sigma) \,. \tag{1.33}$$

La détermination des fonctions $\phi_i(\mathbf{r}, \sigma)$ se ramène donc à celle des coefficients C_α^i par diagonalisation du hamiltonien dans la base d'oscillateur.

1.2 Traitement des corrélations d'appariement avec BCS

L'approximation de HF permet de dériver, à partir d'une interaction effective à deux corps, un champ moyen à un corps dans lequel les nucléons sont confinés. On est ainsi ramené à un système de particules indépendantes, l'état HF étant un déterminant de Slater.

Cette approche est toutefois limitée car de nombreux types de corrélations entre les nucléons existent dans les noyaux, des corrélations de courte portée comme l'appariement ou de longue portée liées aux modes collectifs d'excitation. Les corrélations d'appariement jouent en particulier un rôle important pour une bonne description des états fondamentaux de noyaux à couches ouvertes. Le phénomène d'appariement nucléaire est similaire à la supraconductivité dans les métaux décrite par la théorie de J. Bardeen, L. N. Cooper et J. R. Schrieffer [28]. Cette théorie a été alors appliquée aux systèmes nucléaires par Å. Bohr, B. R. Mottelson et D. Pines [29] en 1958.

Il existe beaucoup de signatures expérimentales de ce phénomène. Pour n'en citer que quelques-uns :

– Si l'on compare les spectres en énergie de noyaux pairs-pairs et de noyaux impairs déformés, on remarque une nette différence. Pour les noyaux pairs-pairs, dans une gamme de quelques MeV d'énergie d'excitation (typiquement 1.5 MeV pour les isotopes de l'étain par exemple), il n'y a que très peu d'états excités que l'on identifie aisément à des excitations collectives (vibrations et bandes rotationnelles). Pour les noyaux impairs en revanche, dans la même gamme en énergie, on peut observer beaucoup d'états qui sont des excitations individuelles. Cette différence est la signature d'un *gap* en énergie important au niveau de Fermi des noyaux pairs-pairs.

– L'*effet pair–impair* : L'énergie moyenne de noyaux impairs est très supérieure à l'énergie moyenne des noyaux pairs-pairs voisins.

– Le phénomène d'appariement est nécessaire à l'explication des valeurs des moments d'inertie des noyaux en rotation. Ces moments d'inertie sont en effet plus faibles que ceux prédits par un modèle de corps rigide en rotation.

– Pour les noyaux pairs-pairs voisins de noyaux magiques, il existe un état excité 2^+ de basse énergie. La nature de cet état ne peut être expliquée que comme un couplage fort entre corrélations d'appariement et vibrations.

Une description microscopique du phénomène d'appariement nucléaire s'impose donc, surtout lorsque l'on considérera des noyaux à couches (ou sous-couches) ouvertes. Dans cette section nous allons présenter brièvement la théorie BCS et discuterons de ses limites.

1.2.1 La transformation de Bogoliubov-Valatin

On se place dans le cas où l'interaction effective à deux corps commute avec le renversement du sens du temps [2]. Si le hamiltonien de HF résultant est pair par renservement du sens du temps, les états à un corps sont doublement dégénérés d'après le théorème de Kramers. On peut alors partitionner l'espace à un corps en deux sous-espaces disjoints, l'un composé d'états $|i\rangle$ et l'autre d'états $|\bar{i}\rangle$. Pour distinguer ces deux types d'état, il faudra regarder leur valeur propre vis-à-vis d'un opérateur qui anti-commute avec le renversement du sens du temps. On peut prendre l'exemple de l'opérateur $\hat{J}_z$, la projection sur l'axe de déformation du moment cinétique total,

$$\left.\begin{aligned}\hat{J}_z|i\rangle &= \Omega_i|i\rangle \\ \hat{J}_z|\bar{i}\rangle &= \Omega_{\bar{i}}|\bar{i}\rangle\end{aligned}\right\} \qquad \left\{\hat{J}_z, \hat{\mathfrak{T}}\right\} = 0 \quad \Rightarrow \quad \Omega_{\bar{i}} = -\Omega_i \,. \tag{1.34}$$

Les états $|i\rangle$ et $|\bar{i}\rangle$ sont conjugués de Kramers deux à deux et on a

$$\hat{\mathfrak{T}}|i\rangle = |\bar{i}\rangle \qquad \text{et} \qquad \hat{\mathfrak{T}}|\bar{i}\rangle = -|i\rangle \tag{1.35}$$

On appellera *états positifs* $|i\rangle$, les états associés à une valeur propre Ω_i positive et *états négatifs* $|\bar{i}\rangle$, ceux associés à une valeur propre $\Omega_{\bar{i}} = -\Omega_i$ négative (ce choix est arbitraire).

La théorie de BCS consiste à appliquer une transformation linéaire entre les opérateurs de création et d'annihilation de particules ($\hat{\mathrm{a}}_i^\dagger$, $\hat{\mathrm{a}}_i$) et des opérateurs de quasiparticules correspondantes ($\hat{\mathrm{b}}_i^\dagger$, $\hat{\mathrm{b}}_i$)

$$\hat{\mathrm{b}}_i^\dagger = u_i\hat{\mathrm{a}}_i^\dagger - v_i\hat{\mathrm{a}}_{\bar{i}} \qquad ; \qquad \hat{\mathrm{b}}_i = u_i\hat{\mathrm{a}}_i - v_i\hat{\mathrm{a}}_{\bar{i}}^\dagger \qquad \text{pour } i > 0 \tag{1.36}$$

$$\hat{\mathrm{b}}_{\bar{i}}^\dagger = u_i\hat{\mathrm{a}}_{\bar{i}}^\dagger + v_i\hat{\mathrm{a}}_i \qquad ; \qquad \hat{\mathrm{b}}_{\bar{i}} = u_i\hat{\mathrm{a}}_{\bar{i}} + v_i\hat{\mathrm{a}}_i^\dagger \qquad \text{pour } i > 0 \tag{1.37}$$

$$\tag{1.38}$$

Cette transformation, appelée transformation de Bogoliubov-Valatin, est un cas particulier de la transformation de Bogoliubov (voir par exemple [1]). Les coefficients u_i et v_i sont réels, compris entre 0 et 1 pour $i > 0$. Ils satisfont la condition de normalisation

$$u_i^2 + v_i^2 = 1 \,. \tag{1.39}$$

2. C'est en principe toujours le cas tant que celle-ci ne dépend pas de la densité. Pour des interactions effectives dépendant de la densité, en revanche, on n'aura plus cette propriété dès lors que l'on traitera le cas de noyaux impairs par exemple.

1.2.2 Les équations BCS

L'état du système est alors décrit par le vide de quasi-particules noté $|\mathrm{BCS}\rangle$, dont la forme est donnée par

$$|\mathrm{BCS}\rangle = \prod_{i>0}(u_i + v_i \hat{\mathrm{a}}_i^\dagger \hat{\mathrm{a}}_{\bar{i}}^\dagger)|0\rangle \quad \text{tel que} \quad \hat{\mathrm{b}}_k|\mathrm{BCS}\rangle = \hat{\mathrm{b}}_{\bar{k}}|\mathrm{BCS}\rangle = 0 \quad \forall\, k > 0\,, \tag{1.40}$$

où $|0\rangle$ est le vide de particules.

La forme (1.40) de l'état BCS indique que celui-ci ne conserve pas le nombre de particules du système. En effet en développant cette expression on aboutit à la forme plus parlante du quasi-vide

$$|\mathrm{BCS}\rangle = \mathcal{N}\Big\{|0\rangle + \sum_{i>0}\frac{v_i}{u_i}\hat{\mathrm{a}}_i^\dagger\hat{\mathrm{a}}_{\bar{i}}^\dagger|0\rangle + \frac{1}{2}\sum_{\substack{i,j>0\\ i>j}}\frac{v_i\,v_j}{u_i\,u_j}\hat{\mathrm{a}}_i^\dagger\hat{\mathrm{a}}_{\bar{i}}^\dagger\hat{\mathrm{a}}_j^\dagger\hat{\mathrm{a}}_{\bar{j}}^\dagger|0\rangle + \cdots\Big\} \tag{1.41}$$

$$|\mathrm{BCS}\rangle = \mathcal{N}\sum_{\ell=0}^{\infty}\frac{1}{\ell!}(\hat{A}^\dagger)^\ell|0\rangle\,, \tag{1.42}$$

avec $\mathcal{N} = \prod_{i>0} u_i$ et $A_i^\dagger = \sum_{i>0}\frac{v_i}{u_i}\hat{\mathrm{a}}_i^\dagger\hat{\mathrm{a}}_{\bar{i}}^\dagger$. On voit clairement avec (1.42) que l'état BCS est une superposition de déterminants de Slater avec des nombres de particules différents.

Les coefficients v_i^2 et u_i^2 sont alors assimilables aux probabilités d'occupation ($v_i^2 = \rho_{ii}$) et d'inoccupation ($u_i^2 = 1 - \rho_{ii}$) de l'état $|i\rangle$ dans l'état BCS. Ils sont déterminés par application d'un principe variationnel sur l'énergie du système. La minimisation de l'énergie va alors s'écrire

$$\delta\langle\mathrm{BCS}|\hat{H}|\mathrm{BCS}\rangle = 0\,, \tag{1.43}$$

où $\hat{H}$ est le hamiltonien du système. La non conservation du nombre de particules dans l'état BCS (et que l'on retrouve dans l'approche HFB) pose un gros problème, notammment pour décrire la symétrie d'isospin (voir discussion du chapitre 4). Dans le cadre de l'approche BCS, le mieux que l'on puisse faire est de contraindre variationnellement le nombre de particules à être fixe en moyenne par l'utilisation d'un multiplicateur de Lagrange λ appelé *potentiel chimique*. On fera alors varier la valeur moyenne du hamiltonien modifié

$$\hat{H}' = \hat{H} - \lambda\hat{N}\,, \tag{1.44}$$

où $\hat{N} = \sum_i \hat{\mathrm{a}}_i^\dagger\hat{\mathrm{a}}_i$ est l'opérateur *nombre de particules* vérifiant

$$\langle\mathrm{BCS}|\hat{N}|\mathrm{BCS}\rangle = 2\sum_{i>0} v_i^2 = N\,. \tag{1.45}$$

Si le hamiltonien du système s'écrit sous la forme

$$\hat{H} = \sum_{ij}\langle i|\hat{h}_1|j\rangle\hat{\mathrm{a}}_i^\dagger\hat{\mathrm{a}}_j + \frac{1}{4}\sum_{ijk\ell}\langle ij|\hat{v}|\widetilde{k\ell}\rangle\hat{\mathrm{a}}_i^\dagger\hat{\mathrm{a}}_j^\dagger\hat{\mathrm{a}}_\ell\hat{\mathrm{a}}_k\,, \tag{1.46}$$

où $\hat{h}_1$ désigne un opérateur quelconque à un corps, alors la valeur de moyenne dans $|\mathrm{BCS}\rangle$, de $\hat{H}'$ sera

$$\langle\mathrm{BCS}|\hat{H}'|\mathrm{BCS}\rangle = \sum_i\Big\{(\langle i|\hat{h}_1|i\rangle - \lambda)v_i^2 + \frac{1}{2}\sum_j\langle ij|\hat{v}|\widetilde{ij}\rangle v_i^2 v_{\bar{i}}^2\Big\} + \sum_{i,j>0}\langle i\bar{i}|\hat{v}|\widetilde{j\bar{j}}\rangle\, u_i\, v_i\, u_{\bar{i}}\, v_{\bar{i}}\,. \tag{1.47}$$

La variation de l'énergie $\delta\langle\mathrm{BCS}|\hat{H}'|\mathrm{BCS}\rangle$ par rapport aux v_i conduit aux équations BCS

$$2\widetilde{\epsilon_i}\,u_i\,v_i + \Delta_i(v_i^2 - u_i^2) = 0 \qquad \forall\, i > 0\,, \tag{1.48}$$

où

$$\widetilde{\epsilon}_i = \langle i|\hat{h}_1|i\rangle + \frac{1}{2}\sum_j \Big[\langle ij|\hat{v}|\widetilde{ij}\rangle + \langle \bar{i}j|\hat{v}|\widetilde{\bar{i}j}\rangle\Big] v_j^2 - \lambda \tag{1.49}$$

et le paramètre de *gap* Δ_i pour le niveau i est

$$\Delta_i = -\sum_{j>0} \langle i\bar{i}|\hat{v}|\widetilde{j\bar{j}}\rangle \, u_j v_j \, . \tag{1.50}$$

Grâce à l'équation (1.48) et la condition de normalisation (1.39), on aboutit aux relations non linéaires pour les u_i et les v_i

$$v_i^2 = \frac{1}{2}\left[1 - \frac{\widetilde{\epsilon}_i}{\sqrt{\widetilde{\epsilon}_i^2 + \Delta_i^2}}\right] \qquad \text{et} \qquad u_i^2 = \frac{1}{2}\left[1 + \frac{\widetilde{\epsilon}_i}{\sqrt{\widetilde{\epsilon}_i^2 + \Delta_i^2}}\right] \, . \tag{1.51}$$

Dans la limite où la force responsable de l'appariement est nulle, le *gap* Δ_i devient nul et on trouve

$$v_i^2 = 1 \qquad \text{et} \qquad u_i^2 = 0 \qquad \forall \; i \text{ tel que } \widetilde{\epsilon}_i < 0 \tag{1.52}$$

$$\text{ou,} \qquad v_i^2 = 0 \qquad \text{et} \qquad u_i^2 = 1 \qquad \forall \; i \text{ tel que } \widetilde{\epsilon}_i > 0 \, . \tag{1.53}$$

$$\tag{1.54}$$

La diffusivité de la surface de Fermi, qui peut se mesurer par

$$\mathrm{Tr}\sqrt{\rho(1-\rho)} = \sum_i u_i v_i \, , \tag{1.55}$$

devient alors nulle également dans cette limite.

Le système d'équations (1.45), (1.49), (1.50) et (1.51) permet de déterminer les coefficients u_i et v_i. Il s'agit là d'un problème non linéaire que l'on résout encore une fois par itérations.

En pratique le hamiltonien à un corps $\hat{h}_1$ de départ sera le hamiltonien de HF et, dans nos calculs, l'interaction à deux corps $\hat{v}$ décrivant l'appariement sera une force de séniorité G, comme dans la procédure de la référence [30].

1.3 Traitement de l'interaction coulombienne dans HF

L'interaction coulombienne joue un rôle important pour beaucoup de propriétés structurelles des noyaux atomiques. Elle est notamment responsable de la déviation à la ligne $N = Z$ de la vallée de la stabilité et de l'instabilité par fission des noyaux lourds. Elle constitue également un ingrédient majeur des propriétés des radioactivités α, β et proton. Elle est enfin la source principale de brisure de la symétrie d'isospin et c'est ce dernier aspect qui nous intéresse le plus ici.

Cependant, le traitement exact de l'interaction coulombienne dans le cadre de HF (et par extension HF+BCS) est assez délicat compte tenu de la forme du potentiel en $1/\mathbf{r}$. Le potentiel coulombien $\hat{V}_{\mathrm{coul}}(\mathbf{r})$, qui est ajouté au champ central de l'équation (1.32) est la somme de deux contributions, le terme local direct (ou de Hartree) $\hat{V}_{\mathrm{CD}}(\mathbf{r})$ et le terme non-local d'échange (ou de Fock) $\hat{V}_{\mathrm{CE}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$.

Une méthode de calcul de la partie directe de ce potentiel

$$\hat{V}_{\mathrm{CD}}(\mathbf{r}) = e^2 \int d\mathbf{r}' \frac{\hat{\rho}_p(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \, , \tag{1.56}$$

a été proposée par D. Vautherin [20] en 1973 dans le cadre de calculs Skyrme-HF (où d'ailleurs seule la contribution directe de $\hat{V}_{\rm coul}(\mathbf{r})$ était prise en compte). L'intégration directe de (1.56) pose problème. On utilise alors la relation générale

$$\Delta_{\mathbf{r}'}|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| = \frac{2}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \tag{1.57}$$

et, après une double intégration par partie, on aboutit à

$$\hat{V}_{\rm CD}(\mathbf{r}) = \frac{e^2}{2}\int d\mathbf{r}'|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|\,\Delta\hat{\rho}_p(\mathbf{r}')\,. \tag{1.58}$$

L'intégrale est réalisée (dans nos calculs comme dans la référence [20]) en coordonnées cylindriques $\mathbf{r}\equiv(r,z,\phi)$. Après intégration sur l'angle azimutal ϕ, l'intégrale (1.58) devient

$$\hat{V}_{\rm CD}(r,z) = \int_0^{+\infty} dr'\,r'\int_{-\infty}^{+\infty} dz'\,f(r',z')\,E\left(\frac{\sqrt{4r\,r'}}{f(r',z')}\right)\,\Delta\hat{\rho}_p(r',z')\,, \tag{1.59}$$

où,

$$f(r',z') = \sqrt{(z-z')^2+(r+r')^2}\,, \tag{1.60}$$

et

$$E(x) = \int_0^{\pi/2} d\theta\sqrt{1-x\,\sin^2\theta} \tag{1.61}$$

est une intégrale elliptique de seconde espèce.

Le potentiel d'échange, non local, est habituellement traité au moyen d'une approximation de type LDA (*Local Density Approximation*) due à Slater [31]. Dans le cadre de cette approximation, la contribution du terme d'échange à l'énergie totale est

$$E_{\rm CE}^{\rm (Slater)} = -\frac{3}{4}e^2\left(\frac{3}{\pi}\right)^{1/3}\int d\mathbf{r}\,\rho_p^{4/3}(\mathbf{r})\,, \tag{1.62}$$

conduisant au potentiel de Fock

$$\hat{V}_{\rm CE}^{\rm (Slater)}(\mathbf{r}) = -\left(\frac{3}{\pi}\right)^{1/3} e^2\,\hat{\rho}_p^{1/3}(\mathbf{r})\,. \tag{1.63}$$

Durant ce travail de thèse, nous nous sommes attachés au développement d'une méthode exacte de calcul de ce potentiel d'échange coulombien. Étant désireux de traiter au mieux la symétrie d'isospin tant au niveau HF qu'au-delà avec l'approche HTDA (voir le chapitre 2), il nous est alors apparu nécessaire de traiter le mieux possible la principale source de brisure de cette symétrie. Ce travail [35] a pu déboucher sur une analyse assez complète de la validité de l'approximation de Slater (approximation qui présente toutefois l'avantage d'un gain énorme de temps de calcul).

L'impact du traitement du potentiel d'échange coulombien sur le degré de brisure de la symétrie d'isospin sera discuté plus en détail dans la deuxième partie de cette thèse.

Dans cette section nous allons exposer la méthode de calcul de ce potentiel dans HF et présenter quelques tests de l'approximation de Slater.

1.3.1 Calcul des éléments de matrice

◦ Détails de la méthode

L'idée de la méthode décrite ici a été proposée par P. Quentin [36] en 1972. Les éléments de matrice de l'interaction coulombienne sont évalués dans la base B.O.H.S.A. (voir annexe C). Les états de cette base sont étiquetés de la façon suivante [20, 30, 36]

$$|n_z, \alpha, \beta, \Sigma\rangle = (-)^{\beta} \frac{(a_z^{\dagger})^{n_z} (b_{\alpha}^{\dagger})^{\alpha} (b_{\beta}^{\dagger})^{\beta}}{\sqrt{n_z!\, \alpha!\, \beta!}} |000\rangle \otimes |\Sigma\rangle \,, \tag{1.64}$$

où n_z est le nombre de phonons dans la direction de l'axe de déformation z, associés à la fréquence d'oscillateur ω_z. Les paramètres α et β sont définis en fonction du nombre de phonons dans la direction perpendiculaire $n_{\perp}$ et le nombre quantique Λ associé à l'opérateur de moment cinétique orbital $\hat{l}_z$ tels que $\alpha = (n_{\perp} + \Lambda)/2$ et $\beta = (n_{\perp} - \Lambda)/2$. La fréquence d'oscillateur dans la direction perpendiculaire est notée $\omega_{\perp}$.

Entre deux états de protons de la B.O.H.S.A. (repérés en lettres latines), les éléments de matrice de l'interaction coulombienne s'écrivent

$$\langle ij|\hat{v}_c|kl\rangle = \delta_{\sigma_i,\sigma_k} \delta_{\sigma_j,\sigma_l} \, \langle n_{z_i} \alpha_i \beta_i, n_{z_j} \alpha_j \beta_j | \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} | n_{z_k} \alpha_k \beta_k, n_{z_l} \alpha_l \beta_l \rangle \,, \tag{1.65}$$

Le calcul du membre de droite (1.65) est réalisé au moyen d'une tranformation de Moshinsky [37]. Les coefficients de transformation pour des phonons à une dimension associés à la même fréquence d'oscillateur s'expriment en termes d'éléments de matrice de rotation réduite de Wigner $d^J_{M,M'}(\theta)$ (suivant la convention de phase de Messiah)

$$\langle n_1 n_2 || nN \rangle = \delta_{n_1+n_2,n+N} \, d^{(n_1+n_2)/2}_{(n-N)/2,(n_1-n_2)/2} \left(\frac{\pi}{2}\right) \tag{1.66}$$

$$\langle n_1 n_2 || nN \rangle = \delta_{n_1+n_2,n+N} \sqrt{\frac{n_1!\, n_2!\, n!\, N!}{2^{n_1+n_2}}} \sum_{\ell=\max(0,n_2-N)}^{\min(n_2,n)} \frac{(-)^{\ell}}{(n_2-\ell)!\, (N-n_2+\ell)!\, \ell!\, (n-\ell)!} \,, \tag{1.67}$$

où les lettres en minuscule n désignent les degrés de liberté relatifs tandis que les lettres majuscules N désignent ceux du centre de masse.

Ainsi, l'élément de matrice (1.65) devient

$$\langle n_{z_i} \alpha_i \beta_i, n_{z_j} \alpha_j \beta_j | \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} | n_{z_k} \alpha_k \beta_k, n_{z_l} \alpha_l \beta_l \rangle = \sum_{n,a,b} f^n g^{a,b} \langle nab, NAB | \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} | n' a' b', NAB \rangle \tag{1.68}$$

avec,

$$f^n = \langle n_{z_i} n_{z_j} || nN \rangle \langle n_{z_k} n_{z_l} || n'N \rangle \tag{1.69}$$

et

$$g^{a,b} = \langle \alpha_i \alpha_j || aA \rangle \langle \beta_i \beta_j || bB \rangle \langle \alpha_k \alpha_l || a'A \rangle \langle \beta_k \beta_l || b'B \rangle \,. \tag{1.70}$$

La conservation du nombre de phonons, apparaissant dans (1.66), contraint les valeurs des paramètres n', a' et b' en fonction de celles de n, a et b respectivement. Les nombres N, A et B sont les mêmes dans le bra et dans le ket de (1.68) du fait de l'invariance par translation de l'interaction de Coulomb.

Enfin, on utilise la représentation intégrale du potentiel coulombien, ou plus généralement d'un potentiel de type Yukawa, sur une base de gaussiennes

$$\frac{e^{-\mu|\mathbf{s}|}}{|\mathbf{s}|} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^{\infty} e^{-\mu^2\sigma^2/2} e^{-\mathbf{s}^2/2\sigma^2} \frac{d\sigma}{\sigma^2} \,, \tag{1.71}$$

comme cela a été proposé dans la référence [36], pour évaluer l'élément de matrice de $|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|^{-1}$. Ainsi, en prenant $\mathbf{s}=\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2$ et $\mu=0$ dans (1.71), l'élément de matrice (1.68) devient

$$\begin{aligned}\langle ij|\hat{v}_c|kl\rangle = \delta_{\sigma_i,\sigma_k}\delta_{\sigma_j,\sigma_l}\sqrt{\frac{2}{\pi}}\,e^2\,\beta_0^3\sum_{n=n_{\min}}^{n_{z_i}+n_{z_j}} f^n \sum_{p=|n-n'|}^{n+n'} \mathcal{C}(n,n',p)\,\mathcal{A}(p)\times \\ \sum_{a=a_{\min}}^{\alpha_i+\alpha_j}\sum_{b=b_{\min}}^{\beta_i+\beta_j} g^{a,b}\,\delta_{a-b,a'-b'}\,\frac{(a+b')!}{\sqrt{a!\,a'!\,b!\,b'!}}\sum_{k=0}^{k_{\max}}\frac{\binom{b}{k}\binom{b'}{k}}{\binom{a+b'}{k}}\,\mathcal{I}^{\beta_z,\beta_\perp}_{p/2,|a-b|,k,a+b'+1-k}\,.\end{aligned} \tag{1.72}$$

avec

$$n_{\min} = \max(0, n_{z_i}+n_{z_j}-n_{z_k}-n_{z_l})\,, \tag{1.73}$$
$$a_{\min} = \max(0, \alpha_i+\alpha_j-\alpha_k-\alpha_l)\,, \tag{1.74}$$
$$b_{\min} = \max(0, \beta_i+\beta_j-\beta_k-\beta_l)\,, \tag{1.75}$$
$$2k_{\max} = \min\big(a+b, a'+b'\big)-|a-b|\,. \tag{1.76}$$

Le facteur $\beta_0^3=\beta_z\beta_\perp^2$ est la constante de l'oscillateur harmonique sphérique. Les coefficients $\binom{i}{j}$ sont les coefficients binomiaux et les fonctions $\mathcal{C}(n,n',p)$ et $\mathcal{A}(p)$ sont définies par

$$\mathcal{C}(n,n',p)=\frac{\sqrt{n!\,n'!\,p!}}{\left(\frac{n+n'-p}{2}\right)!\,\left(\frac{n'+p-n}{2}\right)!\,\left(\frac{p+n-n'}{2}\right)!} \qquad \text{et} \qquad \mathcal{A}(p)=\begin{cases}\frac{(-)^{p/2}\sqrt{p!}}{2^{p/2}(p/2)!} & \text{si } p \text{ est pair}\\ 0 & \text{sinon}\,.\end{cases}$$

Enfin, les intégrales $\mathcal{I}^{\beta_z,\beta_\perp}_{k,\ell,m,n}$ sont définies par

$$\mathcal{I}^{\beta_z,\beta_\perp}_{k,\ell,m,n}=\int_0^{+\infty}\frac{\left(\beta_\perp^2\sigma^2\right)^\ell\left(\beta_\perp^2\sigma^2-1\right)^m\sigma\,d\sigma}{\left(1+\beta_\perp^2\sigma^2\right)^n\sqrt{\left(1+\beta_z^2\sigma^2\right)^{2k+1}}} \tag{1.77}$$

et doivent être utilisées avec les restrictions suivantes :

(i) k, ℓ et m sont des entiers positifs ou nuls et $n\geqslant 0$,

(ii) $\ell+m<n$.

La méthode de calcul de ces intégrales est présentée dans le paragraphe suivant.

◦ Calcul des intégrales $\mathcal{I}^{\beta_z,\beta_\perp}_{k,\ell,m,n}$

Dans le travail original de la référence [36], l'auteur développait une méthode complètement analytique pour calculer les intégrales $\mathcal{I}^{\beta_z,\beta_\perp}_{k,\ell,m,n}$ (1.77). Celles-ci sont alors exprimées en terme d'intégrales plus simples notées $\mathcal{J}^\varepsilon_{\mu,\nu}(\delta)$ comme

$$\mathcal{I}^{\beta_z,\beta_\perp}_{k,\ell,m,n}=\frac{q^{n-\ell-m}\,(-)^{m+\ell}}{\beta_z^2}\sum_{i=0}^{\ell}\sum_{j=0}^{m}\binom{\ell}{i}\binom{m}{j}(-)^{i+j}(1+q)^{m-j}\,\mathcal{J}^\varepsilon_{i+j-k,n}(\delta)\,, \tag{1.78}$$

où $q=(\beta_z/\beta_\perp)^2$ est l'inverse du paramètre de déformation, $\delta=\sqrt{|q-1|}$, $\varepsilon=(1-q)/\delta^2$ et les intégrales $\mathcal{J}^\varepsilon_{\mu,\nu}(\delta)$ sont données par

$$\mathcal{J}^\varepsilon_{\mu,\nu}(\delta)=\int_0^1\frac{x^{2(\nu-\mu-1)}\,dx}{(1-\varepsilon\delta^2x^2)^\nu}\,. \tag{1.79}$$

Ces nouvelles intégrales sont définies pour $\nu > 0$ et $\mu < \nu$ et satisfont les relations de récurrence suivantes

$$\text{pour } \mu > 0 : \qquad \mathcal{J}^{\varepsilon}_{\mu,\nu}(\delta) = \frac{1}{2\nu - 2\mu - 1} \left\{ \frac{1}{(1-\varepsilon\delta^2)^{\nu-1}} - \varepsilon\delta^2(2\mu-1)\mathcal{J}^{\varepsilon}_{\mu-1,\nu}(\delta) \right\} \tag{1.80}$$

$$\text{pour } \mu < 0 : \qquad \mathcal{J}^{\varepsilon}_{\mu,\nu}(\delta) = \frac{\varepsilon}{\delta^2(2\mu+1)} \left\{ \frac{1}{(1-\varepsilon\delta^2)^{\nu-1}} - (2\nu - 2\mu - 3)\mathcal{J}^{\varepsilon}_{\mu+1,\nu}(\delta) \right\} \tag{1.81}$$

$$\text{pour } \mu = 0 : \qquad \mathcal{J}^{\varepsilon}_{0,\nu}(\delta) = \frac{\varepsilon}{\delta^2(2\nu-2)} \left\{ \frac{1}{(1-\varepsilon\delta^2)^{\nu-1}} - (2\nu-3)\mathcal{J}^{\varepsilon}_{0,\nu-1}(\delta) \right\} , \tag{1.82}$$

avec les valeurs initiales

$$\mathcal{J}^{\varepsilon=+1}_{0,1}(\delta) = \frac{1}{2\delta} \ln\left(\frac{1+\delta}{1-\delta}\right) \qquad \text{et} \qquad \mathcal{J}^{\varepsilon=-1}_{0,1}(\delta) = \frac{1}{\delta}\arctan(\delta) . \tag{1.83}$$

Comme nous allons le voir, l'évaluation numérique des intégrales $\mathcal{J}^{\varepsilon}_{\mu,\nu}(\delta)$ par cette méthode crée de sérieux soucis lorsque $\delta^2 \ll 1$. Pour illustrer ce problème, considérons le cas $\mu = 0$ à titre d'exemple, le problème étant cependant tout-à-fait général.

Dans la limite $\delta^2 \ll 1$, on peut considérer un développement en séries de Taylor de $(1-\varepsilon\delta^2x^2)^{-\nu}$ autour de $\varepsilon\delta^2x^2 = 0$ pour obtenir

$$\mathcal{J}^{\varepsilon}_{\mu,\nu}(\delta \ll 1) = \sum_{i=0}^{\infty} \binom{\nu+i-1}{i} \frac{\varepsilon^i\,\delta^{2i}}{2\nu - 2\mu + 2i - 1} , \tag{1.84}$$

ce qui, inséré dans (1.82), conduit à

$$\mathcal{J}^{\varepsilon}_{0,\nu}(\delta \ll 1) = \frac{1}{\delta^2} \left\{ \frac{\delta^2}{2\nu-1} + \mathcal{O}(\delta^4) \right\} . \tag{1.85}$$

On voit que l'évaluation numérique de (1.82) va conduire à une divergence dans la limite $\delta^2 \to 0$; On doit alors en principe avoir recours à la forme (1.84). Bien sûr, ce développement en série ne peut être appliqué que lorsque δ sera inférieur à son rayon de convergence qui vaut 1. En pratique, du fait de sa lente convergence, la série (1.84) doit être évaluée avec plusieurs dizaines de termes afin d'atteindre une précision satisfaisante des intégrales $\mathcal{J}^{\varepsilon}_{\mu,\nu}$ lorsque δ^2 sera supérieur à ~ 0.01 typiquement.

De plus, cette méthode pose un second problème, apparaissant pour de faibles valeurs (mais non infinitésimales) de δ^2 (disons 0.1 par exemple). Pour donner un exemple concret, considérons le cas où $q = 1.1$, donc $\delta^2 = 0.1$, et $\varepsilon = -1$. Supposons que nous soyons capables d'évaluer la première intégrale $\mathcal{J}_{0,1}$ avec une précision de l'ordre de 10^{-15}. Le terme dominant de $\mathcal{J}_{0,\nu}$, donné par $\frac{1}{2\nu-1}$, ce qui correspond à $i = 0$ dans (1.84), est toujours annulé lorsqu'il est inséré dans (1.82). Le terme restant est donc toujours divisé par δ^2. Ainsi, l'erreur numérique commise sur l'intégrale est amplifiée par un facteur $1/\delta^2 = 10$ à chaque étape. Cette erreur atteint ainsi l'ordre de 100% pour $\mathcal{J}_{0,15}$.

Chacune des ces approches, (1.82) et (1.84), possède son propre domaine d'applicabilité et la principale difficulté est alors de trouver la condition, si elle existe, de leur recouvrement.

Afin de simplifier la question, nous avons eu recours à une évaluation numérique des intégrales $\mathcal{I}^{\beta_z,\beta_\perp}_{k,\ell,m,n}$ directement. Partant de (1.77) et notant par p la quantité $p = n - \ell - m \geqslant 1$, on procède au changement de variable $x = \beta_\perp^2\sigma^2$. On sépare ensuite l'intégrale en deux intervalles, $[0\,;1]$ et $[1\,;+\infty[$,

et on change à nouveau de variable, $y = 1/\sqrt{x^2}$, pour la deuxième partie. Nous obtenons ainsi une nouvelle forme de l'intégrale (toujours avec $q = (\beta_z/\beta_\perp)^2$)

$$\begin{aligned} \mathcal{I}^{\beta_z,\beta_\perp}_{k,\ell,m,p} = \frac{1}{2\,\beta_\perp^2} \int_0^1 \left(\frac{x}{x+1}\right)^\ell \left(\frac{x-1}{x+1}\right)^m \frac{dx}{(x+1)^p(1+qx)^{k+1/2}} \\ + \frac{1}{\beta_\perp^2} \int_0^1 \left(\frac{1}{1+y^2}\right)^\ell \left(\frac{1-y^2}{1+y^2}\right)^m \frac{y^{2(k+p-1)}\,dy}{(1+y^2)^p(y^2+q)^{k+1/2}}\,. \end{aligned} \tag{1.86}$$

Pour n'importe quelle valeur des paramètres k, ℓ, m, p et q, l'intégrale $\mathcal{I}^{\beta_z,\beta_\perp}_{k,\ell,m,p}$ calculée numériquement avec la forme (1.86) converge toujours. Aucune singularité de l'intégrant n'apparaît dans l'intervalle fini $[0\,;1]$.

En pratique, pour évaluer les deux termes de (1.86) avec une précision satisfaisante, on tabule l'intégrant sur quelques milliers de points et on interpole la fonction tabulée par un spline cubique. Enfin on intègre la fonction d'interpolation.

1.3.2 Tests de la validité de l'approximation de Slater

◦ Position du problème

La validité de l'approximation de Slater a été testée par C. Titin-Shnaider et P. Quentin [32] pour des noyaux légers sphériques comme déformés et plus récemment par M. Anguiano *et al.* [33] dans le cadre de calculs HFB avec l'interaction effective de Gogny et enfin par J. Skalski [34] pour 9 noyaux à (sous-)couche fermée allant du ^{16}O aux superlourds.

Le but de notre travail [35] était d'étendre cette étude afin de mettre en évidence l'impact de la structure en couches des noyaux sur la qualité de l'approximation de Slater.

Afin de tester la validité de l'approximation de Slater, nous avons défini l'erreur commise sur l'énergie coulombienne d'échange $\Delta E_{\rm CE}$, lorsqu'on l'évalue avec l'approximation de Slater par rapport à un traitement exact. Cette erreur est définie par

$$\Delta E_{\rm CE} = \frac{E_{\rm CE}^{\rm (exact)} - E_{\rm CE}^{\rm (Slater)}}{E_{\rm CE}^{\rm (exact)}}\,. \tag{1.87}$$

Dans le travail de la référence [35], nous avons montré que cette quantité était pertinente pour évaluer l'erreur correspondante sur l'énergie totale. En effet, nous avons montré que les autres termes de l'énergie (1.27) ainsi que l'énergie de pairing se compensaient systématiquement ; l'erreur commise sur l'énergie d'échange se reportait ainsi directement sur celle de l'énergie totale, comme le montre à titre d'exemple, la figure 1.1.

Dans cette étude, nous nous sommes intéressés à l'évolution de cette erreur en fonction de la structure en couches des noyaux atomiques. Nous l'avons donc étudiée en faisant varier deux paramètres indépendants sondant les effets de couches :

- Un paramètre discret, le nombre de particules, neutron, proton et total (à déformation fixée),
- et un paramètre continu, la déformation.

De façon générale, l'erreur (1.87) est toujours relativement faible, atteignant 8% dans le pire des cas. Elle est, en revanche, une fonction très sensible de la densité de niveaux des protons au niveau de Fermi, l'erreur augmentant rapidement lorsque cette dernière diminue.

Pour illustrer ce comportement, nous allons présenter les résultats principaux concernant l'étude en fonction du nombre de particules d'une part et en fonction de la déformation d'autre part.

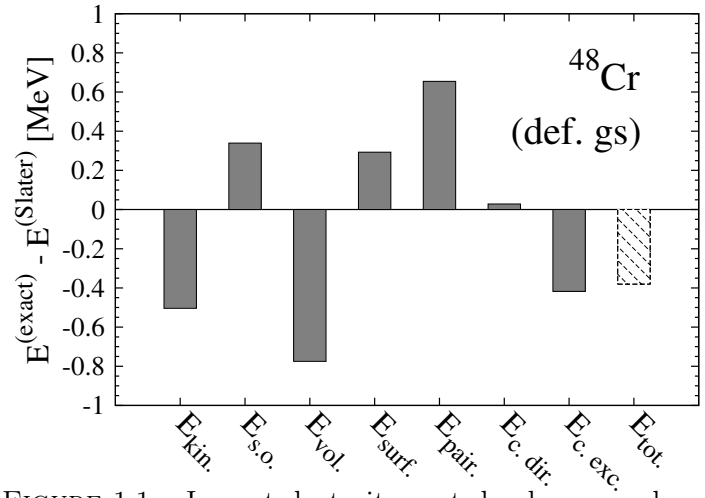


FIGURE 1.1 – Impact du traitement du champ coulombien d'échange sur les différentes contributions à l'énergie totale.

◦ ÉTUDE EN FONCTION DU NOMBRE DE PARTICULES

Le calcul de l'erreur a été réalisé dans le cadre de l'approche HF avec l'interaction de Skyrme SkM*, incluant un traitement des corrélations d'appariement en résolvant les équations BCS avec une force de séniorité G selon la méthode de la référence [30].

Pour cette première étude en fonction du nombre de particules, nous avons considéré 11 noyaux à couche (ou sous-couche) fermée pour les protons, 46 noyaux pairs-pairs répartis en 6 séries isotoniques et 9 noyaux pairs-pairs répartis en 3 séries isotopiques. Tous ces noyaux sont contraints à la sphéricité, l'étude en fonction de la déformation étant réalisée dans un deuxième temps. Les résultats obtenus pour ces noyaux sont tracés sur la figure 1.2.

Les calculs des travaux antérieurs ont été réalisés avec les forces de Skyrme SIII pour le plus ancien [32] et SkP pour le plus récent [34]. L'ensemble des résultats de ces travaux a pu être reproduit ici avec une grande précision confirmant ainsi l'observation de J. Skalski [34] de l'indépendance des résultats dans le choix de la paramétrisation de la force de Skyrme.

La tendance générale de l'évolution de l'erreur ΔE_{CE} en fonction de la masse du système est donnée par la courbe en trait plein reliant les noyaux magiques. On peut ainsi observer que l'erreur décroît rapidement lorsque A augmente, passant de 8% pour le ^{16}O à 2% pour le superlourd ^{310}126. Ce comportement est assez facilement compréhensible. En effet, l'approximation de Slater étant une approximation de matière nucléaire infinie (densité uniforme), il est naturel de voir sa qualité accroître lorsque la masse du système augmente, la densité devenant effectivement de plus en plus uniforme.

Trois de ces noyaux (^{90}Zr et les deux superlourds ^{298}114 et ^{310}126) sont simplement des noyaux à sous-couche fermée en protons. Deux calculs ont été réalisés pour ces noyaux, l'un avec traitement de l'appariement, et l'autre sans. Lorsque l'on traite les corrélations d'appariement avec BCS, l'erreur chute (surtout pour les deux premiers), l'absence de corrélations d'appariement donnant un résultat situé sur la courbe en trait plein. Ce comportement est un second indice de la dépendance de l'erreur dans la densité de niveaux des protons au niveau de Fermi. En effet, en tenant compte de ces corrélations, on va peupler des niveaux de la sous-couche suivante où la densité est nettement supérieure.

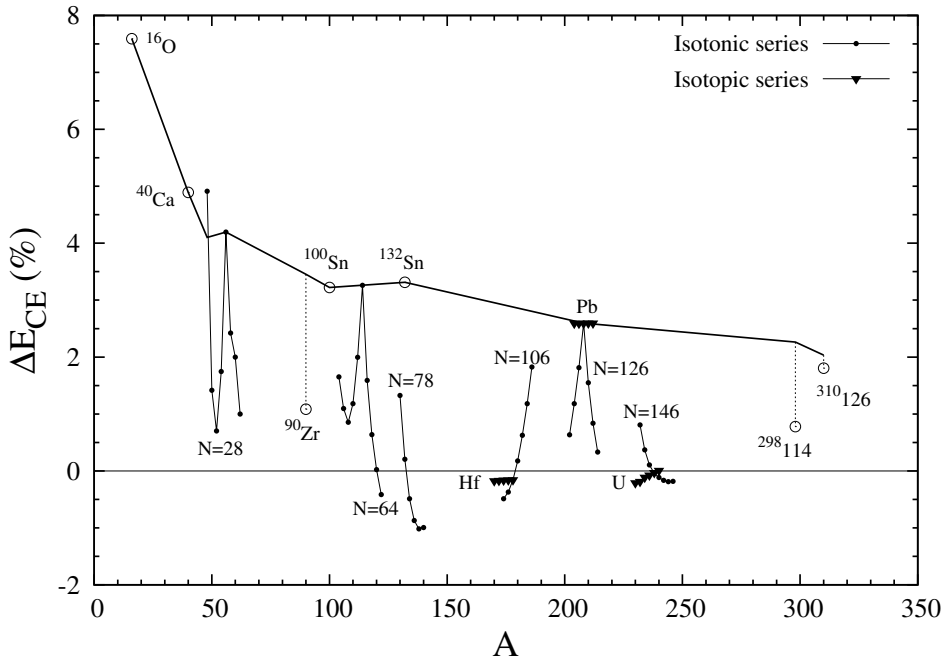


FIGURE 1.2 – L'erreur ΔE_{CE} associée aux noyaux à (sous-)couche fermée pour les protons est reportée le long de la courbe en trait plein, certains d'entre eux étant repérés par des cercles. L'erreur associée aux noyaux à couche ouverte le long de séries isotoniques est représentée par des points noirs tandis que celle concernant les noyaux des séries isotopiques (Hf, Pb et U) l'est par des triangles noirs.

Ceci se confirme parfaitement lorsque l'on considère des séries isotoniques (points noirs sur la figure 1.2). On rappelle que tous ces noyaux sont contraints à la sphéricité. Ainsi, lorsque l'on a un nombre magique en proton, la solution sphérique (correspondant à un minimum de l'énergie) va présenter un important *gap* en énergie au niveau de Fermi des protons, rendant ainsi l'erreur grande. Pour des noyaux situés en milieu de couche pour les protons, la solution sphérique va au contraire correspondre à une situation de densité élevée et plus uniforme, améliorant ainsi la qualité de l'approximation de Slater.

Les 3 chaines isotopiques, reportées sur la figure 1.2 par des triangles noirs, montrent qu'un tel effet est absent si l'on fait varier de la même façon le nombre de neutrons. L'interaction coulombienne n'agissant qu'entre les protons, elle n'influence les neutrons que via un processus auto-cohérent qui n'a aucun effet sur l'erreur ΔE_{CE}.

◦ ÉTUDE EN FONCTION DE LA DÉFORMATION

Pour étendre le domaine de vérification de l'hypothèse de la dépendance de l'erreur à la densité de niveaux des protons au niveau de Fermi, nous allons maintenant regarder comment elle se comporte en fonction d'un paramètre continu, la déformation.

On commence avec l'étude de cinq noyaux de milieu de couche (^{24}Mg, ^{48}Cr, ^{106}Mo, ^{178}Hf et ^{238}U). Ces noyaux sont axialement déformés dans leur état fondamental. On compare alors l'erreur ΔE_{CE} pour ces 5 noyaux dans cette solution ainsi qu'à la sphéricité. Deux points supplémentaires sont calculés pour le ^{238}U correspondant au sommet de la première barrière de fission et à l'isomère de fission. Ces résultats sont visibles sur la figure 1.3.

Ce que nous avions supposé lors de l'étude précédente pour expliquer le comportement de l'erreur ΔE_{CE} le long d'une chaîne isotonique se confirme. En effet, à la sphéricité de ces noyaux de milieu de couche correspond une erreur relativement faible tandis qu'elle est beaucoup plus importante à la

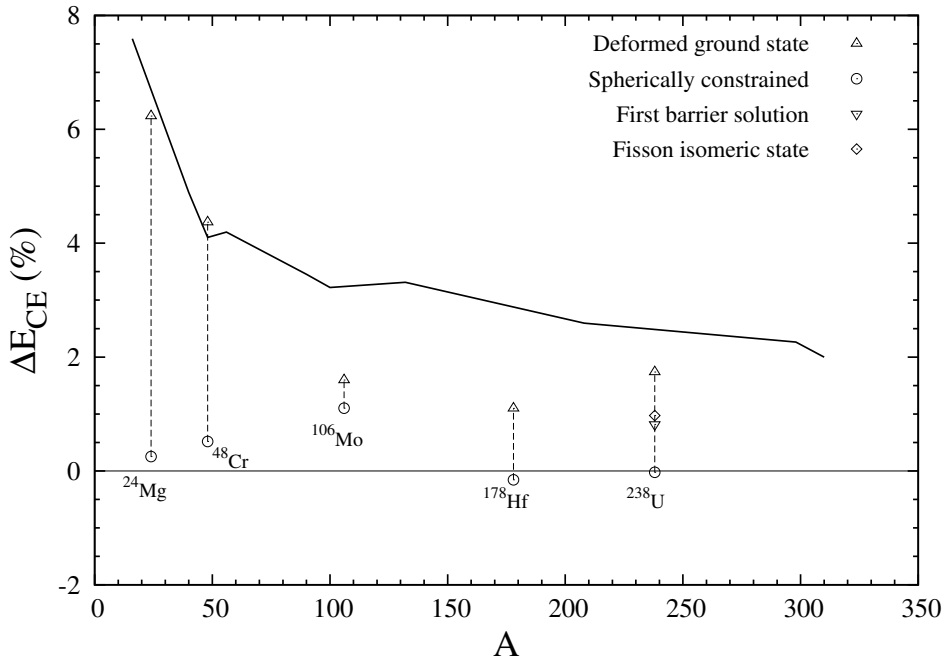


FIGURE 1.3 – L'erreur ΔE_{CE} associée à 5 noyaux de milieu de couche proton, à la déformation fondamentale et à la sphéricité. Le sommet de la première barrière ainsi que l'isomère de fission du ^{238}U sont également considérés.

déformation fondamentale. Cette observation ne peut être faite que dans une moindre mesure pour le ^{106}Mo qui présente une certaine mollesse. La méthode HF sous contrainte (ne mélangeant pas des solutions ayant des valeurs moyennes différentes de la déformation) est connue pour fournir une description moins bonne de ce type de noyaux. Là encore, la densité de niveaux des protons à la surface de Fermi est plus élevée pour une solution sphérique qu'à la déformation fondamentale. L'erreur ΔE_{CE} semble donc bien présenter une corrélation avec le *gap* en énergie des protons à la surface de Fermi. Les deux solutions supplémentaires pour le ^{238}U sont intermédiaires en termes de *gap* et donc en termes d'erreur également.

Pour compléter cette étude et valider définitivement notre hypothèse, nous avons étudié plus précisément l'évolution de l'erreur ΔE_{CE} en fonction de la déformation du ^{70}Se, de la sphéricité jusqu'au sommet de la barrière de fission symétrique. Le résultat est présenté sur la figure 1.4. Afin de sonder en même temps l'évolution de la densité de niveaux des protons au niveau de Fermi, nous avons également reporté sur cette figure le *gap* d'appariement des protons obtenu avec BCS.

Sur cette figure, on peut observer une anti-corrélation quasi-parfaite de l'erreur ΔE_{CE} en fonction du *gap* de pairing BCS. Celui-ci sonde la densité de niveaux des protons au niveau de Fermi, elle est faible lorsque le *gap* en énergie est grand et vice-versa. Cette anti-corrélation est assez remarquable au sens ou non seulement les positions des extrema coïncident mais également les variations d'amplitude.

Le *gap* d'appariement des protons, visible sur le panneau inférieur, est tracé pour les deux situations correspondant à un traitement différent du potentiel coulombien d'échange. On peut remarquer que le *gap* BCS calculé lors de l'utilisation de l'approximation de Slater est systématiquement supérieur à celui correspondant au traitement exact de l'interaction coulombienne. Ce résultat n'est pas propre au ^{70}Se. Il est tout-à-fait général. Tous les calculs réalisés dans l'étude de la référence [35] présentent le même comportement.

Pour comprendre ce résultat, nous avons reporté en abscisse de la figure 1.5 le spectre à un corps des protons du ^{70}Se contraint à la déformation Q_{20} = 15b (à titre d'exemple), obtenu lors d'un traitement exact du potentiel coulombien d'échange. Pour chaque état de ce spectre, nous avons représenté par un pic, son décalage en énergie lors d'un traitement exact de la force coulombienne par rapport à l'approximation de Slater.

On s'aperçoit alors que l'usage de l'approximation de Slater entraîne une réduction de plusieurs centaines de keV du *gap* en énergie des protons au niveau de Fermi. En effet, les états occupés sont systématiquement décalés vers les hautes énergies lorsque l'on a recours à cette approximation tandis que les niveaux inoccupés sont décalés vers les basses énergies.

L'importance du désaccord dans le *gap* d'appariement proton pour la solution à 15 b du ^{70}Se entre les deux traitements de l'interaction coulombienne est due à une pathologie de l'approche BCS. Il est bien connu, que cette approche est inefficace pour décrire les corrélations d'appariement dans un régime de faibles corrélations. Le *gap* BCS subit une brusque transition de phase du premier ordre d'une valeur nulle à une valeur réaliste lorsque l'on passe d'un régime où ces corrélations deviennent importantes.

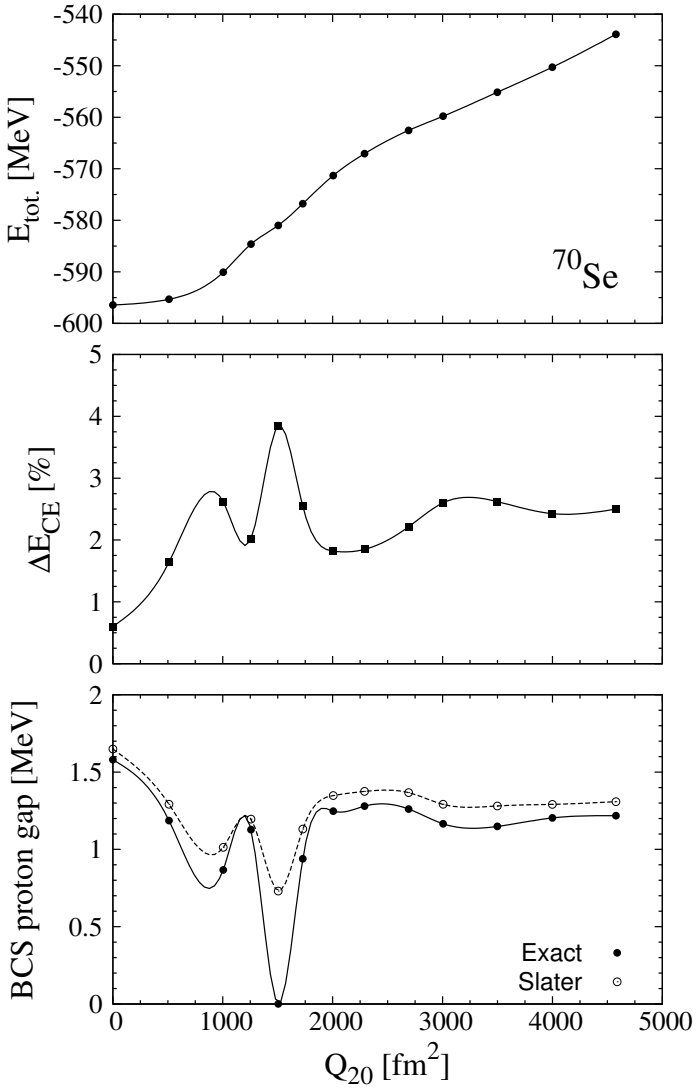


FIGURE 1.4 – En haut, la courbe d'énergie de déformation tracée en fonction du moment quadrupolaire Q_{20} exprimé en fm^2. Au milieu, l'erreur $\Delta E_{\rm CE}$ correspondante en fonction de Q_{20}. En bas, le *gap* d'appariement BCS proton calculé pour un traitement exact du potentiel d'échange coulombien (ligne en trait plein) et avec l'approximation de Slater (ligne en pointillés).

La solution calculée pour le ^{70}Se à 15 b est située au voisinage de cette transition de phase. Avec l'approximation de Slater le *gap* en énergie est suffisamment faible pour autoriser des corrélations d'appariement avec BCS tandis qu'un traitement exact de la force coulombienne donne, comme on l'a vu, un *gap* en énergie plus grand, entraînant la disparition du *gap* d'appariement.

◦ IMPACT SUR LES DIFFÉRENCES D'ÉNERGIE DE LIAISON

Après avoir établi les situations où l'approximation de Slater va faire le plus défaut, nous nous sommes intéressés à mieux évaluer l'erreur en valeur absolue correspondante sur des quantités liées à des différences d'énergie de liaison. En pratique, nous avons calculé les valeurs Q_α, des chaleurs de

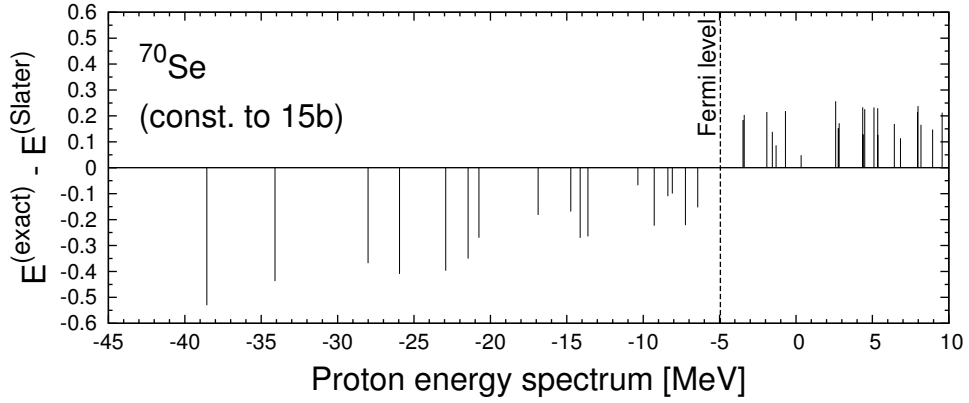


FIGURE 1.5 – Décalage en énergie des états du spectre à un corps des protons du ^{70}Se contraint à la déformation $Q_{20} = 15$ b.

réaction de décroissances α pour les quatre transitions suivantes

$$^{212}\mathrm{Po} \to {}^{208}\mathrm{Pb} + \alpha\,, \quad {}^{214}\mathrm{Rn} \to {}^{210}\mathrm{Po} + \alpha\,, \quad {}^{216}\mathrm{Ra} \to {}^{212}\mathrm{Rn} + \alpha \quad \text{et} \quad {}^{218}\mathrm{Th} \to {}^{214}\mathrm{Ra} + \alpha\,.$$

Nous avons également calculé l'erreur commise en valeur absolue sur l'évaluation de l'énergie de la première barrière de fission et de l'isomère de fission du ^{238}U. Les résultats pour les valeurs de Q_α sont listés dans le tableau 1.3 et repris dans la figure 1.6.

L'erreur trouvée pour les valeurs de Q_α est toujours de l'ordre de la centaine de keV. Comme on pouvait s'y attendre elle est la plus importante pour la première décroissance considérée qui fait intervenir un noyau magique, le ^{208}Pb. Elle décroît ensuite à mesure que les noyaux impliqués entrent dans la couche de protons $Z \in [82\,;126]$.

On peut remarquer également (voir figure 1.6) qu'un traitement exact de l'interaction coulombienne permet de se rapprocher considérablement des valeurs expérimentales, et ce de plus en plus à mesure que l'on entre dans la couche de protons $Z \in [82\,;126]$. Dans le même temps l'écart entre la valeur expérimentale et la valeur calculée avec l'approximation de Slater reste à peu près constante.

Les résultats concernant la hauteur de la première barrière de fission et de l'énergie d'excitation de l'isomère de fission du ^{238}U, sont présentés sur la figure 1.3. En traitant le potentiel d'échange coulombien avec l'approximation de Slater, on sous-estime l'énergie de 310 keV pour la hauteur de la

Noyau parent	exp.$^{(1)}$	théorie		différences		
		exact$^{(2)}$	Slater$^{(3)}$	(2) − (3)	(1) − (2)	(1) − (3)
^{212}Po	8954.12(11)	9107	8679	428	-152.88(11)	275.12(11)
^{214}Rn	9208(9)	9354	9000	354	-146(9)	208(9)
^{216}Ra	9526(8)	9599	9292	307	-73(8)	234(8)
^{218}Th	9849(9)	9890	9634	256	-41(9)	215(9)

TABLEAU 1.3 – Quelques valeurs de Q_α (en keV) dans la région du Plomb-Thorium. Les énergies de liaison de la particule α nécessaires au calcul des valeurs expérimentales des Q_α sont tirées de la référence [38].

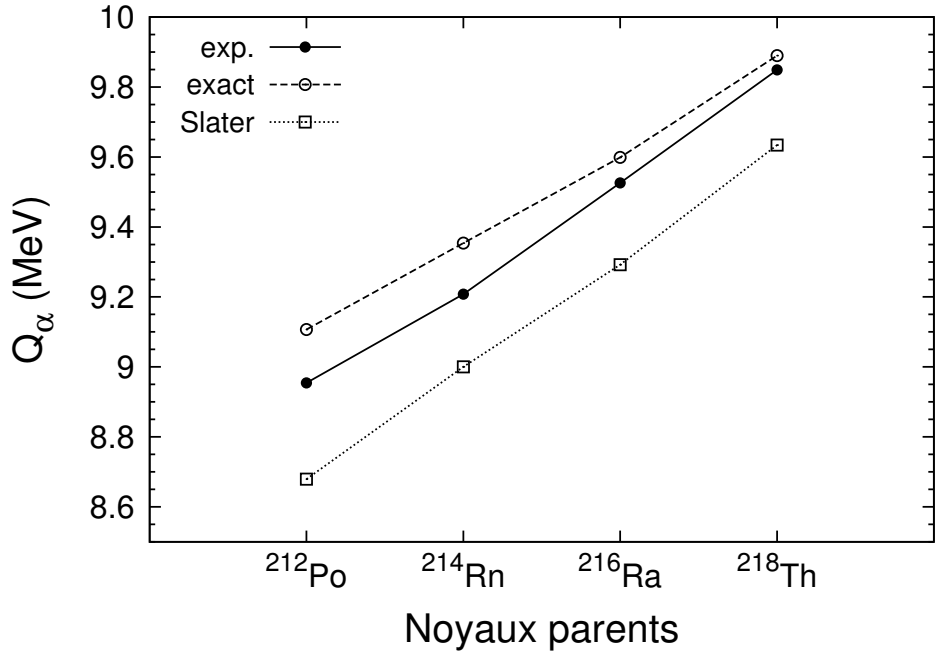


FIGURE 1.6 – Valeurs de Q_α du tableau 1.3 exprimées en MeV.

barrière et de 283 keV pour l'énergie isomérique.

L'impact du traitement du potentiel d'échange coulombien sur le mélange d'isospin d'un état corrélé sera étudié dans le cadre de l'approche HTDA. Il fera l'objet, entre autres, de la deuxième partie de cette thèse.

Chapitre 2

L'approche HTDA

Contenu du chapitre

Introduction

2.1 Formalisme

2.1.1 Principe général de la méthode

2.1.2 Le hamiltonien HTDA

- Le hamiltonien de quasi-particules indépendantes
- L'interaction résiduelle

2.1.3 Description des corrélations d'appariement avec l'interaction $\hat{V}_\delta$

- Définition
- Éléments de matrice à deux corps

2.2 Construction de la base à N corps

2.2.1 Choix du schéma de troncation

2.2.2 Contraintes de symétrie

2.2.3 Excitations de paires pour l'appariement

- Étape 1
- Étape 2
- Étape 3

Introduction

L'approche HTDA (*pour Highly Truncated Diagonalization Approach*) est une méthode de résolution du problème à N corps de type Modèle en Couches basé sur un champ moyen prenant en compte une grande partie des propriétés du noyau atomique. Grâce à la rapide convergence du développement de la fonction d'onde totale sur une base d'excitations de type particule-trou, l'espace de configurations à N corps est fortement tronqué en comparaison du Modèle en Couches classique.

Cette approche fut utilisée pour la première fois pour la description des états fondamental et isomérique du ^{178}Hf [39] puis à la description de noyaux impairs et à des états isomériques plus généraux [40]. La méthode du *Routhian* a ensuite été couplée à l'approche HTDA pour décrire les bandes *yrast* superdéformées dans la région de masse $A \sim 190$ [41, 42]. Une étude poussée des corrélations d'appariement dans les canaux T = 0 et T = 1 de l'interaction résiduelle fut ensuite entreprise [43]. Plus récemment, le couplage de l'appariement aux corrélations vibrationnelles quadrupolaires a été étudié [44]. Enfin, la brisure de la symétrie de parité a très récemment été considérée afin de décrire des modes de déformation octupolaire jouant un rôle important dans certains noyaux lourds comme le ^{194}Pb, le ^{222}Ra ou

le ^{240}Pu (états excités voire fondamentaux) [45].

Dans ce chapitre, nous allons présenter le formalisme de l'approche HTDA. Une application de ce formalisme à la description des corrélations d'appariement sera également examinée dans sa version la plus récente. Enfin, en lien avec la description de ce type de corrélation, nous allons exposer le problème de la construction de la base à N corps.

2.1 Formalisme

2.1.1 Principe général de la méthode

La dynamique du système est régie par le hamiltonien $\hat{H}$, composé d'un terme d'énergie cinétique $\hat{K}$ et d'une interaction à deux corps $\hat{V}$

$$\hat{H} = \hat{K} + \hat{V} \,. \tag{2.1}$$

Le principe de la méthode HTDA est de décomposer le hamiltonien (2.1) sous la forme d'un terme à un corps $\hat{K} + \hat{U}$ censé simuler le maximum d'effets physiques (densité à saturation, déformation, rayons, etc) et d'un terme à deux corps résiduel $\hat{V} - \hat{U}$,

$$\hat{H} = \underbrace{(\hat{K} + \hat{U})}_{\hat{H}_0} + (\hat{V} - \hat{U}) \,. \tag{2.2}$$

L'état propre de plus basse énergie du hamiltonien à un corps $\hat{H}_0 = \hat{K} + \hat{U}$ sera un déterminant de Slater noté $|\Phi_0\rangle$.

Le potentiel moyen $\hat{U}$ sera par la suite considéré comme un paramètre du hamiltonien total puisqu'un choix donné de ce champ conduira à une solution HTDA particulière. En pratique, il sera obtenu par un calcul de champ moyen de type HF. Afin de rendre compte le mieux possible des principales propriétés des noyaux atomiques, le potentiel moyen $\hat{U}$ pourra inclure un traitement des corrélations d'appariement (notamment, dans bien des cas, pour obtenir une bonne déformation) et résultera alors d'un calcul HF+BCS. Les états individuels solutions des équations HF ou HF+BCS servent à définir l'état $|\Phi_0\rangle$ qui sera le déterminant de Slater de plus basse énergie.

Dans le cas d'un calcul HF pur, le potentiel moyen $\hat{U}$ s'identifie à la réduction à un corps $\hat{\overline{V}}$ de la force à deux corps $\hat{V}$ pour l'état $|\Phi_0\rangle$. Ce n'est évidemment plus le cas si on résout les équations BCS car on ne tiendra pas compte de la diffusivité de la surface de Fermi dans la construction de l'état $|\Phi_0\rangle$ qui sera toujours un déterminant de Slater.

Le système est décrit par une fonction d'onde à N corps décomposée dans une base orthogonale d'excitations particule-trou $\mathcal{B}$ bâties sur $|\Phi_0\rangle$ servant alors de vide d'excitation de quasi-particules de type particule-trou. Les différentes configurations à N corps constituant la base $\mathcal{B}$ seront ainsi représentées par des déterminants de Slater écrits comme des excitations n-particules–n-trous ($np n$h) sur $|\Phi_0\rangle$

$$|\Phi_n\rangle = \hat{a}^\dagger_{\mu_1}\hat{a}^\dagger_{\mu_2}\cdots\hat{a}^\dagger_{\mu_n}\hat{a}_{m_n}\cdots\hat{a}_{m_2}\hat{a}_{m_1}|\Phi_0\rangle = \prod_{k=1}^{n}\hat{a}^\dagger_{\mu_k}\prod_{\ell=n}^{1}\hat{a}_{m_\ell}|\Phi_0\rangle \,, \tag{2.3}$$

où n représente l'ordre d'excitation associé à l'état $|\Phi_n\rangle$, les états occupés dans $|\Phi_0\rangle$ seront étiquetés par des lettres latines (m_ℓ) tandis que les états inoccupés le seront par des lettres grecques (μ_k).

De façon générale un état HTDA, noté $|\Psi\rangle$, s'écrira comme

$$|\Psi\rangle = \chi_0|\Phi_0\rangle + \sum_{\{1\text{p}1\text{h}\}}\chi_1|\Phi_1\rangle + \sum_{\{2\text{p}2\text{h}\}}\chi_2|\Phi_2\rangle + \sum_{\{3\text{p}3\text{h}\}}\chi_3|\Phi_3\rangle + \cdots \tag{2.4}$$

et sera normalisé à 1

$$\sum_i |\chi_i|^2 = 1\,. \tag{2.5}$$

Les amplitudes χ_i sont obtenues par diagonalisation du hamiltonien $\hat{H}$ dans la base à N corps $\mathcal{B}$. Dans notre étude, nous ne considérerons que des noyaux pairs-pairs. De plus, on supposera que les fonctions d'onde HTDA (2.4) sont paires par renversement du sens du temps et ainsi, on pourra ne considérer que des amplitudes χ_i réelles.

La base d'états à un corps choisie pour la construction des déterminants de Slater $|\Phi_n\rangle$ sera du type de la base HF décrite au chapitre 1. En principe, la résolution exacte du problème nécessite de considérer toute la base à un corps (qui est infinie en principe) et, d'autre part, de prendre en compte toutes les excitations particule-trous possibles dans un tel espace. La base à N corps $\mathcal{B}$ est donc normalement infinie. Bien évidemment, cette procédure est impossible à mettre en œuvre et il faut en pratique tronquer à la fois l'espace à un corps et l'espace à N corps sous-tendu par la base $\mathcal{B}$. Nous reviendrons sur cet aspect dans le paragraphe 2.2.

La fonction d'onde $|\Psi\rangle$ (2.4) correspondant à un mélange de configurations, décrit un état à N corps corrélé. De plus, le quasi-vide $|\Phi_0\rangle$ est un déterminant de Slater à $A = N + Z$ particules par construction et il en va de même pour chaque état de la base $\mathcal{B}$ puisque l'excitation particule-trou associée conserve le nombre de particules, neutrons et protons indépendamment. L'état corrélé $|\Psi\rangle$ sera donc, par construction, un état propre des opérateurs *nombre de protons* et *nombre de neutrons* et a fortiori, de l'opérateur nombre de particules, avec les valeurs propres Z, N et A

$$\hat{Z}|\Psi\rangle = Z|\Psi\rangle \qquad \hat{N}|\Psi\rangle = N|\Psi\rangle \quad \Rightarrow \quad \hat{A}|\Psi\rangle = (\hat{N}+\hat{Z})|\Psi\rangle = A|\Psi\rangle\,. \tag{2.6}$$

Enfin, on caractérisera la solution HTDA $|\Psi\rangle$ par deux quantités principales, le *taux de corrélation* D d'une part et l'*énergie de corrélation* E_{corr} d'autre part. Le taux de corrélation peut être mesuré par la dépopulation du quasi-vide $|\Phi_0\rangle$

$$D = 1 - \chi_0^2\,, \tag{2.7}$$

tandis que l'énergie de corrélation est définie par

$$E_{\text{corr}} = \langle\Psi|\hat{H}|\Psi\rangle - \langle\Phi_0|\hat{H}|\Phi_0\rangle\,. \tag{2.8}$$

2.1.2 Le hamiltonien HTDA

Dans l'approche HTDA, on réécrit le hamiltonien (2.1) en fonction du vide de référence $|\Phi_0\rangle$ comme

$$\hat{H} = \hat{K} + \hat{V} = \hat{H}_{\text{IQP}} + \hat{V}_{\text{res}} + \langle\Phi_0|\hat{H}|\Phi_0\rangle \tag{2.9}$$

où $\hat{H}_{\text{IQP}}$ est appelé *hamiltonien de quasi-particules indépendantes* et $\hat{V}_{\text{res}}$ est l'*interaction résiduelle*. Le hamiltonien de quasi-particules indépendantes est défini par le produit normal pour $|\Phi_0\rangle$ (défini pour des opérateurs de quasi-particules de type « particule-trou ») de $\hat{H}_0 = \hat{K} + \hat{U}$

$$\hat{H}_{\text{IQP}} = :\hat{H}_0:_{\Phi_0} = \hat{H}_0 - \langle\Phi_0|\hat{H}_0|\Phi_0\rangle = \sum_i \epsilon_i :\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i: \quad . \tag{2.10}$$

L'interaction résiduelle est donnée par

$$\hat{V}_{\text{res}} = \big(\hat{V} - \hat{U}\big) - \langle\Phi_0|\big(\hat{V} - \hat{U}\big)|\Phi_0\rangle\,. \tag{2.11}$$

Elle s'exprime en fonction du produit normal, $:\hat{V}:_{\Phi_0}$, et de la réduction à un corps $\hat{\overline{V}}$, de $\hat{V}$ pour $|\Phi_0\rangle$ comme

$$\hat{V}_{\text{res}} = :\hat{V}:_{\Phi_0} \; + \; :\big(\hat{\overline{V}} - \hat{U}\big):_{\Phi_0} \tag{2.12}$$

avec,

$$:\hat{V}:_{\Phi_0} = \hat{V} - \hat{\overline{V}} + \langle\Phi_0|\hat{V}|\Phi_0\rangle \,. \tag{2.13}$$

Dans le cas où le potentiel moyen $\hat{U}$ est la réduction à un corps $\hat{\overline{V}}$ de $\hat{V}$ pour $|\Phi_0\rangle$ (calcul HF pur), l'interaction résiduelle $\hat{V}_{\rm res}$ se ramène au produit normal (2.13).

Compte tenu de leurs expressions (2.10) et (2.11) les opéateurs $\hat{H}_{\rm IQP}$ et $\hat{V}_{\rm res}$ sont nuls en valeur moyenne dans $|\Phi_0\rangle$.

Du fait de cette réécriture du hamiltonien, l'énergie de corrélation $E_{\rm corr}$ devient

$$E_{\rm corr} = \langle\Psi|\hat{H}_{\rm IQP}|\Psi\rangle + \langle\Psi|\hat{V}_{\rm res}|\Psi\rangle \,. \tag{2.14}$$

◦ Le hamiltonien de quasi-particules indépendantes

Puisque la base à un corps sous-jacente est la base canonique associée au hamiltonien $\hat{H}_0$, la base à N corps $\mathcal{B}$ sous-tend un espace propre du hamiltonien de quasi-particules indépendantes $\hat{H}_{\rm IQP}$.

En effet, si à l'état $|\Phi_0\rangle$ est associée une énergie E_0 [1], à chaque état $|\Phi_n\rangle$ de la base $\mathcal{B}$ sera associée une énergie E_n telle que

$$\hat{H}_0|\Phi_n\rangle = E_n|\Phi_n\rangle \qquad \forall\ n \geqslant 0 \,. \tag{2.15}$$

Ainsi, chaque état de la base $\mathcal{B}$ sera état propre de $\hat{H}_{\rm IQP}$ avec pour valeur propre, l'*énergie d'excitation individuelle* E_n^* donnée par

$$\hat{H}_{\rm IQP}|\Phi_n\rangle = \hat{H}_0|\Phi_n\rangle - \langle\Phi_0|\hat{H}_0|\Phi_0\rangle|\Phi_n\rangle = (E_n - E_0)|\Phi_n\rangle = E_n^*|\Phi_n\rangle \,. \tag{2.16}$$

Pour un déterminant de Slater $|\Phi_n\rangle$ défini par (2.3), l'énergie d'excitation individuelle qui lui est associée s'écrira donc en fonction des énergies individuelles ϵ_i comme

$$E_n^* = \sum_{\ell=1}^{n} (\epsilon_{\mu_\ell} - \epsilon_{m_\ell}) \,. \tag{2.17}$$

L'énergie E_n^* représente donc le coût en énergie individuelle associé à l'excitation particule-trou décrite par l'état $|\Phi_n\rangle$.

◦ L'interaction résiduelle

L'approche HTDA peut être vue comme une approche de type Modèle en Couches pour laquelle le champ moyen des nucléons résulte d'un calcul variationnel de type HF et permet donc de décrire de façon satisfaisante les principales propriétés du noyau associées au hamiltonien de départ $\hat{H}$. Ce champ moyen est maintenant pris en compte par le biais du hamiltonien $\hat{H}_{\rm IQP}$.

Le traitement des corrélations au-delà du champ moyen se fait alors via l'interaction résiduelle $\hat{V}_{\rm res}$ que l'on diagonalise dans la base à N corps tronquée.

Les éléments de matrice généraux de $\hat{V}_{\rm res}$ peuvent être calculés à partir des formules de l'annexe B. Nous rappelons ici les expressions de ces éléments de matrice dans les différents cas de figure. À chaque fois nous supposerons que l'état de référence $|\Phi\rangle$ s'écrira par rapport à $|\Phi_0\rangle$ comme

$$|\Phi\rangle = \prod_{k=1}^{n} \hat{\rm a}^\dagger_{\mu_k} \prod_{\ell=n}^{1} \hat{\rm a}_{m_\ell}|\Phi_0\rangle \,. \tag{2.18}$$

1. Attention, dans le cas où $\hat{H}_0 = \hat{H}_{\rm HF}$, E_0 est la valeur propre de $\hat{H}_{\rm HF}$ associée à $|\Phi_0\rangle$ et n'a rien à voir avec l'*énergie de HF* définie par (1.4).

Éléments de matrices diagonaux :

$$\langle\Phi|\hat{V}_{\rm res}|\Phi\rangle = \sum_{k,\ell=1}^{n}\left[\frac{1}{2}\Big(\langle\mu_k\mu_\ell|\hat{v}|\widetilde{\mu_k\mu_\ell}\rangle + \langle m_k m_\ell|\hat{v}|\widetilde{m_k m_\ell}\rangle\Big) - \langle\mu_k m_\ell|\hat{v}|\widetilde{\mu_k m_\ell}\rangle\right] . \tag{2.19}$$

Éléments de matrice entre $|\Phi\rangle$ et $|\Phi'\rangle = \varphi\,\hat{a}^\dagger_\alpha\hat{a}_a|\Phi\rangle$:

$$\langle\Phi|\hat{V}_{\rm res}|\Phi'\rangle = \varphi\sum_{\ell=1}^{n}\Big[\langle\mu_\ell a|\hat{v}|\widetilde{\mu_\ell\alpha}\rangle - \langle m_\ell a|\hat{v}|\widetilde{m_\ell\alpha}\rangle\Big] . \tag{2.20}$$

Éléments de matrice entre $|\Phi\rangle$ et $|\Phi''\rangle = \varphi\,\hat{a}^\dagger_\alpha\hat{a}^\dagger_\beta\hat{a}_b\hat{a}_a|\Phi\rangle$:

$$\langle\Phi|\hat{V}_{\rm res}|\Phi''\rangle = \varphi\langle ab|\hat{v}|\widetilde{\alpha\beta}\rangle . \tag{2.21}$$

Dans ces deux dernières expressions, la phase φ provient de la comparaison des déterminants de Slaters $|\Phi\rangle$ et $|\Phi'\rangle$, ce dernier étant exprimé comme une excitation particule-trou du premier. Cette écriture est toujours définie à une phase près et il faut, par souci de cohérence, choisir toujours la même convention. Notre choix de convention pour la comparaison de deux déterminants de Slater ainsi que le calcul de la phase φ associée fait l'objet de l'annexe A.

L'interaction résiduelle est en principe construite à partir de l'interaction effective à deux corps $\hat{V}$. Dans ce travail, cette interaction effective est l'interaction phénoménologique de Skyrme décrite au chapitre 1, le plus souvent dans sa paramétrisation SIII.

Cette interaction effective est connue pour fournir une très bonne description des propriétés des états fondamentaux sur l'ensemble de la charte des noyaux dans l'approche HF. En revanche, pour ce qui est de la description des corrélations au-delà du champ moyen et notamment des corrélations de courte portée comme l'appariement, elle est en réalité assez mal adaptée.

En pratique, nous avons alors recours à une approximation permettant à la fois de simplifier la forme de l'interaction résiduelle et de fournir une description de principe des corrélations étudiées. On définira l'interaction résiduelle, non plus par rapport à $\hat{V} = \hat{V}_{\rm Sk}$, mais par rapport à une interaction schématique dont la forme dépendra du type de corrélations que l'on veut décrire.

2.1.3 Description des corrélations d'appariement avec l'interaction $\hat{V}_\delta$

◦ Définition

Afin de décrire les corrélations d'appariement dans l'approche HTDA, on utilise une interaction résiduelle qui s'écrit comme le produit normal d'une force $\hat{\delta}$ pour le quasi-vide de référence $|\Phi_0\rangle$

$$\hat{V}_{\rm res} \approx \hat{V}_\delta - \hat{\overline{V}}_\delta + \langle\Phi_0|\hat{V}_\delta|\Phi_0\rangle , \tag{2.22}$$

où $\hat{\overline{V}}_\delta$ est la réduction à un corps de $\hat{V}_\delta$ pour $|\Phi_0\rangle$. Ainsi, quelle que soit la méthode employée (HF ou HF+BCS) pour construire le poteniel moyen $\hat{U}$, on approche l'interaction résiduelle par le produit normal $:\hat{V}_\delta:_{\Phi_0}$ c'est-à-dire que l'on néglige le terme $:\big(\hat{\overline{V}} - \hat{U}\big):_{\Phi_0}$ dans (2.12).

L'interaction $\hat{V}_\delta$ est une interaction de contact agissant dans les deux canaux d'isospin, T = 0 et T = 1,

$$\hat{V}_\delta(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) = \sum_{\mathrm{T}=0}^{1} V_0^{(\mathrm{T})}\hat{\delta}(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)\,\hat{\mathbb{P}}^{\mathrm{S}}\,\hat{\mathbb{P}}^{\mathrm{T}}\;, \qquad \mathrm{S}+\mathrm{T}=1\;. \tag{2.23}$$

Dans cette expression, $V_0^{(\mathrm{T})}$ est l'intensité de la force dans le canal d'isospin T, et S désigne le canal de spin (S = 0, 1). La partie spatiale de la force $\hat{V}_\delta$ est le terme de contact $\hat{\delta}(\mathbf{r})$ où $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$. Ce terme est donc symétrique dans l'échange des coordonnées $\mathbf{r}_1$ et $\mathbf{r}_2$. Afin de donner une structure d'antisymétriseur global (i.e. agissant sur tous les degrés de liberté possibles) à cette force, on doit ajouter un antisymétriseur pour l'espace $\mathcal{E}_{\mathrm{S}} \otimes \mathcal{E}_{\mathrm{T}}$, produit tensoriel des espaces de spin et d'isospin.

C'est précisément la fonction des opérateurs $\hat{\mathbb{P}}^{\mathrm{S}}$ et $\hat{\mathbb{P}}^{\mathrm{T}}$ qui agissent soit comme des symétriseurs soit comme des antisymétriseurs suivant la parité du nombre quantique associé

$$\hat{\mathbb{P}}^{\mathrm{S}} = \frac{1}{2}\big[\hat{\mathbb{1}} - (-)^{\mathrm{S}}\hat{P}^{\sigma}\big] \quad \text{et} \quad \hat{\mathbb{P}}^{\mathrm{T}} = \frac{1}{2}\big[\hat{\mathbb{1}} - (-)^{\mathrm{T}}\hat{P}^{\tau}\big]\;, \tag{2.24}$$

où $\hat{P}^{\sigma} = \frac{1}{2}(\hat{\mathbb{1}} + \hat{\boldsymbol{\sigma}}_1\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}_2)$ et $\hat{P}^{\tau} = \frac{1}{2}(\hat{\mathbb{1}} + \hat{\boldsymbol{\tau}}_1\cdot\hat{\boldsymbol{\tau}}_2)$ sont les opérateurs d'échange de spin et d'isospin respectivement.

Ainsi, pour former un antisymétriseur global, il faut que la valeur du spin du système à deux corps S et celle de l'isospin T aient des parités différentes. Comme, en couplant deux nucléons, on ne peut avoir que les valeurs 0 ou 1 pour ces deux nombres quantiques, les seules combinaisons possibles sont les canaux ($S = 1, T = 0$) correspondant à un triplet de spin et un singulet d'isospin, et ($S = 0, T = 1$) correspondant à un singulet de spin et un triplet d'isospin.

◦ Éléments de matrice à deux corps

Les éléments de matrice à deux corps de l'interaction $\hat{V}_\delta$ sont calculés par intégration dans l'espace. On utilise alors la représentation spatiale des états individuels HF décomposés dans la base B.O.H.S.A. (voir annexe C).

Singulet d'isospin et triplet de spin

Nous allons commencer par le canal d'isospin T = 0 (i.e. S = 1). Dans ce cas, on a $V_0^{(\mathrm{T}=1)} = 0$ et l'interaction $\hat{V}_\delta$ (2.23) prend la forme

$$\hat{V}_\delta(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) = \frac{V_0^{(\mathrm{T}=0)}}{4}\hat{\delta}(\mathbf{r})\big(\hat{\mathbb{1}} + \hat{P}^{\sigma}\big)\big(\hat{\mathbb{1}} - \hat{P}^{\tau}\big)\;. \tag{2.25}$$

Ainsi, les éléments de matrice antisymétrisés de $\hat{V}_\delta$ dans la base HF s'écriront :

$$\langle ij|\hat{V}_\delta|\widetilde{k\ell}\rangle = \frac{V_0^{(\mathrm{T}=0)}}{4}\langle ij|\hat{\delta}\big(\hat{\mathbb{1}} + \hat{P}^{\sigma}\big)\big(\hat{\mathbb{1}} - \hat{P}^{\tau}\big)|\widetilde{kl}\rangle \tag{2.26}$$

$$= \frac{V_0^{(\mathrm{T}=0)}}{4}\langle ij|\hat{\delta}\big(\hat{\mathbb{1}} + \hat{P}^{\sigma}\big)\big(\hat{\mathbb{1}} - \hat{P}^{\tau}\big)\big(\hat{\mathbb{1}} - \hat{P}^{M}\hat{P}^{\sigma}\hat{P}^{\tau}\big)|k\ell\rangle \tag{2.27}$$

$$\langle ij|\hat{V}_\delta|\widetilde{k\ell}\rangle = \frac{V_0^{(\mathrm{T}=0)}}{2}\langle ij|\hat{\delta}(\hat{\mathbb{1}} + \hat{P}^{\sigma})(\hat{\mathbb{1}} - \hat{P}^{\tau})|k\ell\rangle \tag{2.28}$$

où nous avons utilisé les relations $\hat{P}^{\sigma^2} = \hat{P}^{\tau^2} = \hat{\mathbb{1}}$ et pour l'opérateur de permutation des parties spatiales, $\hat{\delta}\hat{P}^{M} \equiv \hat{\delta}$ dû au caractère pair de l'opérateur $\hat{\delta}$.

En insérant quatre fois la relation de fermeture, on a

$$\langle ij|\hat{V}_\delta|\widetilde{k\ell}\rangle = \frac{V_0^{(\mathrm{T}=0)}}{2}\iiiint d\mathbf{r}_1\, d\mathbf{r}_2\, d\mathbf{r}'_1\, d\mathbf{r}'_2\, \langle ij|\mathbf{r}_1\mathbf{r}_2\rangle\langle \mathbf{r}_1\mathbf{r}_2|\hat{\delta}(\hat{\mathbb{1}}+\hat{P}^\sigma)(\hat{\mathbb{1}}-\hat{P}^\tau)|\mathbf{r}'_1\mathbf{r}'_2\rangle\langle \mathbf{r}'_1\mathbf{r}'_2|k\ell\rangle \tag{2.29}$$

$$= \frac{V_0^{(\mathrm{T}=0)}}{2}\iiiint d\mathbf{r}_1\, d\mathbf{r}_2\, d\mathbf{r}'_1\, d\mathbf{r}'_2\, \langle ij|\mathbf{r}_1\mathbf{r}_2\rangle\langle \mathbf{r}_1\mathbf{r}_2|\hat{\delta}|\mathbf{r}'_1\mathbf{r}'_2\rangle(\hat{\mathbb{1}}+\hat{P}^\sigma)(\hat{\mathbb{1}}-\hat{P}^\tau)\langle \mathbf{r}'_1\mathbf{r}'_2|k\ell\rangle\,. \tag{2.30}$$

Ici, la notation $\langle \mathbf{r}'_1\mathbf{r}'_2|k\ell\rangle$ représente des recouvrements partiels puisque les états $|k\rangle$ et $|\ell\rangle$ contiennent des degrés de liberté de spin et d'isospin. Cette quantité est donc un ket dans l'espace de ces deux derniers degrés de liberté.

De plus, l'interaction $\hat{\delta}$ est définie par,

$$\langle \mathbf{r}_1\mathbf{r}_2|\hat{\delta}|\mathbf{r}'_1\mathbf{r}'_2\rangle = \delta(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)\delta(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}'_1)\delta(\mathbf{r}_2-\mathbf{r}'_2)\,. \tag{2.31}$$

On a donc finalement,

$$\langle ij|\hat{V}_\delta|\widetilde{k\ell}\rangle = \frac{V_0^{(\mathrm{T}=0)}}{2}\int d\mathbf{r}\,\langle ij|\mathbf{r}\mathbf{r}\rangle(\hat{\mathbb{1}}+\hat{P}^\sigma)(\hat{\mathbb{1}}-\hat{P}^\tau)\langle \mathbf{r}\mathbf{r}|k\ell\rangle\,. \tag{2.32}$$

Avant d'aller plus loin, nous allons reprendre les notations de l'annexe C pour une fonction d'onde HF.

$$\langle \mathbf{r}|i\rangle = \Phi_i(\mathbf{r},\sigma,\tau) = \Big[\sum_\sigma \phi_i^{(\sigma)}(\mathbf{r})|\sigma\rangle\Big]\otimes|\tau\rangle\ ,\quad \sigma=\pm\,. \tag{2.33}$$

Ainsi on obtient, en omettant, par souci de simplicité, la dépendance en $\mathbf{r}$ des fonctions $\phi_i^{(\sigma)}$,

$$\langle ij|\hat{V}_\delta|\widetilde{k\ell}\rangle = \frac{V_0^{(\mathrm{T}=0)}}{2}\int d\mathbf{r}\,\left[\sum_{\sigma_i,\sigma_j}(\phi_i^{(\sigma_i)})^\star\,(\phi_j^{(\sigma_j)})^\star\,\langle\sigma_i\sigma_j|\right](\hat{\mathbb{1}}+\hat{P}^\sigma)\left[\sum_{\sigma_k,\sigma_\ell}\phi_k^{(\sigma_k)}\,\phi_\ell^{(\sigma_\ell)}\,|\sigma_k\sigma_\ell\rangle\right]\times$$
$$\langle\tau_i\tau_j|(\hat{\mathbb{1}}-\hat{P}^\tau)|\tau_k\tau_\ell\rangle$$

$$= \frac{V_0^{(\mathrm{T}=0)}}{2}\int d\mathbf{r}\left[\sum_{\sigma_i,\sigma_j,\sigma_k,\sigma_\ell}(\phi_i^{(\sigma_i)})^\star\,(\phi_j^{(\sigma_j)})^\star\,\phi_k^{(\sigma_k)}\,\phi_\ell^{(\sigma_\ell)}\left(\delta_{\sigma_i\sigma_k}\delta_{\sigma_j\sigma_\ell}+\delta_{\sigma_i\sigma_\ell}\delta_{\sigma_j\sigma_k}\right)\right]\times$$
$$\left(\delta_{\tau_i\tau_k}\delta_{\tau_j\tau_\ell}-\delta_{\tau_i\tau_\ell}\delta_{\tau_j\tau_k}\right)\,.$$

$$\langle ij|\hat{V}_\delta|\widetilde{k\ell}\rangle = \frac{V_0^{(\mathrm{T}=0)}}{2}\int d\mathbf{r}\Big[\left(\phi_i^{+\star}\phi_j^{-\star}+\phi_i^{-\star}\phi_j^{+\star}\right)\left(\phi_k^+\phi_\ell^-+\phi_k^-\phi_\ell^+\right)+$$
$$2\left(\phi_i^{+\star}\phi_j^{+\star}\phi_k^+\phi_\ell^+ + \phi_i^{-\star}\phi_j^{-\star}\phi_k^-\phi_\ell^-\right)\Big]\left(\delta_{\tau_i\tau_k}\delta_{\tau_j\tau_\ell}-\delta_{\tau_i\tau_\ell}\delta_{\tau_j\tau_k}\right)\,.$$

Enfin, la décomposition des fonctions $\phi_i^\pm(\mathbf{r})$ sur la base B.O.H.S.A. se fait au moyen des fonctions $f_i^\pm(z,\rho)$ définies dans l'annexe C, comme

$$\phi_i^\pm(\mathbf{r}) = \psi_{\Lambda_i^\pm}(\varphi)\,f_i^\pm(z,\rho)\,, \tag{2.34}$$

où les $\psi_{\Lambda_i^\pm}(\varphi)$ sont définis par

$$\psi_{\Lambda_i^\pm}(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{\mathrm{i}\Lambda_i^\pm\varphi}\,, \tag{2.35}$$

et $\Lambda_i^{\pm} = \Omega_i \mp \frac{1}{2}$.

Compte tenu de ces notations et en omettant toujours les dépendances en z et ρ des fonctions f, on aboutit à,

$$\begin{aligned}\langle ij|\hat{V}_\delta|\widetilde{kl}\rangle = \frac{V_0^{(\mathrm{T}=0)}}{8\pi^2}\int_0^{2\pi} d\varphi\, e^{i(\Omega_k+\Omega_\ell-\Omega_i-\Omega_j)\varphi}\int_{-\infty}^{\infty}dz\int_0^{\infty}\rho d\rho\Big[\left(f_i^+f_j^- + f_i^-f_j^+\right)\left(f_k^+f_\ell^- + f_k^-f_\ell^+\right)\\ + 2\left(f_i^+f_j^+f_k^+f_\ell^+ + f_i^-f_j^-f_k^-f_\ell^-\right)\Big]\left(\delta_{\tau_i\tau_k}\delta_{\tau_j\tau_\ell} - \delta_{\tau_i\tau_\ell}\delta_{\tau_j\tau_k}\right)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\langle ij|\hat{V}_\delta|\widetilde{kl}\rangle = \frac{V_0^{(\mathrm{T}=0)}}{2\pi}\,\delta_{\Omega_i+\Omega_j,\Omega_k+\Omega_\ell}\left(\delta_{\tau_i\tau_k}\delta_{\tau_j\tau_\ell} - \delta_{\tau_i\tau_\ell}\delta_{\tau_j\tau_k}\right)\times\\ \int_0^{\infty}dz\int_0^{\infty}\rho d\rho\Big[\left(f_i^+f_j^- + f_i^-f_j^+\right)\left(f_k^+f_\ell^- + f_k^-f_\ell^+\right) + 2\left(f_i^+f_j^+f_k^+f_\ell^+ + f_i^-f_j^-f_k^-f_\ell^-\right)\Big]\end{aligned} \tag{2.36}$$

Dans nos calculs, nous ne considérerons jamais la brisure de la symétrie de parité. Ainsi, l'intervalle d'intégration sur z peut se ramener à l'intervalle $[0, +\infty]$.

Triplet d'isospin et singulet de spin

De la même manière que précédemment, dans le canal T = 1 (i.e. S = 0). Dans ce cas, on a $V_0^{(\mathrm{T}=0)} = 0$ et l'interaction $\hat{V}_\delta$ prend la forme

$$\hat{V}_\delta(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) = \frac{V_0^{(\mathrm{T}=1)}}{4}\hat{\delta}(\mathbf{r})\big(\hat{\mathbb{1}} - \hat{P}^\sigma\big)\big(\hat{\mathbb{1}} + \hat{P}^\tau\big)\,, \tag{2.37}$$

et on trouve,

$$\begin{aligned}\langle ij|\hat{V}_\delta|\widetilde{kl}\rangle &= \frac{V_0^{(\mathrm{T}=1)}}{4}\langle ij|\hat{\delta}(\hat{\mathbb{1}} - \hat{P}^\sigma)(\hat{\mathbb{1}} + \hat{P}^\tau)|\widetilde{kl}\rangle\\ &= \frac{V_0^{(\mathrm{T}=1)}}{2}\langle ij|\hat{\delta}(\hat{\mathbb{1}} - \hat{P}^\sigma)(\hat{\mathbb{1}} + \hat{P}^\tau)|kl\rangle\\ \langle ij|\hat{V}_\delta|\widetilde{kl}\rangle &= \frac{V_0^{(\mathrm{T}=1)}}{2\pi}\,\delta_{\Omega_i+\Omega_j,\Omega_k+\Omega_\ell}\left(\delta_{\tau_i\tau_k}\delta_{\tau_j\tau_\ell} + \delta_{\tau_i\tau_\ell}\delta_{\tau_j\tau_k}\right)\times\\ &\quad\int_0^{\infty}dz\int_0^{\infty}\rho d\rho\left(f_i^+f_j^- - f_i^-f_j^+\right)\left(f_k^+f_\ell^- - f_k^-f_\ell^+\right)\,.\end{aligned} \tag{2.38}$$

2.2 Construction de la base à N corps

2.2.1 Choix du schéma de troncation

Conjointement à la simplification faite concernant l'interaction résiduelle afin de décrire spécifiquement un certain type de corrélation, la base à N corps sera elle aussi construite dans ce même esprit.

Nous avons vu qu'il était nécessaire de réaliser une troncation de l'espace à un corps, sous-tendu par la base HF, ainsi que de l'espace à N corps. Concernant la base à N corps, il s'agira de sélectionner le type d'excitations que l'on juge pertinentes pour décrire les corrélations d'intérêt.

Habituellement, dans toutes les études menées avec HTDA, le choix de l'espace des états individuels était fait au moyen d'un seuil en énergie, noté X, délimitant l'*espace de valence* (au sens du Modèle en Couches) autour de l'énergie de Fermi E_F (ou du *potentiel chimique* au sens de la thermodynamique). Tous les états individuels dont l'énergie est incluse dans la fenêtre $[E_F - X\,; E_F + X]$ sont inclus dans le modèle. Par analogie avec le Modèle en Couches, les états sous la fenêtre d'excitation formeront un *cœur inerte* et tous les états au-dessus seront inaccessibles aux excitations.

Le paramètre X constitue alors un paramètre de l'interaction résiduelle au même titre que l'intensité $V_0^{(\mathrm{T})}$ dans le cas de la force $\hat{V}_\delta$. Ces paramètres seront donc à ajuster pour reproduire un certain nombre de données expérimentales.

Pour le cas de l'interaction $\hat{V}_\delta$, on pourra ainsi ajuster ces paramètres pour reproduire par exemple des différences de masses entre noyaux pairs et impairs. Le paramètre X est alors de quelques MeV pour les noyaux lourds et atteint 15 à 20 MeV pour les noyaux les plus légers.

Lors de l'étude réalisée par H. Naïdja [44] sur les corrélations vibrationnelles quadrupolaires, l'interaction résiduelle utilisée était basée sur une force à deux corps séparables quadrupole-quadrupole $\hat{Q}\hat{Q}$. La taille de la fenêtre à un corps pouvait atteindre plusieurs dizaines de MeV autour du niveau de Fermi et l'intensité de la force $\hat{Q}\hat{Q}$ était ajustée pour reproduire les premiers moments de distributions d'intensité associées aux résonnances géantes quadrupolaires isoscalaires.

Concernant, le type d'excitations retenues, il a été montré [39, 43] que les excitations de paires étaient les seules excitations pertinentes pour la description des corrélations d'appariement avec une force $\hat{V}_\delta$. Étant donné que cette force décrit aussi bien l'appariement neutron-neutron et proton-proton que les corrélations neutron-proton, il est évident qu'il faut également tenir compte des excitations (simples ou multiples) de toute nature en isospin.

Si l'on s'intéresse aux corrélations d'appariement uniquement dans HTDA, on ne construit la base $\mathcal{B}$ qu'avec des excitations de paires. Dans ce cas particulier, il est intéressant de remarquer que la base des états propres à un corps du hamiltonien de HF constitue la base canonique pour HTDA. En effet, les éléments de matrice de la densité réduite à un corps sont diagonaux dans cette base

$$\rho_{ij} = \langle\Psi|\hat{\mathrm{a}}_j^\dagger\hat{\mathrm{a}}_i|\Psi\rangle = \sum_{a,b}\chi_a\chi_b\langle\Phi_a|\hat{\mathrm{a}}_j^\dagger\hat{\mathrm{a}}_i|\Phi_b\rangle = \begin{cases}\delta_{ij}\sum\limits_{a,b}\chi_a\chi_b & \text{si } i\in|\Phi_a\rangle \text{ et } i\in|\Phi_b\rangle\,,\\ 0 & \text{sinon}\,.\end{cases} \tag{2.39}$$

D'autre part, pour l'étude citée plus haut portant sur les corrélations vibrationnelles, les excitations retenues étaient les excitations 1p1h–neutron, 1p1h–proton ainsi que les deux types simultanément.

Dans ce travail nous nous sommes intéressés à un nouveau mode de troncation de l'espace à un corps et surtout de l'espace à N corps. Le nouveau critère de sélection des états à N corps porte sur l'énergie d'excitation individuelle associée à ce déterminant de Slater, c'est-à-dire sur la valeur propre de $\hat{H}_{\mathrm{IQP}}$ correspondante. Tout déterminant de Slater dont l'énergie d'excitation de quasi-particule est supérieure à une énergie de coupure E_0^* sera rejeté du modèle. La taille de la fenêtre à un corps est alors automatiquement ajustée pour pouvoir permettre toutes les excitations autorisées par ce seuil en énergie d'excitation. Dans le cas d'une description des corrélations d'appariement, les configurations les moins « coûteuses en énergie » sont les tranferts d'une seule paire et la fenêtre à un corps est ajustée selon la méthode précédente utilisée avec un seuil

$$X = \frac{E_0^*}{2}\,. \tag{2.40}$$

Cette nouvelle procédure permet, à taille de fenêtre fixée, de réduire considérablement la taille de la base $\mathcal{B}$ par rapport à l'ancienne approche. Naturellement, l'énergie E_0^* est, au même titre que

le paramètre X, un paramètre de l'interaction résiduelle. Il faudra alors s'assurer que cette énergie de coupure soit suffisamment grande pour permettre d'atteindre une richesse suffisante de la fonction d'onde. De plus, il faut toujours pouvoir, avec une énergie E_0^* adéquate, trouver une intensité de l'interaction résiduelle permettant de reproduire les données expérimentales souhaitées.

En outre, un des gros avantages de cette nouvelle façon de tronquer l'espace de configuration est de pouvoir enrichir le modèle dans la direction de l'ordre d'excitation. Ainsi, pour des temps de calculs similaires voire inférieurs à ce que l'on pouvait avoir avec l'ancienne méthode en tenant compte des transferts de une et deux paires, on peut maintenant inclure des ordres supérieurs. En pratique, nous avons considéré dans nos calculs les tranferts de triples paires de toutes sortes possibles.

La base $\mathcal{B}$ que nous construisons dans cette approche peut être vue comme une sélection des configurations les plus pertinentes pour le problème étudié. Nous reviendrons sur les détails pratiques ainsi que sur diverses études faites sur cette énergie E_0^* dans le chapitre 3.

2.2.2 Contraintes de symétrie

Le hamiltonien $\hat{H}$ du système commute avec un certain nombre d'opérateurs de symétrie. Les noyaux que nous allons considérer dans notre étude, sont tous pairs-pairs, rigides et déformés dans leur état intrinsèque avec une déformation axiale. Choisissant l'axe z comme axe de déformation et de quantification, le hamiltonien $\hat{H}$ commutera avec la projection sur l'axe z du moment cinétique total $\hat{J}_z$, ainsi qu'avec la parité $\hat{\pi}$. La fonction d'onde totale sera donc caractérisée par sa valeur propre de $\hat{J}_z$ et sa parité : $K^\pi = 0^+$.

De plus, le hamiltonien $\hat{H}$ commute avec le renversement du sens du temps $\hat{\mathcal{T}}$. Un état propre de ce hamiltonien aura donc une parité bien définie par rapport au renversement du temps.

On peut alors utiliser cette propriété du système pour construire les états à N corps de la base $\mathcal{B}$ de façon plus judicieuse. En effet, les états constituant réellement notre base, notés $|\Phi^{(\pm)}\rangle$, seront déduits des excitations particule-trous $|\Phi\rangle$ par

$$|\Phi^{(\pm)}\rangle = \frac{\hat{\mathbf{P}}_{\mathcal{T}}^{(\pm)}|\Phi\rangle}{\sqrt{\langle\Phi|\hat{\mathbf{P}}_{\mathcal{T}}^{(+)\dagger}\hat{\mathbf{P}}_{\mathcal{T}}^{(+)}|\Phi\rangle}} = \frac{\hat{\mathbf{P}}_{\mathcal{T}}^{(\pm)}|\Phi\rangle}{\sqrt{\langle\Phi|\hat{\mathbf{P}}_{\mathcal{T}}^{(+)}|\Phi\rangle}}\,, \tag{2.41}$$

avec, le projecteur

$$\hat{\mathbf{P}}_{\mathcal{T}}^{(\pm)} = \frac{1}{2}\left(\hat{\mathbb{1}} \pm \hat{\mathcal{T}}\right) \tag{2.42}$$

vérifiant bien $\hat{\mathbf{P}}_{\mathcal{T}}^{(\pm)\dagger} = \hat{\mathbf{P}}_{\mathcal{T}}^{(\pm)}$ et $\hat{\mathbf{P}}_{\mathcal{T}}^{(\pm)2} = \hat{\mathbf{P}}_{\mathcal{T}}^{(\pm)}$ pour un système composé d'un nombre pair de fermions.

Ainsi, les états $|\Phi^{(\pm)}\rangle$ s'écriront en fonction de $|\Phi\rangle$ normé (et de son renversé de temps $|\overline{\Phi}\rangle$) comme

$$|\Phi^{(\pm)}\rangle = \begin{cases} \delta_+|\Phi\rangle & \text{si } |\Phi\rangle = |\overline{\Phi}\rangle\,, \\ \delta_-|\Phi\rangle & \text{si } |\Phi\rangle = -|\overline{\Phi}\rangle\,, \\ \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|\Phi\rangle \pm |\overline{\Phi}\rangle\Big) & \text{sinon}\,, \end{cases} \tag{2.43}$$

avec la notation $\delta_+ = 1$ pour $|\Phi^{(+)}\rangle$ et 0 pour $|\Phi^{(-)}\rangle$ et inversement pour δ_-.

Il est intéressant de mentionner une conséquence pratique pour le hamiltonien $\hat{H}_{\text{IQP}}$. Pour les noyaux pairs-pairs dans leur état fondamental, le spectre d'états individuels présente la dégénérescence de Kramers. De ce fait, un état $|\Phi_i\rangle$ aura la même énergie d'excitation de quasi-particule E_i^* que son

état renversé dans le temps $|\overline{\Phi_i}\rangle$. Le hamiltonien $\hat{H}_{\text{IQP}}$ reste donc diagonal dans la base composée des états $|\Phi_i^{(\pm)}\rangle$ avec les valeurs propres E_i^*.

L'état de référence pour les excitations particule-trous $|\Phi_0\rangle$ est, par construction, pair par renversement du sens du temps ($|\Phi_0\rangle = |\overline{\Phi_0}\rangle$). Cet état doit contribuer avec un poids non nul à la fonction d'onde fondamentale $|\Psi\rangle$. Ainsi, tous les états de la base $\mathcal{B}$ contribuant à la fonction d'onde fondamentale seront nécessairement pairs par renversement du sens du temps dès lors que l'interaction $\hat{V}_{\text{res}}$ qui les couple commute avec $\hat{\mathcal{T}}$. Si l'on souhaite décrire uniquement l'état fondamental du système il est alors suffisant de ne considérer que les états de type $|\Phi^{(+)}\rangle$ dans la base. En pratique, les états $|\Phi\rangle$ qui ne sont pas pairs par renversement du temps sont composés d'au moins une excitation de type neutron-proton. Finalement, on adoptera comme notation pour les états $|\Phi^{(+)}\rangle$

$$|\Phi^{(+)}\rangle = \begin{cases} |\Phi\rangle & \text{si } |\Phi\rangle = |\overline{\Phi}\rangle\,, \\ |\widetilde{\Phi}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|\Phi\rangle + |\overline{\Phi}\rangle\Big) & \text{sinon}\,. \end{cases} \tag{2.44}$$

Une autre symétrie qu'il est important de considérer est la symétrie d'isospin. Cette symétrie est une symétrie approchée du système. Elle est en effet faiblement brisée par l'interaction coulombienne qui est la seule source physique de brisure considérée dans notre approche (voir discussion du chapitre 5). Toutefois la faible importance de cette brisure doit se refléter dans le modèle et une fonction d'onde corrélée HTDA doit être quasiment fonction propre de l'opérateur d'isospin $\hat{\mathbf{T}}^2$ (voir chapitre 4). Cela signifie que l'état HF $|\Phi_0\rangle$, comme la base $\mathcal{B}$, doivent être rigoureusement invariants de $\hat{\mathbf{T}}^2$ en l'absence d'interaction coulombienne dans le cas où $N = Z$. Lorsqu'on considère des excitations complexes comme des transferts de multiples paires de tout isospin possible, il est assez difficile de construire une base $\mathcal{B}$ qui respecte ce critère, surtout si l'on considère un schéma de troncation basé sur l'énergie d'excitation individuelle E^*. Dans une situation réaliste, les spectres à un corps de neutrons et de protons différent légèrement et on peut avoir certains états retenus par l'énergie de coupure E_0^* mais pas leur état *analogue*. La gestion d'une telle situation est exposée dans le chapitre 5.

2.2.3 Excitations de paires pour l'appariement

Dans ce paragraphe, nous allons décrire brièvement l'algorithme de construction des paires multiples développé dans ce travail. Par souci de simplicité, nous allons mettre de côté le problème mentionné précédemment concernant la symétrie d'isospin. Nous allons simplement montrer comment sont construites de telles excitations sans se soucier de cette contrainte.

La construction des transferts de paires, simples voire doubles, ne pose a priori pas de problème majeur. Il suffit de balayer les états individuels de la fenêtre d'excitation et lorsque deux (ou quatre) états forment une (ou deux) paires on retient en mémoire la configuration. Un problème se pose lorsque l'on voudra généraliser cette procédure à un nombre quelconque de paires. En effet on ne pourra alors pas connaître à l'avance le nombre de boucles imbriquées nécessaires pour les construire toutes.

Pour remédier à cet écueil, une procédure complètement différente a été imaginée. Elle permet de se ramener, quel que soit le nombre de paires désiré, à un nombre fixé de boucles imbriquées. Cette procédure est composée de trois étapes principales.

- <u>Étape 1</u>

La première étape consiste à trier l'espace à un corps par paires de particules repérées par leur isospin, *nn* ($\mathrm{T}_z = 1$), *np* ($\mathrm{T}_z = 0$) et *pp* ($\mathrm{T}_z = -1$). Ce tri est fait pour les états de trou et de particule séparément. À ce stade, un même état à un corps peut intervenir en même temps dans une paire *np* et

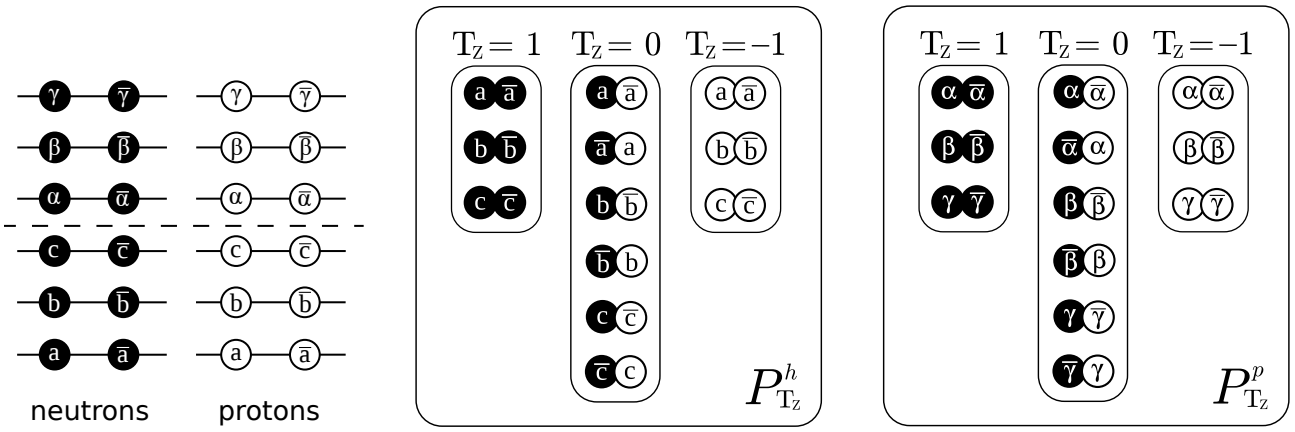


FIGURE 2.1 – Schéma illustratif de l'étape 1 de l'algorithme de construction des excitations de paires multiples dans HTDA. À gauche, un exemple d'espace de valence et au centre et à droite, les ensembles $P^h_{\mathrm{T}_z}$ et $P^p_{\mathrm{T}_z}$ correspondants.

une paire $\mathrm{T}_z = \pm 1$. On forme ainsi des ensembles $P^h_{\mathrm{T}_z}$ de paires d'états de trou et des ensembles $P^p_{\mathrm{T}_z}$ de paires d'états de particule. Un exemple est présenté sur la figure 2.1.

La définition d'une paire *np* généralise celle des paires $\mathrm{T}_z = \pm 1$. En présence d'une dégénérescence de Kramers, une paire $\mathrm{T}_z = \pm 1$ sera constituée d'un état $|i\rangle$ et de son conjugué de Kramers $|\bar{i}\rangle$, de même énergie et de spin Ω_i opposé. Pour les paires *np*, on ne peut pas procéder de la même façon. Pour un neutron donné, son *partenaire* proton sera l'état de spin Ω opposé qui présentera le recouvrement maximum avec ce neutron. Il s'agit du conjugué de Kramers de l'état analogue de ce neutron.

◦ ÉTAPE 2

À partir de ces ensembles de paires d'états de trou et de particules disponibles pour les excitations, on construit tous les ensembles possibles de $n = 1, 2, 3 \ldots N$ paires d'une même valeur de $\mathrm{T}_z = 0,\ \pm 1$ (où N désigne le nombre total de paires que l'on souhaite exciter). Ces nouveaux ensembles sont notés $\mathcal{P}^h_{n,\mathrm{T}_z}$ pour les trous et $\mathcal{P}^p_{n,\mathrm{T}_z}$ pour les particules.

Cette étape est l'étape clé qui permet de simplifier le problème. Les nouveaux ensembles $\mathcal{P}^{h,p}_{n,\mathrm{T}_z}$ sont construits par récurrence à partir des ensembles $\mathcal{P}^{h,p}_{n-1,\mathrm{T}_z}$. Utiliser un tel algorithme à ce stade n'est pas du tout pénalisant en terme de temps de calcul car on raisonne sur des ensembles d'entiers très petits.

Un exemple de tels ensembles est donné sur la figure 2.2. On y présente l'ensemble des doubles paires parmi les états de trou pour les trois valeurs de T_z possibles.

◦ ÉTAPE 3

La troisième étape consiste à parcourir les ensembles $\mathcal{P}^{h,p}_{n,\mathrm{T}_z}$ pour former l'excitation souhaitée. Pour illustrer le principe, prenons l'exemple d'une excitation de N paires. Durant cette excitation, on conserve le nombre de neutrons et de protons indépendamment, ou, de façon équivalente, le nombre de particules et l'isospin T_z de l'état de départ $|\Phi_0\rangle$.

Pour générer toutes les excitations possibles, on va piocher dans les états de trou, i paires *nn*, j paires *np* et k paires *pp* parmi les configurations disponibles dans les ensembles $\mathcal{P}^h_{i,1}$, $\mathcal{P}^h_{j,0}$ et $\mathcal{P}^h_{k,-1}$ respectivement.

De même, pour les états de particule, on piochera α paires *nn*, β paires *np* et γ paires *pp* parmi les configurations disponibles dans les ensembles $\mathcal{P}^p_{\alpha,1}$, $\mathcal{P}^p_{\beta,0}$ et $\mathcal{P}^p_{\gamma,-1}$ respectivement.

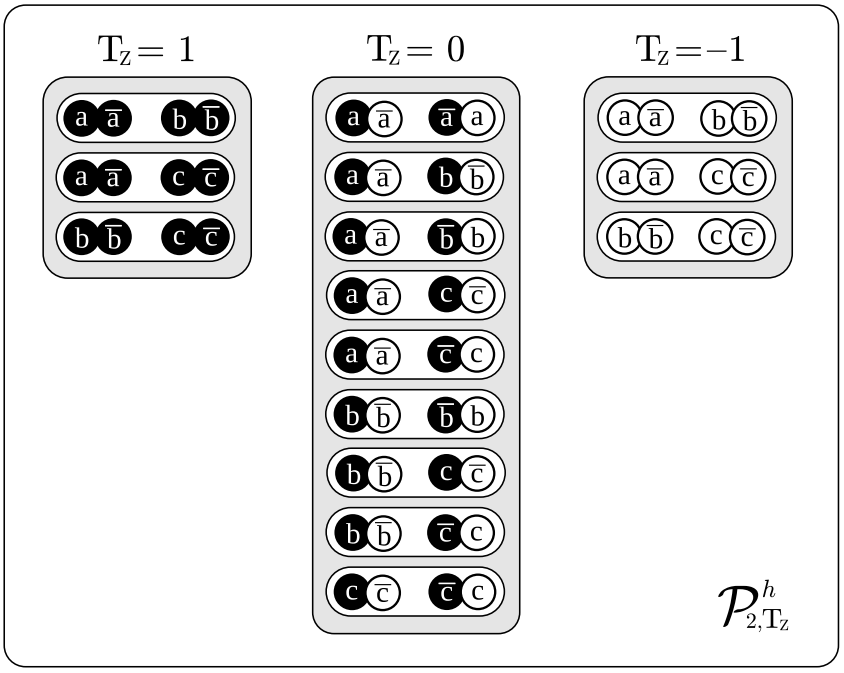


FIGURE 2.2 – Schéma illustratif de l'étape 2 de l'algorithme de construction des excitations de paires multiples dans HTDA. Ici, l'exemple de l'ensemble $\mathcal{P}^h_{n=2,\mathrm{T}_z}$ des lots de doubles paires ($n = 2$) parmi les paires disponibles dans les états de trou.

La conservation du nombre de paires et de l'isospin s'écrivent

$$i + j + k = \alpha + \beta + \gamma = N \quad \text{et} \quad i - k = \alpha - \gamma \,. \tag{2.45}$$

Ainsi, les différentes valeurs possibles pour ces paramètres sont

$$i \in [0\,;N] \;, \quad j \in [0\,;N-i] \quad \text{et} \quad k = N - i - j \,, \tag{2.46}$$

$$\alpha \in [\alpha_{\min}\,;\alpha_{\max}] \;, \quad \beta = 2(i-\alpha) + j \quad \text{et} \quad \gamma = N - \alpha - \beta \,. \tag{2.47}$$

Les bornes $\alpha_{\min}$ et $\alpha_{\max}$ de α sont contraintes pour satisfaires les trois conditions indépendantes

$$0 \leqslant \alpha \leqslant N \qquad , \qquad \beta \geqslant 0 \qquad \text{et} \qquad \alpha + \beta \leqslant N \,. \tag{2.48}$$

On trouve finalement

$$\alpha_{\min} = \max\{0, i-k\} \quad \text{et} \quad \alpha_{\max} = \min\left\{N, \mathrm{E}\left(i + \frac{j}{2}\right)\right\} \,, \tag{2.49}$$

où $\mathrm{E}(x)$ désigne la fonction partie entière de x.

Une fois que l'on a des nombres i, j, k et α, β, γ fixés, on doit balayer les différentes configurations listées dans les ensembles $\mathcal{P}^{h,p}_{n,\mathrm{T}_z}$ correspondants. Un exemple plus concret est donné sur la figure 2.3.

Bien évidemment, durant ces balayages, il faudra s'assurer de ne pas piocher des paires np et des paires $\mathrm{T}_z = \pm 1$ faisant intervenir le même état. Une vérification systématique est inévitable car on ne peut pas anticiper ce problème.

i	j	k	α	β	γ	
0	0	2	0	0	2	
0	1	1	0	1	1	
0	2	0	0	2	0	
0	**2**	**0**	**1**	**0**	**1**	←
1	0	1	0	2	0	
1	0	1	1	0	1	
1	1	0	1	1	0	
2	0	0	2	0	0	

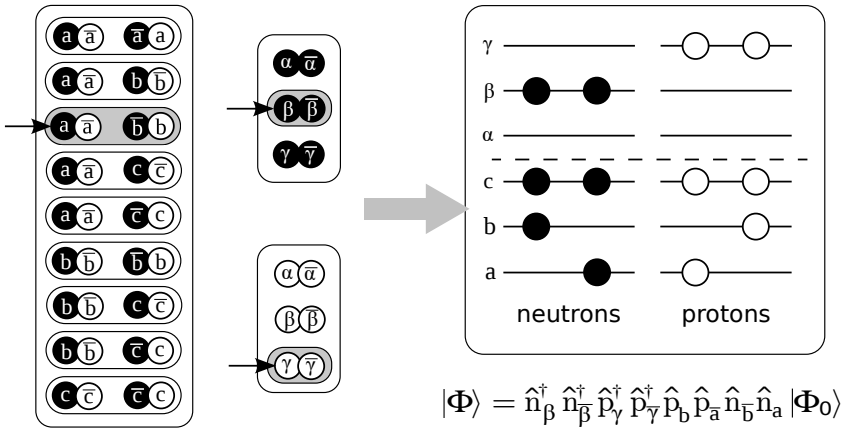


FIGURE 2.3 – Schéma illustratif de l'étape 2 de l'algorithme de construction des excitations de paires multiples dans HTDA. À gauche sont présentées les différentes valeurs possibles des paramètres i, j, k, α, β et γ pour $N = 2$. À droite, on illustre la construction d'un déterminant de Slater possible correspondant à la configuration répérée par une flèche dans le tableau de gauche.

Toutefois, comme on l'a vu dans le paragraphe précédent, on souhaite construire des états toujours de type $|\Phi^{(+)}\rangle$ pour décrire l'état fondamental du système. En pratique, il suffira de construire uniquement les états $|\Phi\rangle$ et de ne pas considérer leur renversé de temps (s'il est différent) $|\overline{\Phi}\rangle$. Il est clair que le problème se posera lorsque l'on considérera des paires np. Afin d'éviter des tests inutiles qui ralentirait le programme, on peut anticiper cette restriction dès la construction des ensembles $\mathcal{P}^{h,p}_{n,\mathrm{T}_z}$. On peut facilement prévoir quelles configurations de ces ensembles vont conduire de façon générale à des *« doublons »* par renversement du temps.

Enfin, il reste à préciser un dernier détail. Il concerne les transferts d'au moins deux paires pour lesquelles un ou plusieurs niveaux (neutron + proton) de trou (ou de particule) sont vidés (ou remplis). Un tel niveau peut être vu, soit comme une paire nn et la paire pp analogue, soit comme deux paires np renversées de temps l'une de l'autre. Il est donc nécessaire d'établir une convention ici pour l'interprétation de ces niveaux. Nous avons choisi de les considérer comme étant constitués d'une paire nn et d'une paire pp.

Chapitre 3

La physique de l'appariement dans HTDA

Contenu du chapitre

Introduction

3.1 Description d'une fonction d'onde corrélée HTDA

3.2 Structure en isospin de la fonction d'onde corrélée

- ◦ En présence de canal T = 1 uniquement
- ◦ En présence de canal $T = 1$ et $T = 0$

3.3 Convergence de la fonction d'onde corrélée

- ◦ Structure en ordre d'excitation de paires de la fonction d'onde corrélée
- ◦ Convergence en ordre d'excitation de paires de la fonction d'onde corrélée

3.4 Influence de l'énergie de coupure E_0^*

- ◦ Impact sur l'énergie de corrélation
- ◦ Impact sur la structure de la fonction d'onde corrélée

Introduction

Avant d'aborder l'étude principale de ce travail qui concerne l'évaluation du mélange d'isospin dans les noyaux $N \sim Z$, son évolution en fonction des corrélations d'appariement et ensuite l'étude de transitions β de Fermi, nous allons nous intéresser à la description des corrélations d'appariement dans l'approche HTDA.

Le but de cette étude est de mieux comprendre de quelle façon le taux de corrélation de la fonction d'onde HTDA dépend des paramètres du modèle, à savoir l'intensité de l'interaction $\hat{V}_\delta$ dans chacun des canaux d'isospin et la borne supérieure d'énergie d'excitation individuelle E_0^*.

De nombreux travaux [39, 43, 46] ont déjà été entrepris dans ce sens dans le cadre de l'approche HTDA. Dans ce travail cependant, un certain nombre de nouveautés ont été apportées. Toutes les configurations de simples, doubles et triples paires possibles sont désormais prises en compte, cela incluant les *brisures/recombinaisons* de paires multiples. De plus, le schéma de sélection des configurations particule-trou basé sur l'énergie d'excitation individuelle de chaque déterminant de Slater remplace le précédent lié uniquement à la troncation de la base à un corps.

Dans une première partie nous décrirons l'influence des deux canaux d'isospin de l'interaction résiduelle sur la structure de la fonction d'onde fondamentale tant au niveau de l'ordre d'excitation des configurations la composant qu'au niveau de la nature en isospin de ces configurations. Dans un deuxième temps, l'influence de l'énergie de coupure E_0^* sur la structure de la fonction d'onde sera étudiée.

3.1 Description d'une fonction d'onde corrélée HTDA

Afin d'illustrer la structure de la fonction d'onde corrélée HTDA, nous nous placerons dans un cas typique de calcul qui sera représentatif des futures études sur l'isospin. Nous allons donc considérer l'exemple du ^{48}Cr.

Pour cette première étude, nous allons fixer la valeur de l'énergie de coupure E_0^*. La valeur choisie sera celle retenue pour l'étude de mélange d'isospin (voir chapitre 6). Afin de choisir cette énergie de façon indépendante du noyau considéré, on la paramètre en fonction de la masse comme

$$E_0^* = \alpha\,\hbar\omega = \alpha \times 41\,A^{-1/3}\ [\text{MeV}]\,. \tag{3.1}$$

Le paramètre $\hbar\omega$ est l'écart typique entre deux couches majeures d'oscillateur harmonique sphérique. On considère traditionnellement que ce dernier, exprimé en MeV, varie comme $41A^{-1/3}$ [47]. Cette variation en fonction de A n'est a priori valable que pour des noyaux à couches fermées mais nous montrerons dans la deuxième partie de ce chapitre que l'on peut tout de même raisonner en ces termes pour un noyau déformé comme c'est le cas ici. Dans ce travail, nous avons pu mettre en évidence qu'une valeur « universelle » de $\alpha = 3$ est satisfaisante. Dans le cas du ^{48}Cr, cela nous donne $E_0^* = 33.845$ MeV.

La taille de la base à N corps $\mathcal{B}$ est de 5525 configurations (incluant le quasi-vide d'excitations particule-trou $|\Phi_0\rangle$). Le détail de cette base en ordre d'excitations particule-trou est donné dans le tableau 3.1. Une seule configuration d'ordre 8 (deux paires nn et deux paires pp) est possible avec une telle énergie de coupure E_0^* et nous la négligerons par la suite. La base est construite ici de façon à être rigoureusement invariante d'isospin à la limite où il n'y a pas d'interaction coulombienne.

Avant d'étudier l'influence des corrélations sur la structure de la fonction d'onde fondamentale du ^{48}Cr décrite dans ce modèle, nous allons introduire quelques notations. L'état fondamental s'écrit comme

$$|\Psi\rangle = \chi_0|\Phi_0\rangle + \sum_{i\in\text{SP}} \chi_i^{(\text{SP})}|\Phi_i^{(\text{SP})}\rangle + \sum_{i\in\text{DP}} \chi_i^{(\text{DP})}|\Phi_i^{(\text{DP})}\rangle + \sum_{i\in\text{TP}} \chi_i^{(\text{TP})}|\Phi_i^{(\text{TP})}\rangle\,. \tag{3.2}$$

Une excitation de N paires $|\Phi^{(N\text{P})}\rangle$ s'écrit, selon la notation de l'annexe A,

$$|\Phi^{(N\text{P})}\rangle = \prod_{i=1}^{2N} \hat{\text{a}}_{\alpha_i}^\dagger \prod_{j=2N}^{1} \hat{\text{a}}_{a_j}|\Phi_0\rangle = \prod_{k=1}^{\nu} \hat{\text{n}}_{\alpha_k}^\dagger \prod_{\ell=1}^{\pi} \hat{\text{p}}_{\alpha_{\nu+\ell}}^\dagger \prod_{m=\pi}^{1} \hat{\text{p}}_{a_{\nu+m}} \prod_{n=\nu}^{1} \hat{\text{n}}_{a_n}|\Phi_0\rangle\,. \tag{3.3}$$

Comme dans l'annexe A, les états $\{\alpha_i\}$ désignent les états inoccupés de $|\Phi_0\rangle$ et $\{a_j\}$, ses états occupés. Les opérateurs $\hat{\text{n}}_i^\dagger$ sont des $\hat{\text{a}}_i^\dagger$ agissant sur des états de neutron et les $\hat{\text{p}}_i^\dagger$ sont des $\hat{\text{a}}_i^\dagger$ agissant sur des états de proton. L'ordre d'excitation de $|\Phi^{(N\text{P})}\rangle$ est alors la somme des ordres d'excitation de neutron ν et de proton π.

Parmi les simples, doubles et triples paires qui composent la base $\mathcal{B}$, les configurations sont classées, pour les discussions à venir, par ordre d'excitation de neutron ν à titre d'exemple. Le détail des

SP	DP	TP	*supérieures*
256	3302	1966	1

TABLEAU 3.1 – Détail de la base à N corps $\mathcal{B}$. Sont listés le nombre de simples paires (SP), de doubles paires (DP) et de triples paires (TP). Une seule excitation d'ordre supérieur (QP) est retenue avec la valeur $E_0^* = 33.845$ MeV dans le ^{48}Cr.

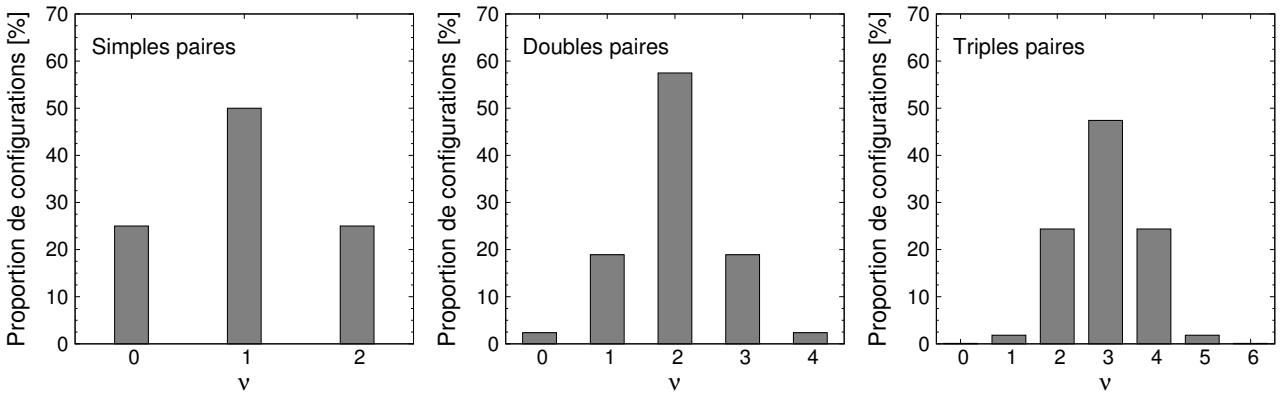


FIGURE 3.1 – Proportion des états de la base en fonction de l'ordre d'excitation de neutron ν ramenée au poids de chaque ordre d'excitation.

proportions de chaque type de configuration en fonction de ν est donné par la figure 3.1.

Pour les simples paires (SP), la lecture des différentes composantes en fonction de ν est assez simple. Les configurations telles que $\nu = 0$ correspondent aux excitations de paires pp, celles correspondant à $\nu = 1$ sont des transferts de paires np et les dernières ($\nu = 2$) sont des excitations de paires nn.

On remarque qu'il y a deux fois plus d'excitations de paires np que de paires nn ou pp. Ceci est dû au renversement du sens du temps et au fait qu'il y a plus de possibilités d'excitation de paires np indépendantes vis-à-vis de cette symétrie. La figure 5.1 du chapitre 5 illustre ce point.

Pour les configurations d'ordre supérieur, le même principe s'applique et la distribution des configurations en fonction de ν prend une allure en cloche centrée sur la valeur moyenne de ν (i.e. $\nu_{\max}/2$).

Pour les doubles paires, les configurations telles que $\nu = 0$ (resp. $\nu = 4$) sont des excitations de doubles paires pp (resp. nn). Pour $\nu = 1$ (resp. $\nu = 3$), il s'agit d'excitations d'une paire np et d'une paire pp (resp. nn). Enfin, pour $\nu = 2$, beaucoup de combinaisons sont possibles. Il s'agit d'excitations de type $2np$, $nn + pp$ et les combinaisons mixtes qui sont des brisures/recombinaisons de paires.

De même pour les triples paires, les cas $\nu = 0$, 1, 5 et 6 sont évidents, les autres sont plus complexes.

Dans tous les cas, afin de respecter la symétrie d'isospin dans notre modèle, nous devons au minimum nous assurer de construire des configurations à N corps qui présentent une distribution en fonction de ν symétrique par rapport à $\nu_{\max}/2$.

3.2 Structure en isospin de la fonction d'onde corrélée

Nous allons examiner ici l'influence des différents canaux d'isospin de l'interaction résiduelle $\hat{V}_\delta$ sur la proportion de configurations de chaque type repérées par leur valeur de ν et ce pour chaque ordre d'excitation indépendamment. On ne se préoccupera pas de savoir ici quels sont les poids relatifs de chaque ordre d'excitation. Nous nous occuperons de cette question dans un deuxième temps.

◦ EN PRÉSENCE DE CANAL T = 1 UNIQUEMENT

À titre d'exemple, nous avons considéré une intensité dans le canal T = 1 de l'interaction $\hat{V}_\delta$ égale à -200 MeV fm^3. Pour l'instant, nous prenons une intensité nulle dans le canal T = 0.

Le détail des poids relatifs $\mathrm{W}_{N\mathrm{P}}^{(\nu)}$ de chaque type de configuration en fonction de ν (où N est mis pour S, D ou T) dans la fonction d'onde corrélée est donnée par la figure 3.2. Pour chaque ordre

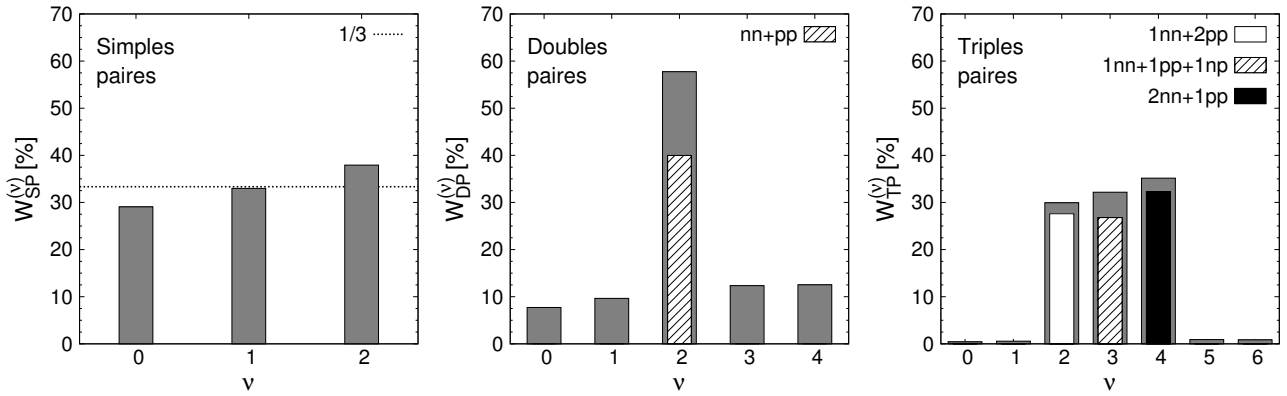


FIGURE 3.2 – Poids des différentes configurations dans la fonction d'onde fondamentale corrélée HTDA du ^{48}Cr obtenue pour $V_0^{(\mathrm{T}=1)} = -200$ MeV fm^3 et $V_0^{(\mathrm{T}=0)} = 0$.

d'excitation (SP, DP et TP) nous avons exprimé le poids des configurations d'un ν donné, rapporté au poids total des configurations de l'ordre en question

$$\mathrm{W}_{N\mathrm{P}}^{(\nu)} = \frac{\sum_{i\in N\mathrm{P}_\nu} |\chi_i^{(N\mathrm{P})}|^2}{\sum_{i\in N\mathrm{P}} |\chi_i^{(N\mathrm{P})}|^2} \,, \tag{3.4}$$

où $N\mathrm{P}_\nu$ désigne le sous-ensemble des configurations d'un ν donné parmi les NP.

Pour les configurations de simples paires, on remarque alors que les poids $\mathrm{W}_{\mathrm{SP}}^{(\nu)}$ sont comparables. Cela se comprend parfaitement du fait que l'interaction $\hat{V}_\delta$ est isoscalaire. D'après l'expression (2.38) de ces éléments de matrice et du fait du principe de Pauli, l'interaction $\hat{V}_\delta$ va favoriser deux fois moins les paires np (i.e. $\nu = 1$) que les paires $\mathrm{T}_z = \pm 1$. Cependant, comme nous l'avons vu précédemment, ces configurations sont deux fois plus nombreuses que les autres. Ceci explique ce rééquilibrage des $\mathrm{W}_{\mathrm{SP}}^{(\nu)}$ dans la fonction d'onde fondamentale de ce noyau $N = Z$.

La petite différence qui apparaît entre les valeurs de ν est due aux différences des spectres d'états individuels HF et aux différences des fonctions d'ondes à un corps de neutrons et de protons. Cette différence est causée par l'interaction coulombienne qui est la seule source de brisure de la symétrie d'isospin dans notre modèle.

Elle a pour effet notamment de dilater le spectre en énergie des protons au niveau de Fermi par rapport à celui des neutrons. Une excitation donnée de protons est alors plus « coûteuse » en énergie individuelle que l'excitation analogue pour les neutrons. Ceci explique la croissance des poids $\mathrm{W}_{\mathrm{SP}}^{(\nu)}$ en fonction de ν.

Concernant les doubles paires, on observe un rééquilibrage identique pour les configurations $\nu = 0$, 1, 3 et 4, avec une fois de plus, une légère tendance croissante en fonction de ν due à l'interaction coulombienne.

Pour $\nu = 2$, certaines configurations, déjà importantes en nombre dans la base $\mathcal{B}$, sont renforcées par le canal $\mathrm{T} = 1$ de $\hat{V}_\delta$. Il s'agit des excitations d'une paire nn et d'une paire pp ($nn + pp$). L'importante contribution de ces dernières au poids $\mathrm{W}_{\mathrm{DP}}^{(2)}$ est mise en évidence sur la figure 3.2.

L'intervention des doubles paires dans la fonction d'onde fondamentale du système est un processus qui intervient à partir du deuxième ordre des perturbations dans l'interaction résiduelle. En effet, cette interaction étant à deux corps, elle ne pourra pas coupler directement ces excitations de doubles paires au quasi-vide $|\Phi_0\rangle$ (considéré alors comme l'état non perturbé). Le couplage des doubles paires à $|\Phi_0\rangle$ se fait alors via les excitations de simples paires selon le schéma de la figure 3.3. Sur cette figure on

voit que les configurations de doubles paires avec $\nu = 2$ sont les plus alimentées via les simples paires. Ceci explique pourquoi ce type de configuration domine dans la fonction d'onde fondamentale.

Enfin, pour les triples paires, on remarque également un équilibrage des configurations $\nu = 2$, 3 et 4 avec une légère augmentation en fonction de ν. Les configurations dominantes pour ces trois valeurs centrales de ν sont mises en évidence sur la figure 3.2. La même allure se dessine pour les configurations $\nu = 0$, 1, 5 et 6 même si celles-ci sont devenues négligeables.

Il se passe ici globalement les mêmes mécanismes d'alimentation par l'interaction $\hat{V}_\delta$ via les doubles paires mais seulement à partir de l'ordre 3 des perturbations.

◦ En présence de canal $T = 1$ et $T = 0$

À partir de la situation précédente, nous allons maintenant activer progressivement le canal T = 0 de l'interaction résiduelle $\hat{V}_\delta$. On mesure alors l'intensité de ce canal relativement à l'intensité dans le canal T = 1 par le paramètre sans dimension $X = V_0^{(\mathrm{T}=0)}/V_0^{(\mathrm{T}=1)}$. L'impact de ce nouveau canal de $\hat{V}_\delta$ sur la structure en isospin de la fonction d'onde corrélée est montrée sur la figure 3.4.

La solution obtenue à $X = 0$ correspond à celle décrite par la figure 3.2. On peut voir ici que pour chaque ordre d'excitation, le canal T = 0 de $\hat{V}_\delta$ favorise essentiellement les configurations associées à la valeur centrale $\nu = \nu_{\max}/2$. On observe également un changement de régime autour de $X \sim 3/4$. En

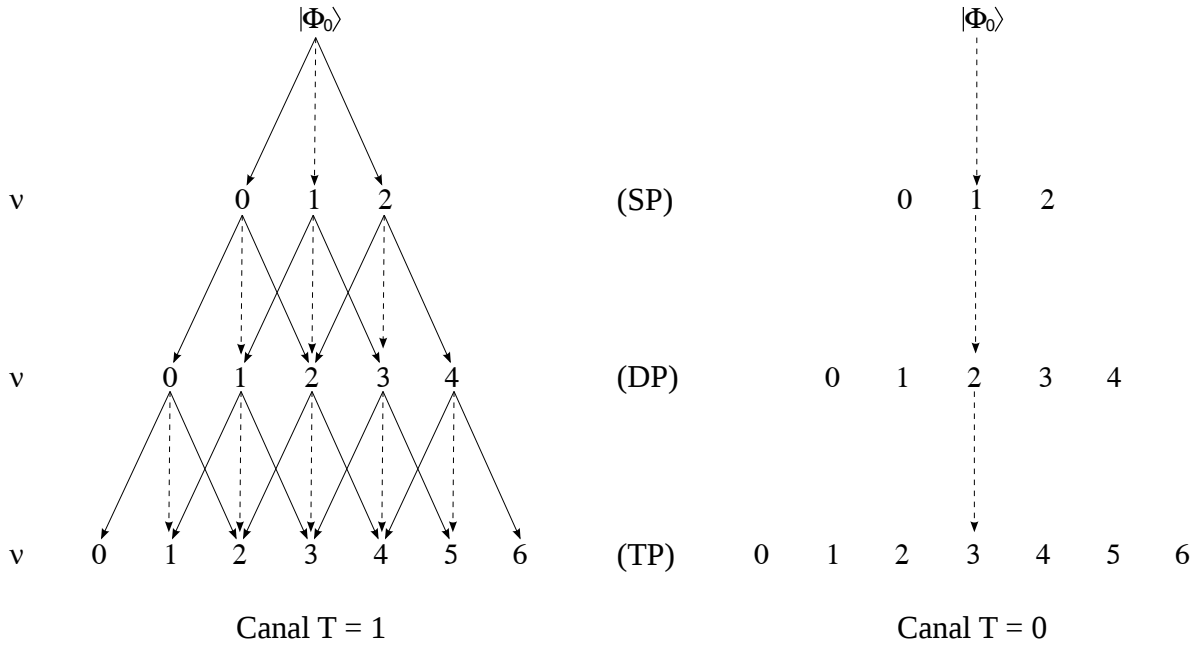
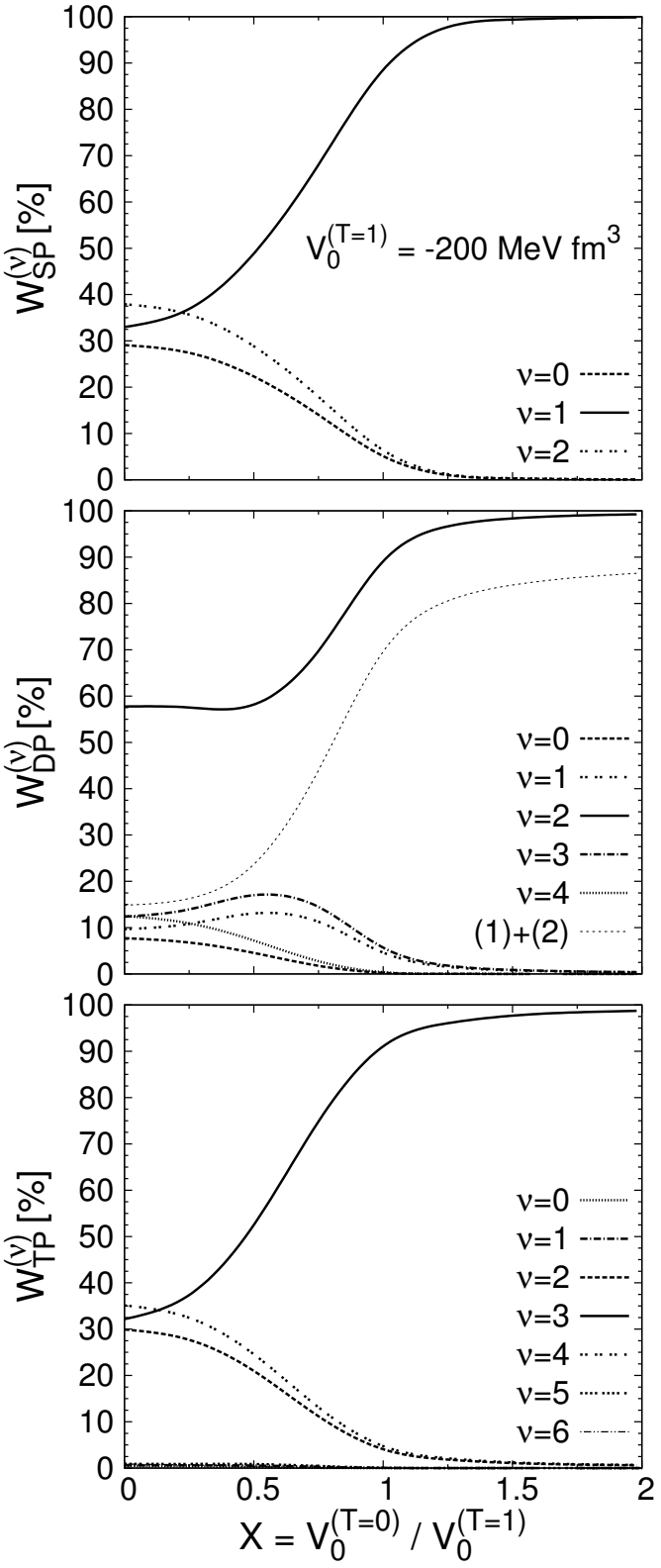


Figure 3.3 – Schéma d'alimentation des différentes configurations dans la fonction d'ondes fondamentale corrélée par le canal T = 1 (à droite) ou par le canal T = 0 (à gauche) de l'interaction résiduelle. Chaque étage (de haut en bas) correspond à un ordre supplémentaire des perturbations. Ainsi, les SP sont les seules à être alimentées par $\hat{V}_\delta$ au premier ordre, puis viennent les DP à partir de l'ordre 2 et enfin les TP à partir de l'ordre 3. Les flèches en trait plein symbolisent les canaux $\mathrm{T}_z = \pm 1$ tandis que les flèches en pointillés repésentent le canal $\mathrm{T}_z = 0$ de $\hat{V}_\delta$. Ce schéma n'inclut pas les mécanismes d'alimentation des brisures/recombinaisons de paires multiples.



deça de cette valeur, les deux canaux de l'interaction sont en compétition tandis qu'au-delà, le canal T = 0 se met à dominer.

Pour les doubles paires, les configurations avec $\nu = 1$ et 3 augmentent légèrement dans le premier régime avant de s'effondrer dans le second. Ceci s'explique facilement sachant que le canal T = 0 de $\hat{V}_\delta$ ne peut exciter que des paires *np*. La partie « *np* » des configurations $\nu = 1$ et 3 augmente alors au début sans perturber le poids relatif des paires *nn* et *pp* de ces mêmes configurations. Lors du changement de régime, le poids de toutes les configurations $T_z = \pm 1$ chute au profit des configurations $T_z = 0$, les configurations $\nu = 1$ et 3 se mettent alors à baisser pour laisser la place aux configurations les plus favorisées $\nu = 2$. Au-delà du changement de régime, on se retrouve dans la situation décrite à la droite de la figure 3.3.

Parmi les configurations dominantes $\nu = 2$ dans le second régime, on peut repérer les transferts de doubles paires *np* (1) et un certain type de brisures/recombinaisons de paires, à savoir la destruction de deux paires *np* et la création d'une paire *nn* et d'une paire *pp* (2). Dans ce second régime, chacune de ces catégories contribuent autant que l'autre et leur somme est représentée par la courbe en pointillés « (1)+(2) ».

Les triples paires présentent exactement la même évolution des configurations $\nu = 2$, 3 et 4 que celle des simples paires. Encore une fois, c'est la valeur centrale de ν qui est favorisée. Dans le second régime, il n'y a pas clairement une ou deux catégories de paire qui expliquent la courbe $\nu = 3$, le nombre de configurations possibles étant trop important notamment pour les brisures/recombinaisons de paires multiples.

FIGURE 3.4 – Poids des différentes configurations pour l'ensemble des états correspondants à un nombre de paires donné, calculés pour la fonction d'onde fondamentale corrélée HTDA du ^{48}Cr en fonction de X, obtenue pour $V_0^{(T=1)} = -200$ MeV fm^3. Pour les doubles paires, la courbe « (1)+(2) » repère la somme des poids de deux types de configuration $\nu = 2$ (voir texte).

En conclusion, nous avons vu que les deux canaux d'isospin de $\hat{V}_\delta$ favorisent préférentiellement les configurations correspondant à des valeurs centrales de ν. Le canal T = 1 tend à équilibrer les différentes configurations par palliers. Le canal T = 0 est beaucoup plus sélectif et ne favorise que la configuration centrale $\nu = \nu_{max}/2$.

3.3 Convergence en nombre de paires de la fonction d'onde corrélée

Dans ce paragraphe nous allons examiner l'importance relative des différents ordres d'excitation de paires dans la fonction d'onde fondamentale corrélée. Nous étudierons cette structure en fonction de l'intensité dans chaque canal de l'interaction $\hat{V}_\delta$.

Puis, dans un deuxième temps nous considérerons la convergence de la fonction d'onde en fonction du nombre de paires excitées.

◦ Structure en ordre d'excitation de paires de la fonction d'onde corrélée

La structure de la fonction d'onde corrélée HTDA est présentée sur la figure 3.5. Sur la figure de gauche, on peut voir l'évolution de cette structure en fonction de l'intensité $V_0^{(\mathrm{T=1})}$ avec $X = 0$ et à droite, l'évolution de cette même structure en fonction de $X = V_0^{(\mathrm{T=0})}/V_0^{(\mathrm{T=1})}$ pour $V_0^{(\mathrm{T=1})} = -200$ MeV fm^3.

Lorsqu'on considère le canal T = 1 de $\hat{V}_\delta$ seul, la dépopulation du quasi-vide $|\Phi_0\rangle$ présente une décroissance lente et monotone en fonction de l'intensité $V_0^{(\mathrm{T=1})}$. Cette dépopulation se fait tout d'abord au profit des excitations de simples paires qui atteignent environ 50% de contribution à la fonction d'onde corrélée pour $V_0^{(\mathrm{T=1})} = -500$ MeV fm^3. Viennent ensuite les doubles paires qui croissent lentement et atteignent 10% pour cette même intensité. Les excitations de triples paires ont un poids négligeable dans la fonction d'onde corrélée quelle que soit l'intensité $V_0^{(\mathrm{T=1})}$ dans la plage de valeurs considérée.

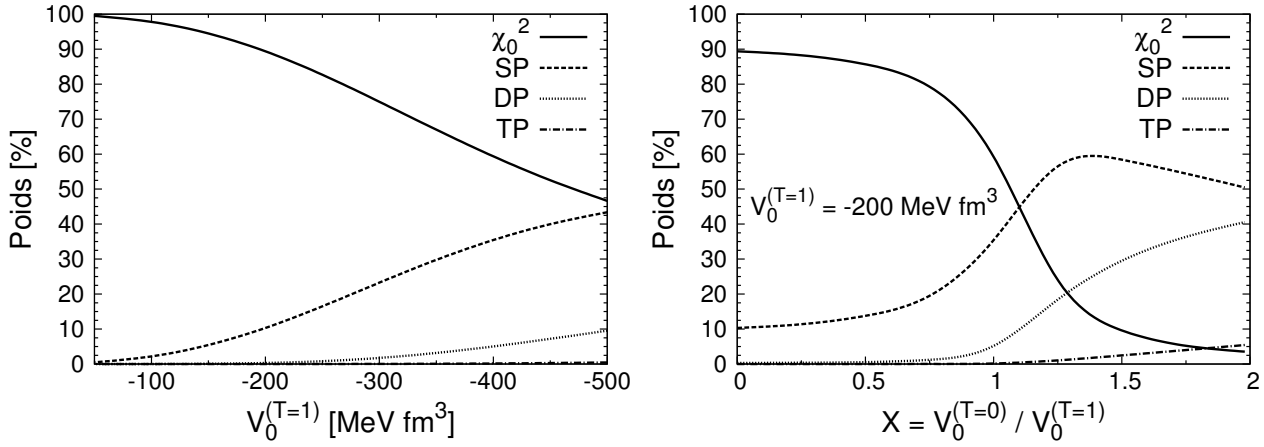


Figure 3.5 – Structure de la fonction d'onde corrélée en fonction de l'ordre d'excitation. À gauche : l'évolution de cette structure en fonction de l'intensité de l'interaction $\hat{V}_\delta$ dans le canal T = 1 et en l'absence de canal T = 0. À droite : même figure en fonction de l'intensité de $\hat{V}_\delta$ dans le canal T = 0 et pour $V_0^{(\mathrm{T=1})} = -200$ MeV fm^3. La quantité χ_0^2 représente le poids du quasi-vide $|\Phi_0\rangle$ dans la fonction d'onde.

Lorsqu'on augmente progressivement l'intensité dans le canal T = 0 de $\hat{V}_\delta$ dans le cadre d'un exemple illustratif où $V_0^{(\mathrm{T}=1)} = -200$ MeV fm^3, les changements de structure de la fonction d'onde sont beaucoup plus rapides. Le quasi-vide $|\Phi_0\rangle$ ne contribue plus qu'à environ 10% dans la fonction d'onde corrélée pour $X = 1.5$ c'est-à-dire pour $V_0^{(\mathrm{T}=0)} = -300$ MeV fm^3.

On remarque alors un changement de régime autour de $X = 1$. Au-delà de cette valeur, ce sont les excitations de simples et doubles paires qui dominent dans la fonction d'onde. Les simples paires présentent un maximum de leur contribution pour $X \approx 1.3$ avant de diminuer lentement. Cette dépopulation des simples paires et du quasi-vide, qui continue de chuter, se fait au profit des doubles paires et, dans une moindre mesure, des triples paires. Ces dernières commencent à apparaître de façon sensible un peu au-delà de $X = 1$ et elles atteignent 5% pour $X = 2$ (ce qui correspond à $V_0^{(\mathrm{T}=0)} = -400$ MeV fm^3).

◦ Convergence en ordre d'excitation de paires de la fonction d'onde corrélée

Plusieurs études (voir par exemple les références [46, 48]) ont montré que la structure d'une fonction d'onde HTDA (ou obtenue dans un formalisme proche) décrivant les corrélations d'appariement, converge avec l'ordre d'excitation. Nous allons examiner comment ce processus se met en place lorsque l'on fait varier l'intensité de la force d'appariement $\hat{V}_\delta$ dans chacun des canaux d'isospin.

La figure 3.6 présente la structure de la fonction d'onde corrélée composée de simples paires uniquement (SP) puis de simples et doubles paires (SP+DP) et enfin de simples, doubles et triples paires (SP+DP+TP) en fonction de l'intensité de $\hat{V}_\delta$ dans le canal T = 1 seul (à gauche) et en présence de canal T = 0, avec $V_0^{(\mathrm{T}=1)} = -200$ Mev fm^3 (à droite).

Examinons tout d'abord ce qui se passe en présence d'une interaction dans le canal T = 1 seulement. Considérons pour commencer, le cas des excitations de simples paires. La présence des doubles paires dans le modèle va renforcer leur poids d'une dizaine de pourcents bien que ces doubles paires ne contribuent elles-mêmes qu'à moins de 10% dans la fonction d'onde corrélée. Ce processus de renforcement est un processus non linéaire. On remarque que la prise en compte des triples paires ne modifie pas le poids des simples paires. Ceci se comprend par les considérations perturbatives du paragraphe 3.2. En effet, l'interaction résiduelle étant une interaction à deux corps, elle ne peut pas coupler les excitations de simples paires aux excitations de triples paires par un processus du premier ordre.

On peut remarquer que ce processus de renforcement est également visible pour les doubles paires. La présence des triples paires renforce les doubles paires d'un ou deux pourcents pour des intensités $V_0^{(\mathrm{T}=1)}$ supérieures en valeur absolue à 300 MeV fm^3. Ce léger effet se répercute donc sur les simples paires par un effet domino, et celles-ci se voient renforcées de quelques dixièmes de pourcent. Il est donc impossible d'apprécier cet effet d'ordre 2 sur la figure 3.6.

En conséquence, le poids de $|\Phi_0\rangle$, et par complément, le taux de corrélation mesuré par $1 - \chi_0^2$, est convergé à la dizaine de pourcents en présence des excitations de simples et doubles paires dans la fonction d'onde, et au pourcent en présence des triples paires.

En ce qui concerne cette convergence de la fonction d'onde en présence du canal T = 0 de $\hat{V}_\delta$, les choses sont un peu différentes.

On peut remarquer que la saturation des simples paires à $X \sim 1.3$, déjà discutée au paragraphe précédent, est absente si ces configurations sont les seules présentes dans la fonction d'onde (au-delà de $|\Phi_0\rangle$). Elle n'apparaît que lorsque l'on tient compte des doubles paires et est encore accentuée de façon très sensible (modification de l'ordre de la dizaine de pourcents) en présence des triples paires.

D'autre part, les excitations de doubles paires sont renforcées de plusieurs pourcents en présence des triples paires, cette modification atteignant environ 10% pour $X = 2$.

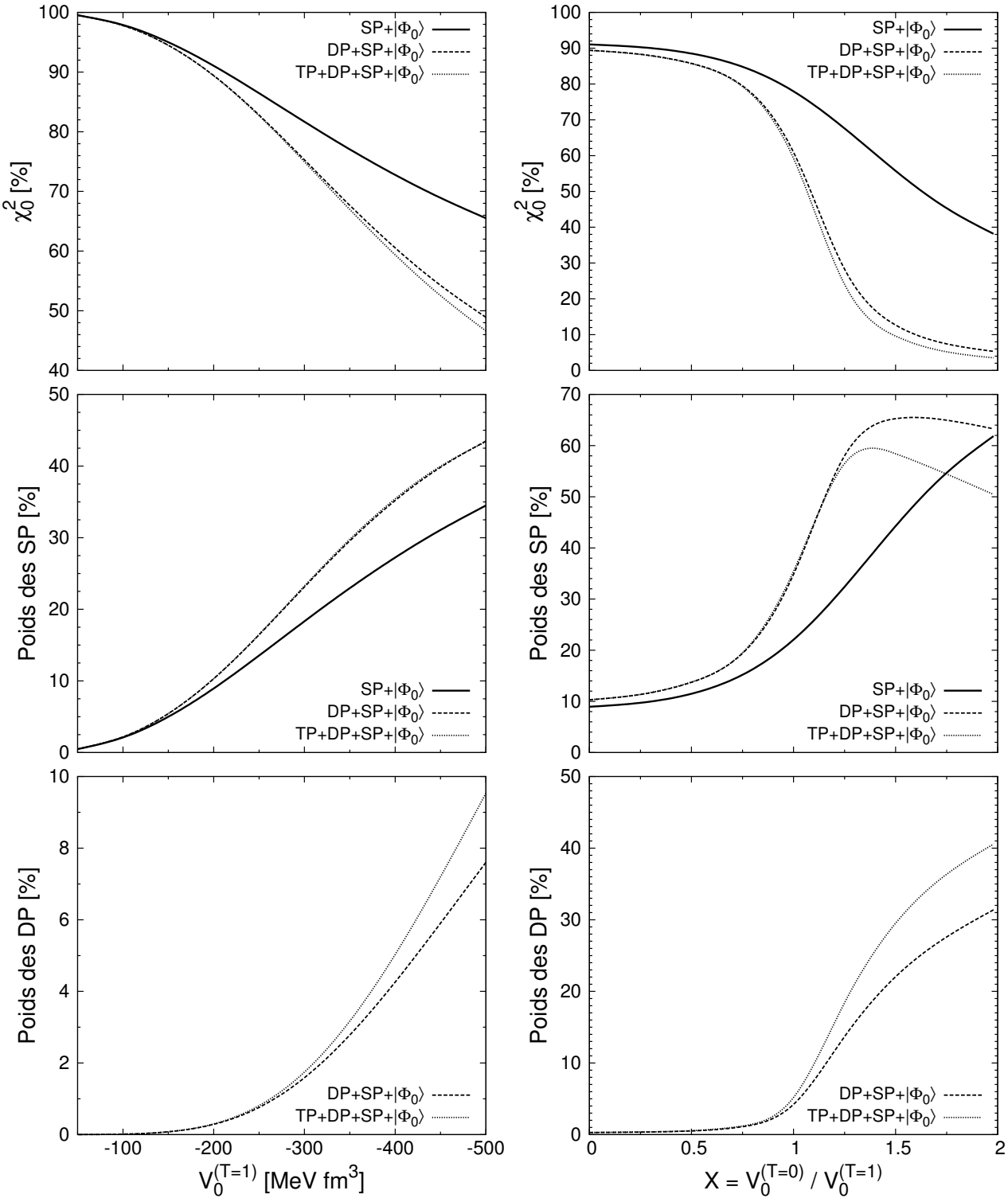


FIGURE 3.6 – Convergence des différentes composantes de la fonction d'onde corrélée en fonction de l'ordre d'excitation maximal inclus et en fonction de l'intensité des différents canaux d'isospin de $\hat{V}_\delta$ (canal T = 1 seul à gauche et canal T = 0 à droite pour $V_0^{(\mathrm{T}=1)} = -200$ MeV fm^3. Les panneaux supérieurs présentent la convergence du poids de $|\Phi_0\rangle$, les panneaux du milieu présentent celle des SP et les panneaux du bas, celle des DP.

La structure de la fonction d'onde en simples et doubles paires ne semble pas alors être tout à fait convergée à ce stade. Cependant, il est intéressant de remarquer que les simples paires et les doubles paires sont modifiées dans des sens opposés par la présence des triples paires. Ceci se répercute sur le taux de corrélation de la fonction d'onde de manière analogue à ce qui avait été obtenu dans la situation précédente (canal T = 1 de $\hat{V}_\delta$ seul). En effet, ce taux de corrélation est convergé à la dizaine de pourcents avec les doubles paires et au pourcent avec les triples paires. Par conséquent, nous ne tiendrons pas compte des configurations d'ordre supérieur dans le reste de notre travail.

3.4 Influence de l'énergie de coupure E_0^*

Dans cette dernière partie, nous allons étudier comment l'énergie de corrélation ainsi que la structure de la fonction d'onde corrélée évoluent en fonction de l'énergie de coupure E_0^* définissant la taille de l'espace du modèle.

La taille de la base $\mathcal{B}$ augmente très rapidement avec l'énergie E_0^*. Le tableau 3.2 présente les différentes tailles de base obtenues pour des énergies E_0^* allant de $2\hbar\omega = 22.563$ MeV à $5\hbar\omega = 56.408$ MeV. Toutes les configurations jusqu'aux triples paires sont prises en compte. On ne retient pas ici les excitations d'ordres supérieurs qui pourraient apparaître pour des valeurs élevées de E_0^*.

E_0^*		SP	DP	TP	Total
$2\hbar\omega$	22.563 MeV	104	378	8	491
$3\hbar\omega$	33.845 MeV	256	3302	1966	5525
$4\hbar\omega$	45.126 MeV	468	13504	28050	42023
$5\hbar\omega$	56.408 MeV	768	38875	196890	236534

TABLEAU 3.2 – Taille de la base $\mathcal{B}$ en fonction de l'énergie de coupure E_0^* (le calcul de la taille totale inclut le quasi-vide $|\Phi_0\rangle$).

◦ IMPACT SUR L'ÉNERGIE DE CORRÉLATION

L'énergie de corrélation HTDA, définie en (2.8), est tracée sur la figure 3.7 en fonction de l'énergie de coupure E_0^* et en fonction de l'intensité de $\hat{V}_\delta$ dans le canal T = 1 seul (à gauche) et en présence d'une force dans le canal T = 0, avec $V_0^{(\mathrm{T}=1)} = -200$ MeV fm^3 (à droite).

On peut remarquer sur cette figure que l'énergie de corrélation converge très lentement avec la taille de l'espace du modèle pour des valeurs absolues d'intensité inférieures à $|V_0^{(\mathrm{T}=1)}| = 300$ MeV fm^3 et $X = 1$. Au-delà de ces valeurs, l'énergie de corrélation E_{corr} ne converge plus. Ce problème est connu dès lors que l'on travaille avec une interaction de contact $\hat{V}_\delta$ pour décrire l'appariement. En effet, les éléments de matrice d'une telle interaction n'ont aucune raison de diminuer avec l'énergie particule-trou.

En règle générale, l'énergie de corrélation E_{corr} ne cesse d'augmenter avec la force de l'interaction $\hat{V}_\delta$, qu'elle se traduise par un espace de modèle plus grand ou par une intensité plus importante.

◦ IMPACT SUR LA STRUCTURE DE LA FONCTION D'ONDE CORRÉLÉE

La figure 3.8 présente (de haut en bas) le poids dans la fonction d'onde corrélée, du quasi-vide $|\Phi_0\rangle$, des simples paires, des doubles paires et enfin des triples paires en fonction de l'intensité de $\hat{V}_\delta$ dans le

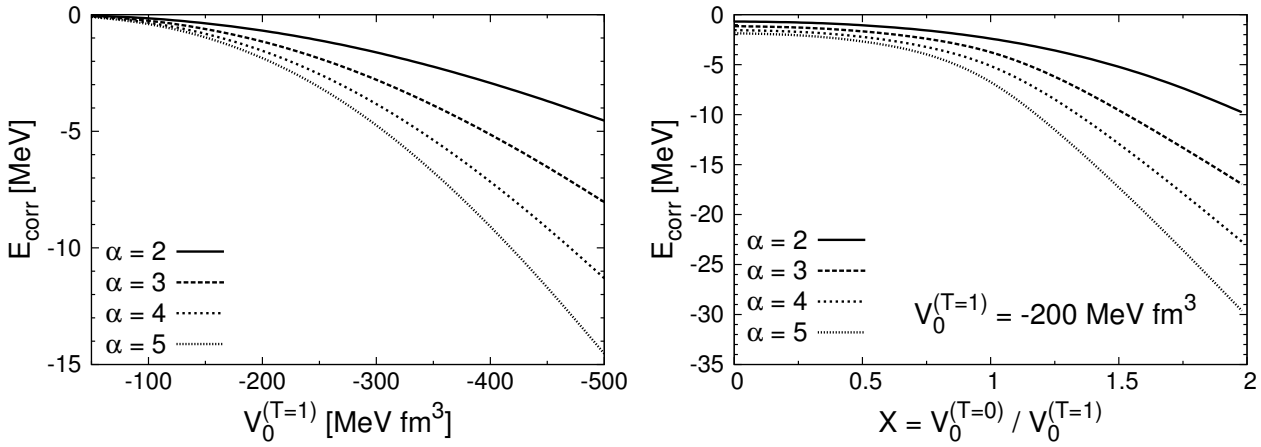


FIGURE 3.7 – L'énergie de corrélation HTDA E_{corr} tracée en fonction de l'énergie de coupure E_0^* et en fonction de $V_0^{(\text{T=1})}$ à gauche et de X à droite pour $V_0^{(\text{T=1})} = -200$ MeV fm^3.

canal T = 1 seul (à gauche) et en présence de canal T = 0, avec $V_0^{(\text{T=1})} = -200$ Mev fm^3 (à droite).

Comme pour l'énergie de corrélation, on peut constater une convergence plus ou moins rapide de la structure de la fonction d'onde corrélée pour des valeurs assez faibles de la valeur absolue de l'intensité de $\hat{V}_\delta$ ($|V_0^{(\text{T=1})}| < 200$ MeV fm^3 et $X < 0.75$). Au-delà de ces valeurs, la structure de la fonction d'onde HTDA ne converge plus.

De plus, on peut remarquer qu'une énergie de coupure E_0^* trop faible (comme $2\hbar\omega$) ne permet pas d'avoir des triples paires en nombre suffisant dans le modèle. Or nous avons vu que ces configurations jouaient un rôle important dans la convergence en ordre d'excitation de la fonction d'onde surtout en présence du canal T = 0 de l'interaction résiduelle $\hat{V}_\delta$ pour X assez grand.

La taille de l'espace du modèle peut être vue comme un paramètre de la force $\hat{V}_\delta$. Ainsi, à intensités $V_0^{(\text{T=0})}$ et $V_0^{(\text{T=1})}$ fixées, plus l'espace de configuration est grand et plus le taux de corrélation augmente. Autrement dit, les paramètres de la force $\hat{V}_\delta$ que constituent l'énergie de coupure E_0^* et les intensités $V_0^{(\text{T})}$ sont des paramètres indépendants. On peut donc obtenir un taux de corrélation et une énergie de corrélation donnés avec plusieurs triplets de valeurs de ces paramètres.

Toutefois, on peut raisonnablement fixer la valeur de l'énergie E_0^* une fois pour toute pour tous les noyaux considérés. La valeur de $E_0^* = 3\hbar\omega$ permet une richesse suffisante de la fonction d'onde et limite suffisamment la taille de l'espace du modèle. Il devrait alors être possible de reproduire des données expérimentales sensibles aux corrélations d'appariement, par un ajustement des intensités de $\hat{V}_\delta$.

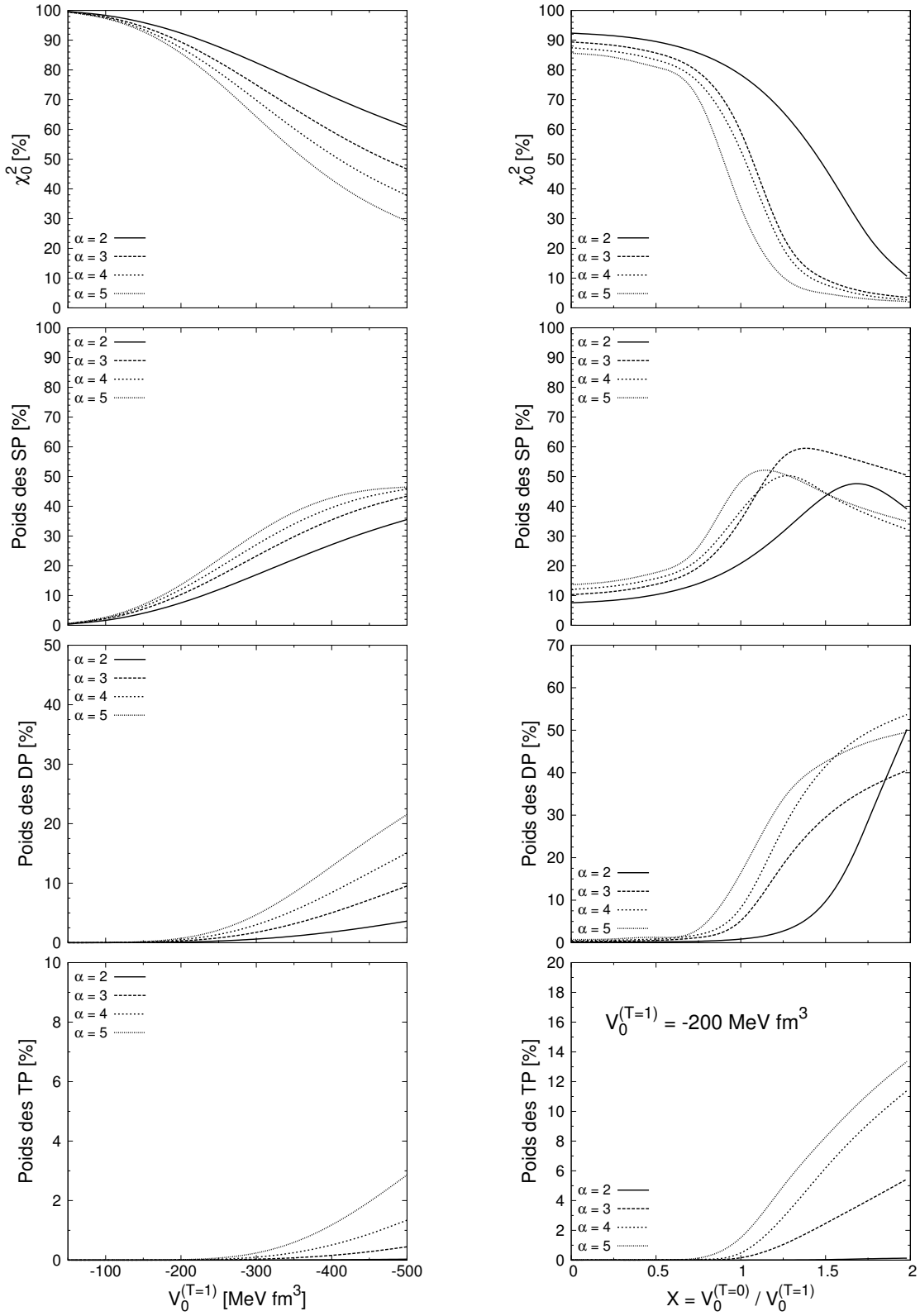


FIGURE 3.8 – Évolution des différentes composantes de la fonction d'onde corrélée en fonction de l'énergie seuil E_0^* et de l'intensité des différents canaux d'isospin de $\hat{V}_\delta$ (canal T = 1 seul à gauche et canal T = 0 à droite pour $V_0^{(\mathrm{T}=1)} = -200$ MeV fm^3). Les panneaux de la première ligne présentent le poids de $|\Phi_0\rangle$, ceux de la deuxième ligne présentent celui des SP, puis sur la troisième ligne, celui des DP et enfin les panneaux du bas montrent celui des TP.

Deuxième partie

Brisure d'isospin dans les noyaux atomiques

Chapitre 4

La symétrie d'isospin et sa brisure

Contenu du chapitre

4.1 La symétrie d'isospin : formalisme
- 4.1.1 Formalisme **SU**(2)
  - ◦ Opérateurs nombre de protons et nombre de neutrons
- 4.1.2 Système de plusieurs nucléons
  - ◦ Couplage de deux nucléons
  - ◦ Structure en isospin de l'interaction coulombienne
  - ◦ Pour aller plus loin...
  - ◦ Système de A nucléons

4.2 Estimation du degré de brisure d'isospin
- 4.2.1 Introduction
- 4.2.2 Techniques usuelles de projection de moments angulaires
  - ◦ Représentation intégrale
  - ◦ Approche algébrique de Löwdin
- 4.2.3 Calcul des probabilités d'isospin par une approche matricielle
- 4.2.4 Projection approchée d'isospin
  - ◦ Projection approchée sur les composantes d'isospin les plus basses
  - ◦ Projection approchée autour d'une valeur dominante

4.3 L'opérateur $\hat{\mathbf{T}}^{2n}$
- 4.3.1 L'opérateur $\hat{\mathbf{T}}^{2n}$ en fonction de $\hat{T}_-^\ell \hat{T}_+^\ell$
- 4.3.2 Décomposition de l'opérateur $\hat{T}_-^\ell \hat{T}_+^\ell$
- 4.3.3 Applications à $\hat{\mathbf{T}}^2$ et $\hat{\mathbf{T}}^4$

4.1 La symétrie d'isospin : formalisme

4.1.1 Formalisme SU(2)

On doit la découverte du neutron à J. Chadwick [49, 50] en 1932. Si l'on omet l'absence de charge électrique de cette particule, elle présente une similitude frappante avec le proton. Ces deux particules ont en effet le même spin et pratiquement la même masse. Elles sont, de plus, pratiquement équivalentes aux yeux de l'interaction forte.

Cette constatation a conduit W. Heisenberg à proposer son formalisme de l'isospin [51, 52] en 1932 également. Pour lui, on peut traiter le neutron et le proton comme deux états possibles de la même

particule, le nucléon. Il associa alors à ces deux états un nouveau nombre quantique qu'il appela le spin isotopique, plus connu désormais sous le nom d'isospin.

Ce degré de liberté interne du nucléon est décrit comme un moment cinétique, noté $\hat{\mathbf{t}}$, analogue au spin des particules mais relié à un espace abstrait d'isospin à trois dimensions. Le nucléon est alors vu comme une particule d'isospin $t = \frac{1}{2}$. Chaque nucléon est donc état propre de l'opérateur $\hat{\mathbf{t}}^2$ avec la valeur propre $t(t+1) = \frac{3}{4}$. Comme pour le spin, les deux états du nucléon se distinguent via l'opérateur $\hat{t}_z$, troisième composante de l'isospin dont ils sont états propres. En physique nucléaire (où généralement $N > Z$) un état de neutron sera associé, par convention, à la valeur propre $t_z = +\frac{1}{2}$ tandis qu'un état de proton sera associé à la valeur propre $t_z = -\frac{1}{2}$.

Tout comme le spin, l'algèbre de l'isospin est celle du groupe $\mathbf{SU}(2)$. L'opérateur à un corps d'isospin est défini par $\hat{\mathbf{t}} = \frac{1}{2}\hat{\boldsymbol{\tau}}$ où τ_x, τ_y et τ_z sont les matrices de Pauli, génératrices de ce groupe

$$\hat{\tau}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \hat{\tau}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \qquad \hat{\tau}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{4.1}$$

impliquant alors les relations

$$\hat{t}_x^2 = \hat{t}_y^2 = \hat{t}_z^2 = \frac{1}{4}\hat{\mathbb{1}} \qquad \text{et} \qquad \hat{\mathbf{t}}^2 = \frac{3}{4}\hat{\mathbb{1}}\,. \tag{4.2}$$

L'opérateur d'isospin vérifie donc les relations de commutation du groupe $\mathbf{SU}(2)$

$$\left[\hat{t}_i, \hat{t}_j\right] = \mathrm{i}\,\varepsilon_{ijk}\;\hat{t}_k \quad \text{avec } i,\ j \text{ et } k \in [x, y, z]\,, \tag{4.3}$$

où le symbole de Levi-Civita ε_{ijk} égal à $+1$ si (ijk) est une permutation paire de (xyz), -1 si la permutation est impaire et 0 si au moins deux des indices i, j et k sont égaux.

On définit également les opérateurs d'augmentation et de diminution $\hat{t}_+$ et $\hat{t}_-$ par $\hat{t}_\pm = \hat{t}_x \pm \mathrm{i}\hat{t}_y$. On obtient alors l'ensemble de relations suivant, venant compléter l'algèbre de l'isospin.

$$\left[\hat{t}_+, \hat{t}_-\right] = 2\hat{t}_z \qquad \left[\hat{t}_z, \hat{t}_\pm\right] = \pm\hat{t}_\pm \qquad \left[\hat{\mathbf{t}}^2, \hat{t}_\pm\right] = \left[\hat{\mathbf{t}}^2, \hat{t}_z\right] = 0 \tag{4.4}$$

$$\left\{\hat{t}_-, \hat{t}_+\right\} = \hat{\mathbb{1}} \qquad \left\{\hat{t}_z, \hat{t}_\pm\right\} = 0 \tag{4.5}$$

où l'expression $\{\hat{A}, \hat{B}\}$ représente l'anticommutateur des opérateurs $\hat{A}$ et $\hat{B}$.

◦ Opérateurs nombre de protons et nombre de neutrons

En combinant les opérateurs définis ci-dessus, on peut dériver une expression simple du projecteur sur les états de proton $\hat{P}_\pi$ et de neutron $\hat{P}_\nu$ comme

$$\hat{P}_\pi = \hat{t}_-\hat{t}_+ = \frac{1}{2} - \hat{t}_z \qquad \text{et} \qquad \hat{P}_\nu = \hat{t}_+\hat{t}_- = \frac{1}{2} + \hat{t}_z\,. \tag{4.6}$$

Ainsi les opérateurs *nombre de protons* $\hat{Z}$ et *nombre de neutrons* $\hat{N}$, agissant dans l'espace de Fock de A particules, prennent la forme suivante

$$\hat{Z} = \sum \hat{P}_\pi = \sum \hat{t}_-\hat{t}_+ = \sum_i \hat{\mathrm{p}}_i^\dagger \hat{\mathrm{p}}_i \tag{4.7}$$

$$\hat{N} = \sum \hat{P}_\nu = \sum \hat{t}_+\hat{t}_- = \sum_i \hat{\mathrm{n}}_i^\dagger \hat{\mathrm{n}}_i\,, \tag{4.8}$$

où les opérateurs $\hat{\mathrm{n}}_i^\dagger$ et $\hat{\mathrm{n}}_i$ ($\hat{\mathrm{p}}_i^\dagger$ et $\hat{\mathrm{p}}_i$) sont des opérateurs de création et d'annihilation de neutron (de proton respectivement). Compte tenu des relations (4.4) et (4.5), les opérateurs $\hat{N}$ et $\hat{Z}$ vérifient les relations

$$\hat{N} + \hat{Z} = \sum \{\hat{t}_-, \hat{t}_+\} = \sum_i \hat{\mathrm{a}}_i^\dagger \hat{\mathrm{a}}_i = \hat{A} \tag{4.9}$$

$$\frac{\hat{N} - \hat{Z}}{2} = \frac{1}{2} \sum [\hat{t}_+, \hat{t}_-] = \sum \hat{t}_z = \hat{T}_z \tag{4.10}$$

où $\hat{A}$ est l'opérateur *nombre de particules* et $\hat{T}_z$ la troisième composante de l'isospin dans l'espace de Fock de A particules (voir sec. 4.1.2).

4.1.2 Système de plusieurs nucléons

Jusqu'à présent le formalisme de l'isospin a été développé de façon analogue à celui du spin. C'est en effet un moment angulaire satisfaisant à l'algèbre du groupe **SU**(2). Cependant, tout ce qui a été développé ici ne s'applique qu'à l'espace de Fock à une particule. Lorsque l'on s'intéresse à l'isospin total d'un système composé de plusieurs nucléons, on a alors recours aux règles classiques de couplage de moments angulaires, de façon identique au couplage de plusieurs spins $\frac{1}{2}$. Nous n'allons donc pas détailler davantage ces règles mais simplement en rappeler les principaux résultats.

◦ Couplage de deux nucléons

En couplant deux isospins $\frac{1}{2}$, l'isospin total du système, noté T, peut prendre les valeurs 0 ou 1. Sa troisième composante T_z est comprise entre $-\mathrm{T}$ et T. La composante d'isospin d'un état à deux corps dans la base couplée est notée $|\mathrm{T}, \mathrm{T}_z\rangle$. À chaque valeur de T correspondra un sous-espace de dimension $2\mathrm{T}+1$ soit antisymétrique soit symétrique suivant la parité de T. Le projecteur sur chacun de ces sous-espaces, noté $\hat{\mathbb{P}}^{\mathrm{T}}$, est alors identifiable à l'antisymétriseur ou au symétriseur respectivement, agissant sur la composante d'isospin d'un état à deux corps donné.

$$|\mathrm{T}, \mathrm{T}_z\rangle = \sqrt{2}\, \hat{\mathbb{P}}^{\mathrm{T}} |t_z^{(1)}, t_z^{(2)}\rangle \qquad \text{et} \qquad \hat{\mathbb{P}}^{\mathrm{T}} = \frac{1}{2}\left(\hat{\mathbb{1}} - (-)^{\mathrm{T}} \hat{P}^\tau\right) , \tag{4.11}$$

où $\hat{P}^\tau$ est l'opérateur d'échange d'isospin déjà rencontré au chapitre 2 (section 2.1.3).

Ainsi, à $\mathrm{T} = 0$ est associé un singulet antisymétrique

$$|\mathrm{T} = 0, \mathrm{T}_z = 0\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}\big(|np\rangle - |pn\rangle\big) \tag{4.12}$$

et à $\mathrm{T} = 1$, un triplet symétrique

$$|\mathrm{T} = 1, \mathrm{T}_z = -1\rangle \equiv |pp\rangle \tag{4.13}$$

$$|\mathrm{T} = 1, \mathrm{T}_z = 0\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}\big(|np\rangle + |pn\rangle\big) \tag{4.14}$$

$$|\mathrm{T} = 1, \mathrm{T}_z = +1\rangle \equiv |nn\rangle \, . \tag{4.15}$$

◦ Structure en isospin de l'interaction coulombienne

L'interaction coulombienne, déjà rencontrée au chapitre 1, est une interaction à deux corps définie par

$$\hat{V}_{\mathrm{coul}}(i,j) = \frac{\hat{Q}_i \hat{Q}_j}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \, , \tag{4.16}$$

où $\hat{Q}_i$ est l'opérateur de charge de la particule i. Compte tenu de ce qui a été vu au paragraphe 4.1.1, et étant donné que les protons ont une charge e et que les neutrons ont une charge nulle, l'opérateur de charge $\hat{Q}$ s'écrira de façon générale comme

$$\hat{Q} = e\,\hat{t}_-\hat{t}_+ = e\left(\frac{1}{2} - \hat{t}_z\right) . \tag{4.17}$$

L'interaction de Coulomb prend donc la forme suivante en fonction de l'isospin (voir par exemple la référence [53])

$$\hat{V}_{\rm coul}(i,j) = \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}\left(\frac{1}{2} - \hat{t}_z^{(i)}\right)\left(\frac{1}{2} - \hat{t}_z^{(j)}\right) . \tag{4.18}$$

En développant cette expression, on peut écrire l'interaction coulombienne en terme de composantes *isoscalaires*, *isovectorielles* et *isotensorielles*

$$\hat{V}_{\rm coul}(i,j) = \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}\left\{\underbrace{\left(\frac{1}{4} + \frac{1}{3}\hat{\mathbf{t}}^{(i)}\cdot\hat{\mathbf{t}}^{(j)}\right)}_{\text{isoscalaire}} - \frac{1}{2}\underbrace{\left(\hat{t}_z^{(i)} + \hat{t}_z^{(j)}\right)}_{\text{isovecteur}} + \underbrace{\left(\hat{t}_z^{(i)}\hat{t}_z^{(j)} - \frac{1}{3}\hat{\mathbf{t}}^{(i)}\cdot\hat{\mathbf{t}}^{(j)}\right)}_{\text{isotenseur}}\right\} . \tag{4.19}$$

Ces différents termes correspondent aux classes I (*isoscalaire*), II (*isotenseur*) et III (*isovecteur*) de la classification de E. M. Henley et G. A. Miller [54].

Du fait de sa structure en isospin, l'interaction coulombienne va briser cette symétrie dans les noyaux atomiques. Elle sera d'ailleurs la seule source physique de brisure de la symétrie d'isospin que nous considérerons dans ce travail.

◦ Pour aller plus loin...

Une généralisation de cette classification des forces à deux corps aux forces à trois corps et plus, est actuellement à l'étude. Parmi les travaux de référence en ce domaine, on pourra citer notamment ceux de E. Epelbaum *et al.* [55].

◦ Système de A nucléons

De façon plus générale, en couplant N neutrons et Z protons avec $N + Z = A$, l'isospin total du système prend des valeurs comprises entre $\mathrm{T}_{\rm min} = \mathrm{T}_0 = |N - Z|/2$ et $\mathrm{T}_{\rm max} = A/2$.

4.2 Estimation du degré de brisure d'isospin

4.2.1 Introduction

Quand le système considéré est décrit par un état à N corps $|\Psi\rangle$ qui n'est pas état propre de l'opérateur $\hat{\mathbf{T}}^2$, on peut toujours développer cet état sur une base d'états propres de $\hat{\mathbf{T}}^2$ notée $\{|\xi, \mathrm{T}\rangle\}$

$$|\Psi\rangle = \sum_{\mathrm{T},\xi} a_{\mathrm{T},\xi}|\xi\ \mathrm{T}\rangle \tag{4.20}$$

où ξ désigne de façon schématique l'ensemble des autres nombres quantiques pertinents dans une description complète de l'état $|\Psi\rangle$.

Si l'état $|\Psi\rangle$ (4.20) contient un faible *mélange d'isospin*, la distribution d'isospin qui lui est associée sera fortement piquée autour d'une *composante dominante* notée par la suite T_d. Dans ce cas, on pourra

définir un *paramètre de mélange d'isospin* qui mesure le degré de brisure de cette symétrie associée à cet état. Ce paramètre correspondra alors au poids de toutes les autres composantes dans $|\Psi\rangle$

$$\alpha^2_\Psi = 1 - P_\Psi(\mathrm{T}_d)\,. \tag{4.21}$$

Après une brève description des méthodes existantes de projection sur l'isospin, nous proposerons une nouvelle manière d'évaluer les probabilités d'isospin en général et donc le paramètre de mélange d'isospin en particulier.

4.2.2 Techniques usuelles de projection de moments angulaires

◦ Représentation intégrale

La projection sur un bon moment cinétique est une problématique très fréquente en physique du problème à N corps en général. On la rencontre notamment dans une approche de champ moyen, pour le moment cinétique total du système $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}$ lorsque l'on veut restaurer l'invariance du système par rotation afin de passer du référentiel intrinsèque au référentiel du laboratoire.

De nombreuses approches existent afin de réaliser cette projection. Le projecteur est fréquemment écrit dans une représentation intégrale

$$\hat{P}^{\mathrm{T}}_{\mathrm{T}_z\mathrm{T}_z} = \frac{2\mathrm{T}+1}{2}\int_0^\pi d\beta\,\sin\beta\, d^{\mathrm{T}}_{\mathrm{T}_z\mathrm{T}_z}(\beta)\,\hat{R}(\beta), \tag{4.22}$$

où β est l'angle d'Euler associé à l'opérateur $\hat{R}(\beta) = e^{-i\beta\hat{T}_y}$ effectuant une rotation autour de l'axe y dans l'espace d'isospin et les $d^{\mathrm{T}}_{\mathrm{T}_z\mathrm{T}_z}(\beta)$ sont des éléments de matrice de rotation réduits de Wigner [56].

◦ Approche algébrique de Löwdin

En 1964, P.-O. Löwdin [57] proposa un formalisme algébrique pour l'expression du projecteur de moment cinétique pour un système à N corps. Nous allons exposer brièvement son formalisme en l'appliquant à l'opérateur d'isospin bien que cela puisse s'appliquer à tout opérateur de moment cinétique.

P.-O. Löwdin a exprimé le projecteur, sur un couple donné de valeurs (T,T_z) sous forme polynomiale en fonction des opérateurs $\hat{\mathbf{T}}^2$ et $\hat{T}_z$

$$\hat{\Pi}^{\mathrm{T},\mathrm{T}_z} = \hat{\Pi}^{\mathrm{T}}\,\hat{\Pi}^{\mathrm{T}_z} \tag{4.23}$$

avec

$$\hat{\Pi}^{\mathrm{T}} = \prod_{\mathrm{T}'\neq\mathrm{T}} \frac{\hat{\mathbf{T}}^2 - \mathrm{T}'(\mathrm{T}'+1)}{\mathrm{T}(\mathrm{T}+1) - \mathrm{T}'(\mathrm{T}'+1)} \qquad \text{et} \qquad \hat{\Pi}^{\mathrm{T}_z} = \prod_{\mathrm{T}'_z\neq\mathrm{T}_z} \frac{\hat{\mathrm{T}}_z - \mathrm{T}'_z}{\mathrm{T}_z - \mathrm{T}'_z}\,. \tag{4.24}$$

Dans le cas où l'on s'intéresse à des états propres de l'opérateur $\hat{T}_z$ associés à la valeur propre T_z, P.-O. Löwdin a dérivé une forme développée du projecteur sur T en terme des opérateurs $\hat{T}_+$ et $\hat{T}_-$.

$$\hat{\Pi}^{\mathrm{T}} = (2\mathrm{T}+1)\,\frac{(\mathrm{T}+\mathrm{T}_0)!}{(\mathrm{T}-\mathrm{T}_0)!}\sum_{t=0}^{A/2-\mathrm{T}} (-)^t\,\frac{\hat{\mathrm{T}}_{-\epsilon}^{\mathrm{T}-\mathrm{T}_0+t}\,\hat{\mathrm{T}}_{\epsilon}^{\mathrm{T}-\mathrm{T}_0+t}}{t!(2\mathrm{T}+t+1)!}\,, \tag{4.25}$$

où $\mathrm{T}_0 = |\mathrm{T}_z|$ et ϵ est le signe de T_z ($\mathrm{T}_z = \epsilon\mathrm{T}_0$) et vaut indifféremment ±1 lorsque $\mathrm{T}_0 = 0$.

Cette dernière relation est valable pour un état $|\Psi\rangle$ tel que

$$|\Psi\rangle = \sum_{\mathrm{T}=\mathrm{T}_0}^{A/2}\sum_{\xi} a_{\mathrm{T},\xi}|\xi\;\mathrm{T}\;\mathrm{T}_z\rangle \qquad \text{et} \qquad \hat{T}_z|\Psi\rangle = \mathrm{T}_z|\Psi\rangle\,. \tag{4.26}$$

Il est important de noter ici qu'une telle condition est réalisée pour des états propres du nombre de particules, neutrons et protons indépendamment. C'est le cas notamment, comme on l'a vu, dans le formalisme HTDA.

À partir de l'expression (4.25) du projecteur, on déduit celle de la probabilité d'isospin correspondante

$$P_\Psi(\mathrm{T}) = \frac{\langle\Psi|\hat{\Pi}^{\mathrm{T}}|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle} = \frac{(2\mathrm{T}+1)}{\langle\Psi|\Psi\rangle}\frac{(\mathrm{T}+\mathrm{T}_0)!}{(\mathrm{T}-\mathrm{T}_0)!}\sum_{t=0}^{A/2-\mathrm{T}}(-)^t\,\frac{\langle\Psi|\hat{\mathrm{T}}_{-\epsilon}^{\mathrm{T}-\mathrm{T}_0+t}\,\hat{\mathrm{T}}_{\epsilon}^{\mathrm{T}-\mathrm{T}_0+t}|\Psi\rangle}{t!(2\mathrm{T}+t+1)!}\,. \tag{4.27}$$

4.2.3 Calcul des probabilités d'isospin par une approche matricielle

Bien que très général, le formalisme de P.-O. Löwdin est en réalité peu pratique lorsque l'on s'intéresse davantage aux probabilités d'isospin qu'aux amplitudes elles-mêmes. Aussi, dans ce travail de thèse nous avons développé une approche complémentaire basée sur la résolution d'un système de Vandermonde permettant d'accéder directement et de façon générale aux probabilités d'isospin. Cette méthode permet en outre, bien qu'indirectement, de déduire la forme du projecteur associé.

Le système d'équations à résoudre est obtenu en faisant agir les puissances successives de l'opérateur $\hat{\mathbf{T}}^2$ sur $|\Psi\rangle$ (4.26). En effet, si l'on note $P_\Psi(\mathrm{T}) = \sum_\xi |a_{\mathrm{T},\xi}|^2$ la probabilité d'avoir la composante T dans $|\Psi\rangle$, l'action répétée de $\hat{\mathbf{T}}^2$ sur cet état donne,

$$\frac{\langle\Psi|\hat{\mathbf{T}}^0|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle} = \sum_{\mathrm{T}=\mathrm{T}_0}^{A/2} P_\Psi(\mathrm{T}) \tag{4.28}$$

$$\frac{\langle\Psi|\hat{\mathbf{T}}^2|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle} = \sum_{\mathrm{T}=\mathrm{T}_0}^{A/2} \mathrm{T}(\mathrm{T}+1)\,P_\Psi(\mathrm{T}) \tag{4.29}$$

$$\frac{\langle\Psi|\hat{\mathbf{T}}^4|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle} = \sum_{\mathrm{T}=\mathrm{T}_0}^{A/2} \mathrm{T}^2(\mathrm{T}+1)^2\,P_\Psi(\mathrm{T}) \tag{4.30}$$

$$\vdots \tag{4.31}$$

$$\frac{\langle\Psi|\hat{\mathbf{T}}^{2\mathcal{N}}|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle} = \sum_{\mathrm{T}=\mathrm{T}_0}^{A/2} \mathrm{T}^{\mathcal{N}}(\mathrm{T}+1)^{\mathcal{N}}\,P_\Psi(\mathrm{T}) \tag{4.32}$$

ou, sous forme matricielle,

$$\underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ \tau_0 & \tau_1 & \tau_2 & \cdots & \tau_{\mathcal{N}} \\ \tau_0^2 & \tau_1^2 & \tau_2^2 & \cdots & \tau_{\mathcal{N}}^2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \tau_0^{\mathcal{N}} & \tau_1^{\mathcal{N}} & \tau_2^{\mathcal{N}} & \cdots & \tau_{\mathcal{N}}^{\mathcal{N}} \end{pmatrix}}_{\mathcal{V}} \begin{pmatrix} P_\Psi(\mathrm{T}_0) \\ P_\Psi(\mathrm{T}_0+1) \\ P_\Psi(\mathrm{T}_0+2) \\ \vdots \\ P_\Psi(\mathrm{T}_0+\mathcal{N}) \end{pmatrix} = \frac{1}{\langle\Psi|\Psi\rangle} \begin{pmatrix} \langle\Psi|\hat{\mathbf{T}}^0|\Psi\rangle \\ \langle\Psi|\hat{\mathbf{T}}^2|\Psi\rangle \\ \langle\Psi|\hat{\mathbf{T}}^4|\Psi\rangle \\ \vdots \\ \langle\Psi|\hat{\mathbf{T}}^{2\mathcal{N}}|\Psi\rangle \end{pmatrix} \tag{4.33}$$

avec $\tau_i = (\mathrm{T}_0+i)(\mathrm{T}_0+i+1)$ et $\mathcal{N} = A/2-\mathrm{T}_0 = \min(N,Z)$. Le déterminant de la matrice $\mathcal{V}$ est alors donnée par la fomule de Vandermonde,

$$\det\mathcal{V} = \prod_{0\leqslant i<j\leqslant n}(\tau_j-\tau_i) = \prod_{0\leqslant i<j\leqslant n}\Big[2(j-i)\mathrm{T}_0 + j(j+1) - i(i+1)\Big]\,. \tag{4.34}$$

Comme les coefficients τ_i sont distincts deux à deux ($\tau_i \neq \tau_j$ si $i \neq j$), le déterminant de Vandermonde n'est jamais nul. Ceci prouve l'inversibilité de la matrice $\mathcal{V}$ ainsi que l'unicité des solutions $P_\Psi(\mathrm{T})$.

La résolution d'un tel système, qui passe par le calcul de l'inverse de la matrice de Vandermonde, est connu des mathématiciens depuis la fin des années 1960 et est largement documenté (voir par exemple [58–60]). La méthode générale consiste à décomposer la matrice $\mathcal{V}$ en un produit d'une matrice L, triangulaire inférieure, par une matrice U, triangulaire supérieure, afin d'en déterminer l'inverse,

$$\mathcal{V}^{-1} = U^{-1}L^{-1}\,. \tag{4.35}$$

Les éléments de matrices de U^{-1} et L^{-1}, respectivement notés $\mathcal{U}_{ij}$ et $\mathcal{L}_{ij}$ ($0 \leqslant i,j \leqslant \mathcal{N}$), sont donnés par exemple dans la Réf. [60] par,

$$\mathcal{U}_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{si} \quad i = j = 0 \\ 0 & \text{si} \quad i > j \\ \prod\limits_{\substack{k=0 \\ k\neq i}}^{j} (\tau_i - \tau_k)^{-1} & \text{sinon} \end{cases}$$

et

$$\mathcal{L}_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{si} \quad j > i \\ (-)^{i+j}\,\sigma_{i-j}(\tau_0, \tau_1, \cdots, \tau_{i-1}) & \text{sinon} \end{cases}$$

où les σ_i sont des polynômes symétriques élémentaires [1]. De façon plus explicite, les matrices inverses de L et U prennent les formes suivantes.

$$L^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ -\tau_0 & 1 & 0 & 0 & \cdots \\ \tau_0\tau_1 & -(\tau_0+\tau_1) & 1 & 0 & \cdots \\ -\tau_0\tau_1\tau_2 & \tau_0\tau_1+\tau_0\tau_2+\tau_1\tau_2 & -(\tau_0+\tau_1+\tau_2) & 1 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

et

$$U^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{\tau_0-\tau_1} & \frac{1}{(\tau_0-\tau_1)(\tau_0-\tau_2)} & \frac{1}{(\tau_0-\tau_1)(\tau_0-\tau_2)(\tau_0-\tau_3)} & \cdots \\ 0 & \frac{1}{\tau_1-\tau_0} & \frac{1}{(\tau_1-\tau_0)(\tau_1-\tau_2)} & \frac{1}{(\tau_1-\tau_0)(\tau_1-\tau_2)(\tau_1-\tau_3)} & \cdots \\ 0 & 0 & \frac{1}{(\tau_2-\tau_0)(\tau_2-\tau_1)} & \frac{1}{(\tau_2-\tau_0)(\tau_2-\tau_1)(\tau_2-\tau_3)} & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{(\tau_3-\tau_0)(\tau_3-\tau_1)(\tau_3-\tau_2)} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

1. Pour n variables x_1, x_2... x_n, les *polynômes symétriques élémentaires* sont donnés par : $\sigma_0 = 1$, $\sigma_1 = \sum_{i=1}^{n} x_i$, $\sigma_2 = \sum_{i<j=1}^{n} x_i x_j$, et ainsi de suite jusqu'à $\sigma_n = \prod_{i=1}^{n} x_i$. Pour $n = 0$ variable, le polynôme σ_0 est défini et vaut 1 par convention.

Ainsi chaque probabilité $P_\Psi(\mathrm{T}_0+i)$ est donnée par,

$$P_\Psi(\mathrm{T}_0+i)=\sum_{j=0}^{\mathcal{N}}\frac{\langle\Psi|\hat{\mathbf{T}}^{2j}|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle}\sum_{k=\max(i,j)}^{\mathcal{N}}\mathcal{U}_{ik}\,\mathcal{L}_{kj}\,. \tag{4.36}$$

Il est également possible de dériver une expression des probabilités $P_\Psi(\mathrm{T}_0+i)$ en terme des quantités $\mathcal{T}_{2j}(\mathrm{T}_0,\Psi)$ définies par

$$\mathcal{T}_{2j}(\mathrm{T},\Psi)=\frac{\langle\Psi|\hat{\mathbf{T}}^{2j}|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle}-\mathrm{T}^j(\mathrm{T}+1)^j\,, \tag{4.37}$$

et qui sont des quantités plus pertinentes puisqu'elles sont nulles dans la limite où $|\Psi\rangle$ est état propre de $\hat{\mathbf{T}}^2$ avec la valeur propre T. Les probabilités $P_\Psi(\mathrm{T}_0+i)$ s'écrivent alors comme

$$P_\Psi(\mathrm{T}_0+i)=\delta_{i0}+\sum_{j=1}^{\mathcal{N}}\Gamma_{ij}\,\mathcal{T}_{2j}(\mathrm{T}_0,\Psi)\,, \tag{4.38}$$

avec les coefficients

$$\Gamma_{ij}=(-)^{i+j}\,\frac{\sigma_{\mathcal{N}-j}(\tau_0,\cdots,\tau_{i-1},\tau_{i+1},\cdots,\tau_{\mathcal{N}})}{\prod_{k=0}^{i-1}(\tau_i-\tau_k)\prod_{k=i+1}^{\mathcal{N}}(\tau_k-\tau_i)}\,. \tag{4.39}$$

Dans (4.39), on retrouve les polynômes symétriques élémentaires σ_ℓ qui sont tous positifs, le dénominateur est composé de produits de termes toujours positifs, le signe global des coefficients Γ_{ij} est donc donné par la phase $(-)^{i+j}$.

La méthode développée dans ce travail, qui est basée sur la résolution d'un système de Vandermonde, nous permet alors de donner une forme plus transparente au projecteur $\hat{\Pi}^{\mathrm{T}}$ (4.24). Celui-ci pourra en effet s'écrire sous une forme analogue à (4.38)

$$\hat{\Pi}^{\mathrm{T}_0+i}=\delta_{i0}\,\hat{\mathbb{1}}+\sum_{j=1}^{\mathcal{N}}\Gamma_{ij}\,\hat{\mathbb{T}}_{2j}(\mathrm{T}_0)\,. \tag{4.40}$$

où l'opérateur $\hat{\mathbb{T}}_{2j}(\mathrm{T}_0)$ est défini par

$$\hat{\mathbb{T}}_{2j}(\mathrm{T})=\hat{\mathbf{T}}^{2j}-\mathrm{T}^j(\mathrm{T}+1)^j\,, \tag{4.41}$$

et vérifie donc la relation

$$\frac{\langle\Psi|\hat{\mathbb{T}}_{2n}(T)|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle}=\mathcal{T}_{2n}(T,\Psi)\,. \tag{4.42}$$

4.2.4 Projection approchée d'isospin

◦ Projection approchée sur les composantes d'isospin les plus basses

La symétrie d'isospin étant naturellement faiblement brisée dans les noyaux atomiques, il est raisonnable de supposer une convergence assez rapide du développement (4.26) même lorsque l'interaction coulombienne devient assez importante.

Partant du formalisme développé dans la section précédente, il est aisée de dériver un schéma de troncation afin d'accéder aux probabilités des composantes d'isospin les plus basses [2] de façon approchée.

2. Ce formalisme peut tout aussi bien être appliqué aux composantes de T les plus élevées $\mathrm{T}_{\max}$, $\mathrm{T}_{\max}-1\ldots$

En effet, si l'état du système se développe sur les premières composantes comme,

$$|\Psi\rangle \approx \sum_{\mathrm{T}=\mathrm{T}_0}^{\mathrm{T}_0+n} \sum_{\xi} a^{(n)}_{\mathrm{T},\xi} |\xi\, \mathrm{T}\, \mathrm{T}_z\rangle \tag{4.43}$$

(avec des amplitudes $a^{(n)}_{\mathrm{T},\xi}$ dépendantes de l'ordre de troncation n), alors les probabilités (4.36) deviennent

$$P^{(n)}_{\Psi}(\mathrm{T}_0+i) = \sum_{j=0}^{n} \frac{\langle\Psi|\hat{\mathbf{T}}^{2j}|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle} \sum_{k=\max(i,j)}^{n} \mathcal{U}_{ik}\, \mathcal{L}_{kj}\,. \tag{4.44}$$

En pratique, il s'agira de construire la matrice de Vandermonde de taille $n+1$.

Partant de (4.38), les probabilités approchées s'écrivent également

$$P^{(n)}_{\Psi}(\mathrm{T}_0+i) = \delta_{i0} + \sum_{j=1}^{n} \Gamma^{(n)}_{ij}\, \mathcal{T}_{2j}(\mathrm{T}_0,\Psi)\,, \qquad 0 \leqslant i \leqslant n\,, \tag{4.45}$$

où cette fois les coefficients $\Gamma^{(n)}_{ij}$ dépendent de l'ordre de troncation n. Ils sont simplement obtenus à partir de (4.39) en remplaçant ν par n

$$\Gamma^{(n)}_{ij} = (-)^{i+j}\, \frac{\sigma_{n-j}(\tau_0,\cdots,\tau_{i-1},\tau_{i+1},\cdots,\tau_n)}{\prod_{k=0}^{i-1}(\tau_i-\tau_k)\prod_{k=i+1}^{n}(\tau_k-\tau_i)}\,, \qquad 0 \leqslant i \leqslant n\,. \tag{4.46}$$

Ces derniers sont donnés dans le tableau 4.1 pour le cas particulier de noyaux $N = Z$ (i.e. $\mathrm{T}_0 = 0$). La forme des probabilités (4.45) est directement transposable aux projecteurs (4.40) avec les mêmes coefficients $\Gamma^{(n)}_{ij}$.

Pour un état $|\Psi\rangle$ qui serait état propre de $\hat{\mathbf{T}}^2$ avec la valeur propre T_0, les quantités $\mathcal{T}_{2j}(\mathrm{T}_0)$ sont nulles et on retrouve bien

$$P^{(n)}_{\Psi}(\mathrm{T}_0+i) = P_{\Psi}(\mathrm{T}_0+i) = \delta_{i0}\,. \tag{4.47}$$

◦ Projection approchée autour d'une valeur dominante

On cherche maintenant à obtenir une forme approchée des probabilités d'isospin dans le cas plus général où T_0 n'est plus forcément la composante dominante dans la distribution d'isospin. On suppose

Tableau 4.1 – Coefficients $\Gamma^{(n)}_{ij}$ du développement (4.46) appliqué aux cas où $\mathrm{T}_0 = 0$.

$n=1$		j
		1
i	0	$-\frac{1}{2}$
	1	$\frac{1}{2}$

$n=2$		j	
		1	2
i	0	$-\frac{2}{3}$	$\frac{1}{12}$
	1	$\frac{3}{4}$	$-\frac{1}{8}$
	2	$-\frac{1}{12}$	$\frac{1}{24}$

$n=3$		j		
		1	2	3
i	0	$-\frac{3}{4}$	$\frac{5}{36}$	$-\frac{1}{144}$
	1	$\frac{9}{10}$	$-\frac{9}{40}$	$\frac{1}{80}$
	2	$-\frac{1}{6}$	$\frac{7}{72}$	$-\frac{1}{144}$
	3	$\frac{1}{60}$	$-\frac{1}{90}$	$\frac{1}{720}$

toutefois que cette distribution reste suffisamment piquée autour d'une valeur dominante que l'on a noté T_d. Ainsi l'état $|\Psi\rangle$ se décomposera de façon approchée comme

$$|\Psi\rangle \approx \sum_{T=\mathrm{T}_d-n}^{\mathrm{T}_d+n} \sum_{\xi} a^{(n)}_{T,\xi} |\xi\, T\, T_z\rangle \,. \tag{4.48}$$

En faisant agir successivement l'opérateur $\hat{\mathbf{T}}^2$ sur un tel état, on aboutit au système suivant dont les probabilités d'isospin recherchées sont les solutions.

$$\begin{pmatrix} 1 & \cdots & 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ \tau_{d-n} & \cdots & \tau_{d-1} & \tau_d & \tau_{d+1} & \cdots & \tau_{d+n} \\ \tau^2_{d-n} & \cdots & \tau^2_{d-1} & \tau^2_d & \tau^2_{d+1} & \cdots & \tau^2_{d+n} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \tau^{2n}_{d-n} & \cdots & \tau^{2n}_{d-1} & \tau^n_d & \tau^{2n}_{d+1} & \cdots & \tau^{2n}_{d+n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P_\Psi(\mathrm{T}_d-n) \\ \vdots \\ P_\Psi(\mathrm{T}_d) \\ \vdots \\ P_\Psi(\mathrm{T}_d+n) \end{pmatrix} = \frac{1}{\langle\Psi|\Psi\rangle} \begin{pmatrix} \langle\Psi|\hat{\mathbf{T}}^0|\Psi\rangle \\ \langle\Psi|\hat{\mathbf{T}}^2|\Psi\rangle \\ \langle\Psi|\hat{\mathbf{T}}^4|\Psi\rangle \\ \vdots \\ \langle\Psi|\hat{\mathbf{T}}^{4n}|\Psi\rangle \end{pmatrix} \tag{4.49}$$

On voit alors que lorsqu'on tronque la distribution à $\mathrm{T}_d \pm n$, la résolution du système (4.49) nécessite la connaissance de $\langle\hat{\mathbf{T}}^2\rangle$, $\langle\hat{\mathbf{T}}^4\rangle$ et ainsi de suite jusqu'à $\langle\hat{\mathbf{T}}^{4n}\rangle$.

Les probabilités $P_\Psi(\mathrm{T}_d)$, $P_\Psi(\mathrm{T}_d \pm 1) \ldots P_\Psi(\mathrm{T}_d \pm n)$ sont alors données par

$$P^{(n)}_\Psi(\mathrm{T}_d+i) = \sum_{j=-n}^{n} \frac{\langle\Psi|\mathrm{T}^{2(j+n)}|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle} \sum_{k=\max(i,j)}^{n} \mathcal{U}'_{ik}\, \mathcal{L}'_{kj} \,, \qquad |i| \leqslant n \tag{4.50}$$

où les éléments de matrice $\mathcal{U}'_{i,j}$ et $\mathcal{L}'_{i,j}$ prennent maintenant les formes

$$\mathcal{U}'_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{si} \quad i = j = 0 \\ 0 & \text{si} \quad i > j \\ \displaystyle\prod_{\substack{k=-n \\ k\neq i}}^{j} (\tau_{d+i} - \tau_{d+k})^{-1} & \text{sinon} \,, \end{cases} \tag{4.51}$$

et

$$\mathcal{L}'_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{si} \quad j > i \\ (-)^{i+j}\, \sigma_{i-j}(\tau_{d-n}, \tau_{d-n+1}, \cdots, \tau_{d+i-1}) & \text{sinon} \,. \end{cases} \tag{4.52}$$

La composante dominante T_d s'écrit en fonction de T_0 comme $\mathrm{T}_d = \mathrm{T}_0 + d$. Compte tenu de cette notation, les coefficients τ_{d+i} apparaissant dans ces dernières expressions sont donnés par

$$\tau_{d+i} = (\mathrm{T}_d + i)(\mathrm{T}_d + i + 1) = (\mathrm{T}_0 + d + i)(\mathrm{T}_0 + d + i + 1) \,. \tag{4.53}$$

Par analogie avec les développements (4.38) et (4.45), il est possible d'écrire (4.50) comme,

$$P^{(n)}_\Psi(\mathrm{T}_d+i) = \delta_{i0} + \sum_{j=1-n}^{n} \Lambda^{(n)}_{ij}\, \mathcal{T}_{2j}(\mathrm{T}_d, \Psi) \,, \qquad |i| \leqslant n \,, \tag{4.54}$$

avec, cette fois-ci,

$$\Lambda^{(n)}_{ij} = (-)^{i+j}\, \frac{\sigma_{n-j}(\tau_{d-n}, \cdots, \tau_{d+i-1}, \tau_{d+i+1}, \cdots, \tau_{d+n})}{\displaystyle\prod_{k=-n}^{i-1} (\tau_{d+i} - \tau_{d+k}) \prod_{k=i+1}^{n} (\tau_{d+k} - \tau_{d+i})} \,, \qquad |i| \leqslant n \,. \tag{4.55}$$

Le formalisme développé dans cette section sera évidemment identifiable aux expressions de la section précédente où on évaluait les probabilités d'avoir dans $|\Psi\rangle$ les premières composantes d'isospin.

En effet, si on tronque le développement (4.48) à l'ordre $n = d$, alors les probabilités (4.54) s'identifient aux expressions (4.45) lorsque le développement (4.43) est tronqué à l'ordre $n = 2d$. La correspondance est la suivante,

$$P_\Psi^{(d)}(\mathrm{T}_d + i) = P_\Psi^{(2d)}(\mathrm{T}_0 + n + i)\,. \tag{4.56}$$

Encore une fois, pour un état $|\Psi\rangle$ qui serait état propre de $\hat{\mathbf{T}}^2$ avec la valeur propre T_d, les quantités $\mathcal{T}_{2j}(\mathrm{T}_d)$ sont nulles et on retrouve bien

$$P_\Psi^{(n)}(\mathrm{T}_d + i) = P_\Psi(\mathrm{T}_d + i) = \delta_{i0}\,. \tag{4.57}$$

4.3 L'opérateur $\hat{\mathbf{T}}^{2n}$

Dans ce travail, on s'intéresse à la symétrie d'isospin dans les noyaux atomiques et plus particulièrement au contenu en isospin d'un état nucléaire. Un opérateur qui joue, comme on vient de le voir, un rôle important dans notre étude est un opérateur rapporté à cette symétrie, c'est-à-dire l'opérateur $\hat{\mathbf{T}}^2$ dans l'espace de Fock de A particules.

La méthode développée dans ce travail pour analyser le mélange d'isospin d'un état propre de l'opérateur nombre de particules, nécessite de considérer des puissances quelconques de cet opérateur à A corps que l'on notera génériquement $\hat{\mathbf{T}}^{2n}$.

On se propose ici d'exposer la manière générale d'évaluer les éléments de matrice d'un tel opérateur quelle que soit la puissance considérée.

4.3.1 L'opérateur $\hat{\mathbf{T}}^{2n}$ en fonction de $\hat{T}_-^\ell \hat{T}_+^\ell$

L'opérateur d'isospin $\hat{\mathbf{T}}^2$ peut être écrit en fonction des opérateurs d'échelle à un corps $\hat{T}_+$, $\hat{T}_-$ et de $\hat{T}_z$ comme

$$\hat{\mathbf{T}}^2 = \hat{T}_z(\hat{T}_z + 1) + \hat{T}_-\hat{T}_+ \tag{4.58}$$

$$\hat{\mathbf{T}}^2 = \hat{T}_z(\hat{T}_z - 1) + \hat{T}_+\hat{T}_-\,. \tag{4.59}$$

Pour évaluer l'opérateur $\hat{\mathbf{T}}^{2n}$ il s'agira d'élever ces dernières expressions à la puissance souhaitée. Rappelons simplement que toute fonction polynomiale f de l'opérateur $\hat{T}_z$ commute avec le produit des opérateurs $\hat{T}_-$ et $\hat{T}_+$ pris dans un sens ou dans l'autre :

$$\big[\hat{T}_-\hat{T}_+, f(\hat{T}_z)\big] = \big[\hat{T}_+\hat{T}_-, f(\hat{T}_z)\big] = 0\,. \tag{4.60}$$

Ainsi en partant par exemple de (4.58), il vient simplement que,

$$\hat{\mathbf{T}}^{2n} = \Big(\hat{T}_z(\hat{T}_z + 1) + \hat{T}_-\hat{T}_+\Big)^n = \sum_{k=0}^{n} \binom{n}{k} \hat{T}_z^{n-k}(\hat{T}_z + 1)^{n-k}(\hat{T}_-\hat{T}_+)^k\,. \tag{4.61}$$

Pour n'importe quel opérateur de moment cinétique classique, on ne pourrait pas aller beaucoup plus loin que ce résultat. Le produit $\hat{T}_-\hat{T}_+$ élevé à une puissance k est en fait la somme d'opérateurs à un corps, deux corps jusqu'à $2k$ corps dont il faut ensuite évaluer les éléments de matrice. Pour l'isospin, une simplicité supplémentaire peut être exploitée si l'on fait l'effort de distribuer la puissance k sur $\hat{T}_-$ et $\hat{T}_+$ séparément. En effet, comme nous le verrons dans la section 4.3.2, la décomposition de l'opérateur $\hat{T}_-^k\hat{T}_+^k$ en sous-espaces de Fock est plus simple du fait que $\hat{t}_-^2 = \hat{t}_+^2 = 0$ dans une base d'états d'isospin $\frac{1}{2}$.

La décomposition de $(\hat{T}_-\hat{T}_+)^k$ en puissances partagées est exposée en détail dans l'annexe D. L'idée est d'écrire cet opérateur sous la forme

$$(\hat{T}_-\hat{T}_+)^k = \sum_{\ell=0}^{k} P_{k,\ell}(\hat{T}_z)\,\hat{T}_-^{\ell}\hat{T}_+^{\ell} \tag{4.62}$$

et de déterminer les polynômes $P_{k,\ell}(\hat{T}_z)$ inconnus. Les polynômes recherchés sont des polynômes symétriques de degré $k-\ell$ de ℓ fonctions simples $h_i(\mathrm{T}_z)$ dont l'expression générale est donnée dans l'annexe D.

Finalement, on obtient l'expression générale de l'opérateur $\hat{\mathbf{T}}^{2n}$ décomposé en puissances distribuées des opérateurs $\hat{T}_-$ et $\hat{T}_+$,

$$\hat{\mathbf{T}}^{2n} = \sum_{\ell=0}^{n}\Big(\sum_{k=0}^{n-\ell}\binom{n}{k}\hat{T}_z^k(\hat{T}_z+1)^k\,P_{n-k,\ell}(\hat{T}_z)\Big)\,\hat{T}_-^{\ell}\hat{T}_+^{\ell}\,. \tag{4.63}$$

Remarque : En partant de la forme (4.59) de l'opérateur $\hat{\mathbf{T}}^2$, on aboutit par le même raisonnement, à l'expression suivante de l'opérateur $\hat{\mathbf{T}}^{2n}$.

$$\hat{\mathbf{T}}^{2n} = \sum_{\ell=0}^{n}\Big(\sum_{k=0}^{n-\ell}\binom{n}{k}\hat{T}_z^k(\hat{T}_z-1)^k\,P_{n-k,\ell}(-\hat{T}_z)\Big)\,\hat{T}_+^{\ell}\hat{T}_-^{\ell}\,. \tag{4.64}$$

4.3.2 Décomposition de l'opérateur $\hat{T}_-^{\ell}\hat{T}_+^{\ell}$

La méthode générale utilisée dans ce travail pour évaluer les éléments de matrices d'opérateurs à A corps est détaillée dans l'annexe B. Pour ce faire, il est alors nécessaire de connaître la représentation de l'opérateur en question dans les sous-espaces de Fock à un, deux corps ou plus.

L'intérêt de considérer ici l'opérateur $\hat{T}_-^{\ell}\hat{T}_+^{\ell}$ au lieu de $(\hat{T}_-\hat{T}_+)^{\ell}$ réside justement dans cette décomposition qui s'avère être beaucoup plus simple dans le premier cas.

En effet, l'opérateur $\hat{T}_-^{\ell}\hat{T}_+^{\ell}$ peut s'écrire comme,

$$\hat{T}_-^{\ell}\hat{T}_+^{\ell} = \underbrace{\Big(\sum_{i_1=1}^{A}\hat{t}_-(i_1)\Big)\cdots\Big(\sum_{i_\ell=1}^{A}\hat{t}_-(i_\ell)\Big)}_{\ell\text{ opérateurs }\hat{T}_-}\underbrace{\Big(\sum_{i_1=1}^{A}\hat{t}_+(i_1)\Big)\cdots\Big(\sum_{i_\ell=1}^{A}\hat{t}_+(i_\ell)\Big)}_{\ell\text{ opérateurs }\hat{T}_+} \tag{4.65}$$

$$\hat{T}_-^{\ell}\hat{T}_+^{\ell} = \sum_{k=\ell}^{2\ell}\sum_{i_1<i_2<\cdots<i_k}\frac{\ell\,!}{(k-\ell)!}\binom{\ell}{k-\ell}\,\hat{\mathcal{S}}\Big(\underbrace{(\hat{t}_-\hat{t}_+)^{\otimes(2\ell-k)}\otimes\hat{t}_-^{\otimes(k-\ell)}\otimes\hat{t}_+^{\otimes(k-\ell)}}_{\text{opérateur à }k\text{ corps}}\Big)\,. \tag{4.66}$$

Dans cette expression la notation $\hat{A}^{\otimes k}$ désigne le produit tensoriel de k opérateurs $\hat{A}$. Ainsi,

$$(\hat{t}_-\hat{t}_+)^{\otimes(2\ell-k)}\otimes\hat{t}_-^{\otimes(k-\ell)}\otimes\hat{t}_+^{\otimes(k-\ell)} = \underbrace{(\hat{t}_-\hat{t}_+)\otimes\cdots\otimes(\hat{t}_-\hat{t}_+)}_{2\ell-k\text{ fois}}\otimes\underbrace{\hat{t}_-\otimes\cdots\otimes\hat{t}_-}_{k-\ell\text{ fois}}\otimes\underbrace{\hat{t}_+\otimes\cdots\otimes\hat{t}_+}_{k-\ell\text{ fois}}\,.$$

De plus l'opérateur $\hat{\mathcal{S}}$ désigne le symétriseur, agissant sur les sous-espaces à un corps d'un opérateur quelconque $\mathcal{O}$ de la façon suivante.

$$\hat{\mathcal{S}}\,\mathcal{O}(i_1,i_2,\cdots,i_p) = \sum_{P\in\mathcal{S}_p}\mathcal{O}(i_{P(1)},i_{P(2)},\cdots,i_{P(p)})\,. \tag{4.67}$$

On voit ainsi que $\hat{T}_-^\ell \hat{T}_+^\ell$ est une somme d'opérateurs dont le nombre de corps varie de ℓ à 2ℓ. En effet, tout opérateur à moins de ℓ corps provenant de (4.65) contiendra nécessairement des puissances supérieures à 1 d'un opérateur $\hat{t}_-$ et/ou $\hat{t}_+$ agissant dans un même sous-espace. Or, du fait que $\hat{t}_-^2 = \hat{t}_+^2 = 0$, de tels opérateurs seront donc nuls.

Dans l'expression (4.66) les indices repérant les sous-espaces de chaque particule ont disparu. En explicitant le produit tensoriel et en symétrisant l'expression, on considère en effet que le premier terme du produit agit dans le premier sous-espace (i_1), le deuxième terme dans le deuxième sous-espace (i_2) et ainsi de suite.

4.3.3 Applications à $\hat{\mathbf{T}}^2$ et $\hat{\mathbf{T}}^4$

Les puissances de l'opérateur $\hat{\mathbf{T}}^2$ seront utilisées par la suite pour mettre en œuvre la méthode d'évaluation approchée de la distribution d'isospin caractérisant un état nucléaire développée dans le paragraphe 4.2.4. Bien que cette méthode soit tout à fait générale, elle se révèle de plus en plus complexe quant à son implémentation numérique à mesure que l'on considère des puissances élevées $\hat{\mathbf{T}}^2$. Dans ce travail de thèse, seuls $\hat{\mathbf{T}}^2$ et $\hat{\mathbf{T}}^4$ seront considérés en pratique. Nous allons donc maintenant appliquer les formules développées jusqu'ici dans ces cas particuliers.

Tout d'abord, à l'expression (4.58) de $\hat{\mathbf{T}}^2$,

$$\hat{\mathbf{T}}^2 = \hat{T}_z(\hat{T}_z + 1) + \hat{T}_-\hat{T}_+$$

vient s'ajouter celle de $\hat{\mathbf{T}}^4$,

$$\hat{\mathbf{T}}^4 = \hat{T}_z^2(\hat{T}_z + 1)^2 + 2(\hat{T}_z + 1)^2\,\hat{T}_-\hat{T}_+ + \hat{T}_-^2\hat{T}_+^2\,. \tag{4.68}$$

Ensuite, partant de (4.66) on trouve pour $\hat{T}_-\hat{T}_+$ l'expression suivante.

$$\hat{T}_-\hat{T}_+ = \sum_i \hat{t}_-\hat{t}_+ + \sum_{i<j}\Big[\hat{t}_-\otimes\hat{t}_+ + \hat{t}_+\otimes\hat{t}_-\Big] \tag{4.69}$$

$$\boxed{\hat{T}_-\hat{T}_+ = \hat{Z} + \sum_{i<j}\Big[\hat{t}_-\otimes\hat{t}_+ + \hat{t}_+\otimes\hat{t}_-\Big]}\,. \tag{4.70}$$

où $\hat{Z}$ est l'opérateur nombre de protons défini en (4.7). De même pour $\hat{T}_-^2\hat{T}_+^2$, on trouve

$$\begin{aligned}\hat{T}_-^2\hat{T}_+^2 = {} & 4\sum_{i<j}(\hat{t}_-\hat{t}_+)\otimes(\hat{t}_-\hat{t}_+) + 4\sum_{i<j<k}\Big[(\hat{t}_-\hat{t}_+)\otimes\hat{t}_-\otimes\hat{t}_+ + \textit{permutations}\ldots\Big] \\ & + \sum_{i<j<k<\ell}\Big[\hat{t}_-\otimes\hat{t}_-\otimes\hat{t}_+\otimes\hat{t}_+ + \textit{permutations}\ldots\Big]\end{aligned} \tag{4.71}$$

$$\boxed{\begin{aligned}\hat{T}_-^2\hat{T}_+^2 = {} & 2\,\hat{Z}(\hat{Z}-1) + 4\sum_{i<j<k}\Big[\hat{P}_\pi\otimes\hat{t}_-\otimes\hat{t}_+ + \textit{permutations}\ldots\Big] \\ & + 4\sum_{i<j<k<\ell}\Big[\hat{t}_-\otimes\hat{t}_-\otimes\hat{t}_+\otimes\hat{t}_+ + \textit{permutations}\ldots\Big]\end{aligned}}\,.$$

Chapitre 5

Le mélange d'isospin dans une solution HTDA

Contenu du chapitre

5.1 Brisure non physique d'isospin liée à la méthode
- 5.1.1 Brisure non physique et restauration d'isospin dans l'approximation HF
- 5.1.2 Brisure non physique d'isospin dans HTDA
  - ◦ Troncation de l'espace à un corps
  - ◦ Troncation de l'espace à N corps

5.2 Corrélations d'appariement et approximation DCA
- 5.2.1 Limite d'invariance d'isospin pour les fonctions d'ondes à un corps
- 5.2.2 Brisure de la symétrie d'isospin et approximation DCA
- 5.2.3 Approximation diagonale et mélange d'isospin approché
- 5.2.4 Éléments de matrice de $\hat{\mathbf{T}}^2$ dans la base $\mathcal{B}_T$
  - ◦ Éléments de matrice de $\hat{\mathbf{T}}^2$ dans la base du Toy-Model
  - ◦ Éléments de matrice de $\hat{\mathbf{T}}^2$ dans la base $\mathcal{B}_T$
- 5.2.5 Éléments de matrice de $\hat{H}$ dans la base $\mathcal{B}_T$

5.3 Invariance de la base HTDA $\mathcal{B}$ et approximation DCA généralisée
  - ◦ Invariance de la base HTDA $\mathcal{B}$
  - ◦ Approximation DCA généralisée

5.1 Brisure non physique d'isospin liée à la méthode

Bien que la symétrie d'isospin soit naturellement brisée comme nous l'avons exposé dans le chapitre précédent, il existe souvent un biais non physique lié à la méthode employée pour décrire un système à N corps lorsqu'il s'agit de traiter correctement cette symétrie.

À titre d'exemple, certaines méthodes de description des corrélations d'appariement qui ne conservent pas le nombre de particules (comme les méthodes BCS et HFB) briseront de façon évidente cette symétrie. Également, comme nous le verrons par la suite, les méthodes de champ moyen auto-cohérent de type HF vont briser la symétrie d'isospin pour des noyaux avec $N \neq Z$ même en l'absence d'une interaction brisant la symétrie d'isospin comme l'interaction coulombienne.

Dans le cadre de l'approche HTDA, le nombre de particules est conservé. Les états nucléaires sont donc états propres de $\hat{T}_z$. Il existe cependant une brisure non physique de la symétrie d'isospin qui s'ajoute à sa brisure physique. On peut repérer trois niveaux de brisures liées à HTDA.

Le premier vient de l'approximation de HF qui est le point de départ de l'approche HTDA. Ce mécanisme sera décrit dans la partie 5.1.1. Les deuxième et troisième sources de brisure sont plus spécifiques à HTDA et seront décrites dans la partie 5.1.2.

5.1.1 Brisure non physique et restauration d'isospin dans l'approximation HF

Les approches auto-cohérentes de type HF (HF, CHF, HF+BCS, HFB...) permettent de trouver le minimum de l'énergie d'un système de particules (ou de quasi-particules) indépendantes. Ce faisant, une telle méthode va briser un grand nombre de symétries comme l'invariance par rotation des solutions déformées et éventuellement la symétrie de parité, l'invariance galiléenne et de translation, l'invariance par renversement du sens du temps pour les noyaux impairs et impairs-impairs, le nombre de particules éventuellement ainsi que la symétrie d'isospin.

Pour illustrer ce dernier point nous allons imaginer la première itération d'un calcul HF de principe, décrivant un système composé de N neutrons et Z protons avec $N \neq Z$. Le hamiltonien du système, $\hat{H} = \hat{K} + \hat{V}$, est supposé invariant d'isospin

$$\left[\hat{H}, \hat{\mathbf{T}}^2\right] = \left[\hat{V}, \hat{\mathbf{T}}^2\right] = 0\,.$$

La fonction d'onde d'essai pour le système est un déterminant de Slater bâti sur des fonctions d'ondes de neutrons (notées $|n\rangle$) et de protons (notées $|p\rangle$) identiques (fonctions propres d'un oscillateur harmonique par exemple, ou d'un potentiel de Wood-Saxon).

Si l'on compare la valeur moyenne du potentiel de HF dans un état de neutron $|n'\rangle$ à celle dans l'état analogue $|p'\rangle$ (i.e. $|p'\rangle = \hat{t}_-|n'\rangle$) on obtient

$$\langle n'|\hat{v}_{\rm HF}|n'\rangle = \sum_{n=1}^{N}\langle n'n|\hat{v}|\widetilde{n'n}\rangle + \sum_{p=1}^{Z}\langle n'p|\hat{v}|\widetilde{n'p}\rangle \tag{5.1}$$

$$\text{et} \quad \langle p'|\hat{v}_{\rm HF}|p'\rangle = \sum_{n=1}^{N}\langle p'n|\hat{v}|\widetilde{p'n}\rangle + \sum_{p=1}^{Z}\langle p'p|\hat{v}|\widetilde{p'p}\rangle \tag{5.2}$$

Du fait de l'identité des fonctions d'onde pour les variables de spin et d'espace pour les deux états de charge, il est alors possible de montrer que

$$\langle n'n|\hat{v}|\widetilde{n'n}\rangle = \langle p'p|\hat{v}|\widetilde{p'p}\rangle \qquad \text{et} \qquad \langle n'p|\hat{v}|\widetilde{n'p}\rangle = \langle p'n|\hat{v}|\widetilde{p'n}\rangle \tag{5.3}$$

pour n'importe quelle interaction à deux corps isoscalaire $\hat{V}$. L'expression (5.2) devient alors,

$$\langle p'|\hat{v}_{\rm HF}|p'\rangle = \sum_{n=1}^{Z}\langle n'n|\hat{v}|\widetilde{n'n}\rangle + \sum_{p=1}^{N}\langle n'p|\hat{v}|\widetilde{n'p}\rangle\,. \tag{5.4}$$

Même pour une telle interaction, on note que

$$\langle n'n|\hat{v}|\widetilde{n'n}\rangle \neq \langle n'p|\hat{v}|\widetilde{n'p}\rangle\,. \tag{5.5}$$

En effet, de façon générale l'interaction à deux corps isoscalaire $\hat{V}$ agira dans deux canaux d'isospin possibles, $T = 0$ et $T = 1$. L'élément de matrice $\langle n'n|\hat{v}|\widetilde{n'n}\rangle$ ne concernera alors que le canal $T = 1$ tandis que $\langle n'p|\hat{v}|\widetilde{n'p}\rangle$ concernera à la fois les deux canaux de l'interaction. À cela s'ajoute le fait que pour le canal commun $T = 1$, ces deux éléments de matrice diffèrent à cause du principe de Pauli (voir par exemple l'expression (2.38) de l'interaction $\hat{V}_\delta$).

Il est clair que les deux éléments de matrice (5.1) et (5.4) ne seront égaux entre eux que si et seulement si $N = Z$.

En d'autres termes, le potentiel de HF étant obtenu en moyennant l'interaction $\hat{V}$ sur l'ensemble des états occupés de la fonction d'onde d'essai, il brisera l'isospin dès lors que les nombres de neutrons et de protons différeront.

Pour remédier à ce problème et restaurer la symétrie d'isospin, il faut alors, comme pour toute autre symétrie que l'on souhaite satisfaire dans HF, projeter soit avant (VAP) soit après (PAV) variation sur une base d'états propres de $\hat{\mathbf{T}}^2$.

Le problème de brisure non physique d'isospin dans HF a été mis en évidence la première fois par C. A. Engelbrecht et R. H. Lemmer [61]. Les premiers calculs HF projetés sur l'isospin ont été effectués par E. Caurier *et al.* en 1980 [62].

5.1.2 Brisure non physique d'isospin dans HTDA

La méthode HTDA étant intimement liée à l'approximation de HF dans la mesure où c'est dans ce cadre que sont définies les quasi-particules de type « particule-trou », la principale source de brisure non physique d'isospin dans HTDA résultera de cette approximation. Cependant, comme on l'a déjà mentionné, d'autres sources de brisure non physique de la symétrie d'isospin sont spécifiques à HTDA. Elles sont dues aux diverses troncations de l'espace du modèle auxquelles on a recours.

◦ Troncation de l'espace à un corps

La première source de brisure non physique provient de la troncation de l'espace de valence à un corps formé par les états propres du hamiltonien de HF (où à partir d'un potentiel à un corps résultant de l'approximation HF+BCS). Dans l'approche auto-cohérente employée ici, on effectue deux calculs séparément pour les neutrons et pour les protons. À l'issue d'un tel calcul, on obtient donc deux spectres, un pour les neutrons et un pour les protons.

S'intéresser à l'invariance d'un tel espace vis-à-vis de l'isospin revient à considérer les recouvrements des fonctions d'ondes à un corps des neutrons et des protons. Pour construire un espace de valence stable vis-à-vis de l'isospin, une condition nécessaire est de sélectionner la même fenêtre d'excitation pour les neutrons et pour les protons. Mais cela ne constitue pas une condition suffisante car chaque neutron de l'espace de valence sélectionné pourra avoir un recouvrement non nul avec un ou plusieurs états de proton qui ne sont pas inclus dans l'espace. En toute rigueur, la seule façon de construire un espace de valence invariant d'isospin est de prendre tous les états de la base à un corps (i.e. de ne pas tronquer l'espace).

Puisque la symétrie d'isospin est faiblement brisée dans les noyaux atomiques, un neutron donné aura a priori toujours un analogue (ou proche) chez les protons avec lequel son recouvrement sera proche de 1 (tout au moins dominant). Par la suite, deux états d'un tel couple seront désignés par le terme de *partenaires* et seront à la base de la définition d'une paire neutron-proton dans HTDA. Les autres états de protons ayant un recouvrement non nul mais faible avec un état de neutron donné seront désignés par *petits partenaires*. Ainsi, pour reprendre ce qui a été dit plus haut, pour construire un espace de valence invariant d'isospin, il ne suffit pas de prendre les *partenaires protons* de tous les états de neutrons de la fenêtre mais également tous leurs *petits partenaires*. En pratique, on se limite quand même aux *partenaires* et on introduit ainsi une instabilité non physique d'isospin dans le modèle que l'on espère faible compte tenu de la faiblesse des recouvrements négligés.

◦ Troncation de l'espace à N corps

Si l'on fait abstraction de la première source de brisure non physique d'isospin mentionnée ci-dessus, on peut repérer un deuxième problème lié à la troncation de l'espace de configuration à N corps. En effet, pour un espace à un corps donné, toutes les excitations particule-trou possibles ne sont pas retenues. Une sélection est faite compte tenu de l'importance supposée des termes retenus dans la fonction d'onde corrélées et de la nature des corrélations que l'on veut décrire avec HTDA.

Via des recouvrements non nuls de fonctions d'ondes à un corps, certains déterminants de Slater pourront être couplés par l'opérateur d'isospin $\hat{\mathbf{T}}^2$. Ainsi pour éviter d'aggraver l'instabilité de l'espace du modèle, il faudra construire tous les déterminants de Slater susceptibles d'être couplés par $\hat{\mathbf{T}}^2$ à un état donné, et ce jusqu'à la fermeture de l'espace.

Moyennant une approximation d'égalité des parties de spin et d'espace des fonctions d'onde individuelles de neutrons et de protons, cette tâche ne présente pas de difficulté majeure lorsque l'on considère l'ensemble des excitations d'un type donné dans l'espace de valence. En revanche, elle devient beaucoup plus complexe dès lors que l'on tronque l'espace à N corps au moyen d'un critère sur l'énergie d'excitation individuelle comme effectué dans ce travail. Dans tous les cas, cette deuxième source de brisure d'isospin est toujours évitable. Nous reviendrons sur le problème de l'invariance de la base à N corps tronquée en énergie d'excitation dans la section 5.3.

Pour dresser une liste complète des états de particules indépendantes susceptibles de se connecter à un déterminant de Slater $|\Phi\rangle$ donné via $\hat{\mathbf{T}}^2$, on considère l'action de cet opérateur sur $|\Phi\rangle$ à partir des expressions (4.58) et (4.70) :

$$\hat{\mathbf{T}}^2|\Phi\rangle = \Big[\mathrm{T}_z(\mathrm{T}_z+1)+Z\Big]|\Phi\rangle + \frac{1}{4}\sum_{ijk\ell}\langle ij|(\hat{t}_-\otimes\hat{t}_+ + \hat{t}_+\otimes\hat{t}_-)|\widetilde{k\ell}\rangle\,\hat{\mathrm{a}}_i^\dagger\hat{\mathrm{a}}_j^\dagger\hat{\mathrm{a}}_\ell\hat{\mathrm{a}}_k\,|\Phi\rangle \tag{5.6}$$

$$\hat{\mathbf{T}}^2|\Phi\rangle = \Big[\mathrm{T}_z(\mathrm{T}_z+1)+Z\Big]|\Phi\rangle + \sum_{ijk\ell}\langle\!\langle i|k\rangle\!\rangle\langle\!\langle j|\ell\rangle\!\rangle\,\hat{\mathrm{p}}_i^\dagger\hat{\mathrm{n}}_j^\dagger\hat{\mathrm{n}}_\ell\hat{\mathrm{p}}_k\,|\Phi\rangle\,, \tag{5.7}$$

où $\langle\!\langle i|j\rangle\!\rangle$ désigne le recouvrement des parties de spin et d'espace des états à un corps $|i\rangle$ et $|j\rangle$ et $\hat{\mathrm{n}}_i^\dagger$, $\hat{\mathrm{n}}_i$ (resp. $\hat{\mathrm{p}}_i^\dagger$, $\hat{\mathrm{p}}_i$) sont des opérateurs de création et d'annihilation d'états de neutrons (resp. de protons).

Si on fait l'approximation que les neutrons et les protons ont les mêmes fonctions d'ondes, l'expression (5.7) devient

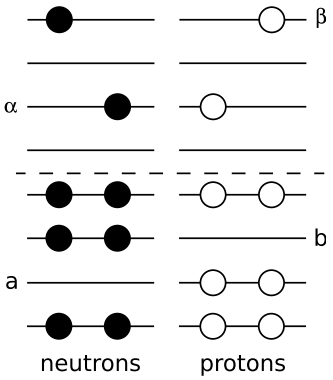
$$\hat{\mathbf{T}}^2|\Phi\rangle = \Big[\mathrm{T}_z(\mathrm{T}_z+1)+\mathrm{card}\,(\mathcal{P}_\Phi\setminus\mathcal{N}_\Phi)\Big]|\Phi\rangle + \sum_{i\in(\mathcal{N}_\Phi\setminus\mathcal{P}_\Phi)}\;\sum_{j\in(\mathcal{P}_\Phi\setminus\mathcal{N}_\Phi)}\hat{\mathrm{p}}_i^\dagger\hat{\mathrm{n}}_i\hat{\mathrm{n}}_j^\dagger\hat{\mathrm{p}}_j\,|\Phi\rangle\,, \tag{5.8}$$

où $\mathcal{P}_\Phi$ et $\mathcal{N}_\Phi$ désignent l'ensemble des états de protons (de neutrons respectivement) occupés dans $|\Phi\rangle$.

L'expression (5.8) nous a permis de lister les propriétés de découplage approché de l'opérateur $\hat{\mathbf{T}}^2$ dans une base de déterminants de Slater s'exprimant comme des excitations de type particule-trou bâties sur l'état résultant d'un calcul de type champ moyen $|\Phi_0\rangle$. Ainsi, dans le cadre de l'approximation conduisant à l'expression (5.8), on peut déduire que

- $\hat{\mathbf{T}}^2$ est diagonal par bloc d'ordre d'excitation.
- $\hat{\mathbf{T}}^2$ est diagonal par sous-bloc d'états faisant intervenir un jeu fixé de niveaux de trous et de niveaux de particules.
- $\hat{\mathbf{T}}^2$ est stable pour le sous-ensemble des excitations de paires.

Cette dernière caractéristique doit cependant faire l'objet d'une remarque. En effet, par excitation de paires est sous-entendue une catégorie plus large de configurations qui doit inclure des *brisures/recombinaisons* de paires. Cette classe d'excitation correspond au fait que l'on peut, lors d'une excitation, briser une paire pour en reformer une autre de nature différente. On peut ainsi par exemple détruire une paire de neutrons d'un niveau a et une paire de protons d'un niveau b et créer deux paires neutrons-protons sur deux niveaux différents α et β comme l'illustre le schéma ci-contre. Bien évidemment, cette catégorie spéciale d'excitations n'apparaît que lorsque l'on considère des transferts de multiples paires.



5.2 Corrélations d'appariement et approximation de *clusters découplés* pour l'isospin

L'approximation de clusters découplés (DCA) est une approximation de structure de l'opérateur d'isospin $\hat{\mathbf{T}}^2$ dans une base composée d'excitations de paires pour décrire les corrélations d'appariement dans les noyaux $N = Z$. Elle repose sur l'hypothèse selon laquelle il existe, même en présence de l'interaction coulombienne, une base qui diagonalise de façon approchée l'opérateur $\hat{\mathbf{T}}^2$.

Dans un premier temps nous allons examiner la structure de l'opérateur d'isospin en supposant une symétrie partielle [1] d'isospin satisfaite par l'égalité des fonctions d'ondes à un corps de neutrons et de protons.

Puis, dans la section 5.2.2, nous allons considérer le cas de fonctions d'ondes réalistes et examiner les mécanismes à l'origine de la brisure de la symétrie d'isospin.

5.2.1 Limite d'invariance d'isospin pour les fonctions d'ondes à un corps

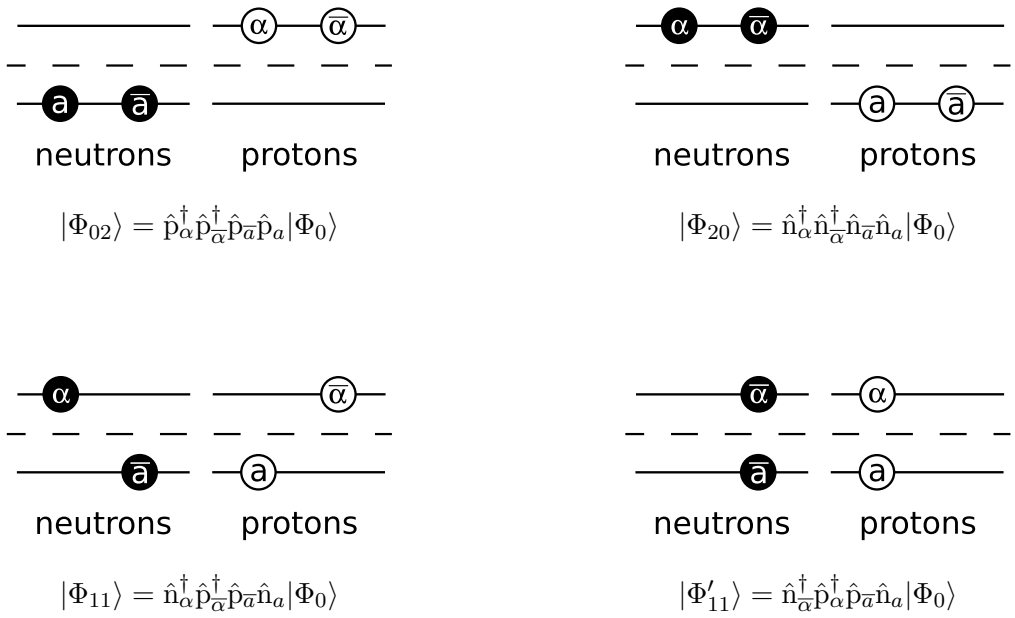
Dans cette section nous allons nous intéresser à la situation idéale pour laquelle les fonctions d'ondes à un corps de neutron et de proton sont identiques. Il sera alors possible d'obtenir des états propres de l'opérateur $\hat{\mathbf{T}}^2$ qui sont des combinaisons linéaires d'excitations particule-trou d'un ordre donné (voir la discussion de l'eq. (5.8)). Afin d'illustrer la construction des ces états, nous allons nous limiter au cas d'une base HTDA composée du quasi-vide $|\Phi_0\rangle$ et d'exciations de simples paires uniquement.

Du point de vue de la structure de la fonction d'onde corrélée HTDA d'un noyau $N = Z$, toute la généralité des configurations correspondant à des tranferts d'une paire (nn, pp et np) peut être analysée à partir d'un modèle à deux niveaux, désigné par la suite par l'expression « *Toy-Model* ».

On considère donc un modèle composé d'un seul niveau de trou (noté a) et d'un seul niveau de particule (noté α). Dans un tel modèle, on ne pourra construire que quatre excitations d'une paire non redondante du point de vue du renversement du sens du temps : une paire nn notée $|\Phi_{20}\rangle$, une paire pp notée $|\Phi_{02}\rangle$ et deux paires np notées $|\Phi_{11}\rangle$ et $|\Phi'_{11}\rangle$. Ces configurations sont schématisées sur la figure 5.1. La fonction d'onde corrélée HTDA s'écrira donc

$$|\Psi\rangle = \chi_0|\Phi_0\rangle + \chi_{02}|\Phi_{02}\rangle + \chi_{11}|\widetilde{\Phi_{11}}\rangle + \chi'_{11}|\widetilde{\Phi'_{11}}\rangle + \chi_{20}|\Phi_{20}\rangle\,, \tag{5.9}$$

1. Quelle qu'en soit l'origine, lorsque la symétrie d'isospin est brisée, on peut dire que cette brisure se manifeste par deux effets distincts dans HF et donc dans HTDA. Le premier est une dissymétrie des spectres à un corps de neutrons et de protons se traduisant par des énergies à un corps différentes pour les neutrons et les protons. Le second est une différence dans les fonctions d'onde elles-mêmes qui se traduit par des recouvrements neutron–proton différents de 1 ou 0.



$|\Phi_{02}\rangle = \hat{\mathrm{p}}^\dagger_\alpha \hat{\mathrm{p}}^\dagger_{\overline{\alpha}} \hat{\mathrm{p}}_{\overline{a}} \hat{\mathrm{p}}_a |\Phi_0\rangle$ $\qquad$ $|\Phi_{20}\rangle = \hat{\mathrm{n}}^\dagger_\alpha \hat{\mathrm{n}}^\dagger_{\overline{\alpha}} \hat{\mathrm{n}}_{\overline{a}} \hat{\mathrm{n}}_a |\Phi_0\rangle$

$|\Phi_{11}\rangle = \hat{\mathrm{n}}^\dagger_\alpha \hat{\mathrm{p}}^\dagger_{\overline{\alpha}} \hat{\mathrm{p}}_{\overline{a}} \hat{\mathrm{n}}_a |\Phi_0\rangle$ $\qquad$ $|\Phi'_{11}\rangle = \hat{\mathrm{n}}^\dagger_{\overline{\alpha}} \hat{\mathrm{p}}^\dagger_\alpha \hat{\mathrm{p}}_{\overline{a}} \hat{\mathrm{n}}_a |\Phi_0\rangle$

FIGURE 5.1 – Différentes configurations possibles d'excitation d'une paire dans un modèle à deux niveaux. Les chiffres en indice des noms des états réfèrent aux ordres d'excitation neutron puis proton. Bien que les spectres des neutrons et des protons se ressemblent, les schémas ne suggèrent aucunement que la symétrie d'isospin soit réalisée dans la définition de ces configurations.

et vérifiera la condition de normalisation $\chi_0^2 + \chi_{02}^2 + \chi_{11}^2 + \chi_{11}'^2 + \chi_{20}^2 = 1$. Les états $|\widetilde{\Phi}\rangle$ dans (5.9) sont définis par (2.44).

Pour analyser le contenu en isospin de la fonction d'onde (5.9), nous allons utiliser l'expression (5.8), qui est applicable dans le cas de fonctions d'onde de neutron et de proton identiques, et nous allons construire les états propres de $\hat{\mathbf{T}}^2$. Il apparaît que le vide de référence $|\Phi_0\rangle$ est état propre de $\hat{\mathbf{T}}^2$ avec la valeur propre T = 0.

$$\hat{\mathbf{T}}^2 |\Phi_0\rangle = 0\,. \tag{5.10}$$

À partir des déterminants de Slater décrits plus haut, on peut former quatre autres états propres de $\hat{\mathbf{T}}^2$: deux états T = 0, un état T = 1 et un état T = 2.

$$|\Psi_0^{(1)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\widetilde{\Phi_{11}}\rangle + |\widetilde{\Phi'_{11}}\rangle \right) \qquad \text{tel que} \quad \hat{\mathbf{T}}^2 |\Psi_0^{(1)}\rangle = 0\,, \tag{5.11}$$

$$|\Psi_0^{(2)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(|\Phi_{02}\rangle + |\Phi_{20}\rangle \right) + \frac{1}{\sqrt{6}} \left(|\widetilde{\Phi_{11}}\rangle - |\widetilde{\Phi'_{11}}\rangle \right) \qquad \text{tel que} \quad \hat{\mathbf{T}}^2 |\Psi_0^{(2)}\rangle = 0\,, \tag{5.12}$$

$$|\Psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\Phi_{02}\rangle - |\Phi_{20}\rangle \right) \qquad \text{tel que} \quad \hat{\mathbf{T}}^2 |\Psi_1\rangle = 2|\Psi_1\rangle\,, \tag{5.13}$$

$$|\Psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} \left(|\Phi_{02}\rangle + |\Phi_{20}\rangle \right) - \frac{1}{\sqrt{3}} \left(|\widetilde{\Phi_{11}}\rangle - |\widetilde{\Phi'_{11}}\rangle \right) \qquad \text{tel que} \quad \hat{\mathbf{T}}^2 |\Psi_2\rangle = 6|\Psi_2\rangle\,. \tag{5.14}$$

Pour un espace de valence plus grand, on généralise le principe du « *Toy-Model* » en regroupant les excitations particule-trou selon les niveaux individuels mis en jeu. Ainsi, à chaque couple de niveaux (b, β) (b pouvant être égal à a ou β à α mais pas les deux simultanément), est associé un nouveau groupe d'états propres de $\hat{\mathbf{T}}^2$ ayant une structure analogue à celle décrite précédemment. L'ensemble des états propres de $\hat{\mathbf{T}}^2$ ainsi formé constituera une base $\mathcal{B}_T \equiv \{|\Phi_0\rangle\} \bigcup_g \mathcal{B}_T^{(g)}$ (où

$\mathcal{B}_T^{(g)} \equiv \left\{ |\Psi_0^{(1)(g)}\rangle, |\Psi_0^{(2)(g)}\rangle, |\Psi_1^{(g)}\rangle, |\Psi_2^{(g)}\rangle \right\}$ pour chaque groupe g). Si on ne considère que des excitations de simples paires, le nombre de groupes est donné par le produit du nombre de niveaux de trous par celui de niveaux de particules.

Compte tenu de l'expression (5.8) pour l'opérateur $\hat{\mathbf{T}}^2$, les états propres d'un groupe donné ne pourront pas se coupler via $\hat{\mathbf{T}}^2$ à ceux des autres groupes. En d'autres termes, vis-à-vis de $\hat{\mathbf{T}}^2$, tous les groupes sont rigoureusement découplés.

Cette procédure de diagonalisation de l'opérateur $\hat{\mathbf{T}}^2$ par groupes est généralisable aux sous-ensembles formés par les excitations d'un nombre plus important de paires. Cependant, à partir des tranferts de deux paires, le nombre de niveaux (trous et/ou particules) impliqués dans ces excitations n'est pas unique. À titre d'exemple, les nombres de niveaux de trous et de niveaux de particules impliqués dans une excitation de deux paires sont compris entre 1 et 2.

La simplicité de la strucutre des états propres de l'opérateur $\hat{\mathbf{T}}^2$ que l'on obtenait dans le « *Toy-Model* » des excitations de simples paires, est perdue dans le cas d'ordres d'excitations plus élevés. Il est alors a priori moins intéressant de donner l'expression de tels états. Cependant dans notre étude, les états propres de l'opérateur $\hat{\mathbf{T}}^2$ associés aux excitations de doubles paires seront déterminés numériquement et utilisés dans le calcul de mélange d'isospin approché.

5.2.2 Brisure de la symétrie d'isospin et approximation DCA

Si maintenant, on considère le cas de fonctions d'onde à un corps réalistes, on dévie de la situation idéale décrite précédemment. Cette déviation peut être analysée dans deux directions.

Premièrement, les recombinaisons (5.11)–(5.14) des déterminants de Slater de départ ne forment plus tout à fait de bons états propres de $\hat{\mathbf{T}}^2$. Ils pourront donc être couplés entre eux ainsi qu'à $|\Phi_0\rangle$. Toutefois, la brisure de la symétrie d'isospin étant faible même pour les noyaux les plus lourds, on continuera de regarder la structure d'une fonction d'onde corrélée à travers ces états (5.11)–(5.14) que nous désignerons désormais par le terme de *pseudo-vecteurs propres* de $\hat{\mathbf{T}}^2$. Naturellement, certains éléments non diagonaux vont apparaître.

Deuxièmement, les éléments de matrices diagonaux de $\hat{\mathbf{T}}^2$ dans la base de ces *pseudo-vecteurs propres* diffèrent légèrement des valeurs idéales $\mathrm{T}(\mathrm{T}+1)$. Ces valeurs seront alors appelées *pseudo-valeurs propres* de $\hat{\mathbf{T}}^2$.

De toute évidence ces deux aspects de la brisure d'isospin sont liés. C'est en effet, du fait des couplages des *pseudo-vecteurs propres* entre eux (au sein d'un groupe comme entre différents groupes) que les *pseudo-valeurs propres* diffèrent des $\mathrm{T}(\mathrm{T}+1)$.

Les éléments de matrices minimaux de $\hat{\mathbf{T}}^2$ pour décrire le couplage des *pseudo-vecteurs propres* sont représentés sur la figure 5.2. Ils sont calculés en détail dans la section 5.2.4.

Dans cette figure, les symboles $\times$ représentent des éléments de matrice très faibles. Ils sont en effet de l'ordre du carré d'un recouvrement neutron-proton entre deux *petits-partenaires*. Ceux représentés par un $\triangle$ et un $\oplus$ sont la plupart du temps nuls et sont de l'ordre de ceux notés $\times$ lorsqu'ils interviennent. Les éléments de matrice $\oplus$ entre $|\Phi_0\rangle$ et les groupes contribueront pour des groupes faisant intervenir un niveau de trou et un niveau de particule ayant les mêmes nombres quantiques Ω et π. Les éléments de matrices $\triangle$ entre deux blocs contribueront lorsque les deux blocs en question partageront soit leur niveau de trou, soit leur niveau de particule et si, de plus, les niveaux qui diffèrent possèdent les mêmes nombres quantiques Ω et π.

	$\|\Phi_0\rangle$	$\times$	$\oplus$	$\oplus$	0	$\oplus$	$\oplus$	$\oplus$	0	$\oplus$
groupe 1			$\times$	0	0	0	$\triangle$	0	0	0
			0	$\times$	$\times$	$\times$	0	$\triangle$	0	$\triangle$
			0	$\times$	$\widetilde{2}$	$\times$	0	0	0	0
			0	$\times$	$\times$	$\widetilde{6}$	0	$\triangle$	0	$\triangle$
groupe 2							$\times$	0	0	0
							0	$\times$	$\times$	$\times$
							0	$\times$	$\widetilde{2}$	$\times$
							0	$\times$	$\times$	$\widetilde{6}$

avec $\widetilde{2} = 2 + \times$, $\widetilde{6} = 6 + \times$ et $|\times| \ll 1$.

FIGURE 5.2 – Schéma de couplage des différents blocs par l'opérateur $\hat{\mathbf{T}}^2$. Les éléments de matrice représentés par un $\times$ sont très faibles et ceux représentés par un $\triangle$ ou un $\oplus$ sont nuls sauf dans de rares cas pour lesquels ils sont du même ordre de grandeur que $\times$ (voir le texte).

5.2.3 Approximation diagonale et mélange d'isospin approché

Afin d'analyser le contenu en isospin d'une fonction d'onde corrélée composée majoritairement de simples paires au-delà de $|\Phi_0\rangle$, il s'est avéré utile de se référer aux *pseudo-vecteurs propres* de $\hat{\mathbf{T}}^2$ sans se soucier de leurs couplages. Dans la suite nous ferons donc l'approximation que les couplages évoqués dans la section précédente sont négligeables et nous ne tiendrons compte, pour le calcul du mélange d'isospin, que de l'écart à $\mathrm{T(T+1)}$ des *pseudo-valeurs propres* (voir figure 5.3). Cette approximation sera par la suite désignée sous le nom de DCA pour *Decoupled Cluster Approximation*.

	$\|\Phi_0\rangle$	$\times$	0	0	0	0	0	0	0	0
groupe 1			$\times$	0	0	0	0	0	0	0
			0	$\times$	0	0	0	0	0	0
			0	0	$\widetilde{2}$	0	0	0	0	0
			0	0	0	$\widetilde{6}$	0	0	0	0
groupe 2							$\times$	0	0	0
							0	$\times$	0	0
							0	0	$\widetilde{2}$	0
							0	0	0	$\widetilde{6}$

FIGURE 5.3 – Approximation diagonale de $\hat{\mathbf{T}}^2$ dans la base $\mathcal{B}_T$ (DCA).

Naturellement, l'approximation de découplage faite pour l'opérateur $\hat{\mathbf{T}}^2$ sera applicable au cas de

$\hat{\mathbf{T}}^4$ etc, les nouveaux éléments de matrices apparaissant alors étant encore plus faibles.

Ainsi, pour les noyaux $N = Z$ pairs-pairs (cas d'application principal de la DCA), le mélange d'isospin d'un état $|\Psi\rangle$ se décomposant dans la base $\mathcal{B}_T$ comme

$$|\Psi\rangle = \chi_0|\Phi_0\rangle + \sum_g \left[a_0^{(1)(g)}|\Psi_0^{(1)(g)}\rangle + a_0^{(2)(g)}|\Psi_0^{(2)(g)}\rangle + a_1^{(g)}|\Psi_1^{(g)}\rangle + a_2^{(g)}|\Psi_2^{(g)}\rangle\right], \tag{5.15}$$

sera donné par

$$\alpha^2 = 1 - P_\Psi(\mathrm{T}_d)\,. \tag{5.16}$$

On a vu, au chapitre précédent (voir (4.38)), que la probabilité $P_\Psi(\mathrm{T})$ s'exprimait en fonction de la valeur minimale d'isospin T_0 comme

$$P_\Psi(\mathrm{T}_0 + i) = \delta_{i0} + \sum_{j=1}^{A/2-\mathrm{T}_0} \Gamma_{ij}\,\mathcal{T}_{2j}(\mathrm{T}_0, \Psi)\,. \tag{5.17}$$

Dans le cadre de l'approximation DCA, la valeur moyenne de l'opérateur $\hat{\mathbf{T}}^{2j}$ dans $|\Psi\rangle$, qui intervient dans le terme $\mathcal{T}_{2j}(\mathrm{T}_0, \Psi)$, se décompose simplement de la façon suivante sur les *pseudo-vecteurs propres* de $\hat{\mathbf{T}}^2$ dans chaque groupe g :

$$\langle\Psi|\hat{\mathbf{T}}^{2j}|\Psi\rangle \approx \chi_0^2\langle\Phi_0|\hat{\mathbf{T}}^{2j}|\Phi_0\rangle + \sum_{g,i}\left|a_i^{(g)}\right|^2\langle\Psi_i^{(g)}|\hat{\mathbf{T}}^{2j}|\Psi_i^{(g)}\rangle\,, \tag{5.18}$$

où $|\Psi_i^{(g)}\rangle$ désigne de façon générique les états $|\Psi_0^{(1)}\rangle$, $|\Psi_0^{(2)}\rangle$, $|\Psi_1\rangle$ et $|\Psi_2\rangle$ du groupe g.

Dans le cas de noyaux $N = Z$ pour lesquels la composante dominante d'isospin est $\mathrm{T}_d = \mathrm{T}_0 = 0$, et en utilisant le fait que les *pseudo-vecteurs propres* de $\hat{\mathbf{T}}^2$ sont normés, on obtient une expression simplifiée du mélange d'isospin

$$\alpha^2 \approx \chi_0^2\,\alpha_0^2 - \sum_{g,i}\left|a_i^{(g)}\right|^2 \sum_{j=1}^{A/2}\Gamma_{0j}\,\mathcal{T}_{2j}\left(0, \Psi_i^{(g)}\right) \tag{5.19}$$

$$\approx \chi_0^2\,\alpha_0^2 + \sum_{g,i}\left|a_i^{(g)}\right|^2\left[1 - P_{\Psi_i^{(g)}}(0)\right] \tag{5.20}$$

$$\alpha^2 \approx \alpha_0^2 + \sum_{g,i}\left|a_i^{(g)}\right|^2\left[P_{\Phi_0}(0) - P_{\Psi_i^{(g)}}(0)\right]\,. \tag{5.21}$$

où les coefficients $\mathcal{T}_{2j}\left(0, \Psi_i^{(g)}\right)$, définis par (4.37), sont devenus simplement les valeurs moyennes

$$\mathcal{T}_{2j}\left(0, \Psi_i^{(g)}\right) = \langle\Psi_i^{(g)}|\hat{\mathbf{T}}^{2j}|\Psi_i^{(g)}\rangle\,, \tag{5.22}$$

et $\alpha_0^2 = -\sum_{j=1}^{A/2}\Gamma_{0j}\,\mathcal{T}_{2j}(0, \Phi_0)$ désigne le mélange d'isospin dans l'état $|\Phi_0\rangle$.

L'expression (5.21) est également tout à fait adaptable à l'approche de projection approchée développée au chapitre précédent. Dans le cas où le développement (4.43) est tronqué à l'ordre n, on

obtient

$$\alpha^2 \approx \chi_0^2\,\alpha_0^2 - \sum_{g,i}\left|a_i^{(g)}\right|^2 \sum_{j=1}^{n}\Gamma_{0j}^{(n)}\,\mathcal{T}_{2j}(\mathrm{T}_0,\Psi_i^{(g)}) \tag{5.23}$$

$$\approx \chi_0^2\,\alpha_0^2 + \sum_{g,i}\left|a_i^{(g)}\right|^2\left[1 - P^{(n)}_{\Psi_i^{(g)}}(0)\right] \tag{5.24}$$

$$\alpha^2 \approx \alpha_0^2 + \sum_{g,i}\left|a_i^{(g)}\right|^2\left[P^{(n)}_{\Phi_0}(0) - P^{(n)}_{\Psi_i^{(g)}}(0)\right]\,. \tag{5.25}$$

Bien sûr, les relations (5.21) et (5.25) se généralisent facilement à tous les ordres d'excitation. Si on écrit l'état du système de façon générale en fonction de *pseudo-vecteurs propres* de $\hat{\mathbf{T}}^2$ comme

$$|\Psi\rangle = \chi_0^2|\Phi_0\rangle + \sum_{m\mathrm{p}m\mathrm{h}}\sum_{\mathrm{T}\geqslant 0}\sum_{i}\Psi^{(i)}_{m\mathrm{p}m\mathrm{h},\mathrm{T}}\,, \tag{5.26}$$

alors le mélange d'isospin approché s'écrit

$$\alpha^2 \approx \alpha_0^2 + \sum_{m\mathrm{p}m\mathrm{h}}\sum_{\mathrm{T}\geqslant 0}\sum_{i}\left|a^{(i)}_{m\mathrm{p}m\mathrm{h},\mathrm{T}}\right|^2\left[P^{(n)}_{\Phi_0}(0) - P^{(n)}_{\Psi^{(i)}_{m\mathrm{p}m\mathrm{h},\mathrm{T}}}(0)\right] \tag{5.27}$$

$$\alpha^2 \approx \alpha_0^2 + \sum_{m\mathrm{p}m\mathrm{h}} C_{m\mathrm{p}m\mathrm{h}}\,, \tag{5.28}$$

où $C_{m\mathrm{p}m\mathrm{h}}$ est la contribution au mélange d'isospin approché de l'ensemble des excitations $m\mathrm{p}m\mathrm{h}$. De plus, $\left|a^{(i)}_{m\mathrm{p}m\mathrm{h},\mathrm{T}}\right|^2$ représente le poids, dans la fonction d'onde corrélée, du *pseudo-vecteur propre* $\Psi^{(i)}_{m\mathrm{p}m\mathrm{h},\mathrm{T}}$ associé à une *pseudo-valeur propre* d'isospin T. La quantité $\alpha^2 - \alpha_0^2$ représente alors la contribution des corrélations, au-delà de $|\Phi_0\rangle$, au mélange d'isospin de $|\Psi\rangle$.

Ainsi, pour un ordre d'excitation quelconque $m\mathrm{p}m\mathrm{h}$, un *pseudo-vecteur propre* de $\hat{\mathbf{T}}^2$, $|\Psi_\mathrm{T}\rangle$, associé à une *pseudo-valeur propre* d'isospin T, va contribuer au mélange d'isospin par le terme

$$|a_\mathrm{T}|^2\left[P^{(n)}_{\Phi_0}(0) - P^{(n)}_{\Psi_\mathrm{T}}(0)\right]\,. \tag{5.29}$$

Pour comprendre comment l'état $|\Psi_\mathrm{T}\rangle$ apporte sa contribution au mélange, il faut distinguer deux situations : celle où $\mathrm{T} = 0$ et celle où $\mathrm{T} \neq 0$.

Dans le premier cas, la probabilité $P^{(n)}_{\Psi_{\mathrm{T}=0}}(0)$ sera proche de 100%, tout comme celle de l'état $|\Phi_0\rangle$. La différence des probabilités dans (5.29) sera alors très faible. On s'attend cependant à ce qu'un tel état ait un poids $|a_{\mathrm{T}=0}|^2$ important dans la fonction d'onde corrélée.

Dans le deuxième cas, c'est tout le contraire. Si $\mathrm{T} \neq 0$, la probabilité $P^{(n)}_{\Psi_{\mathrm{T}\neq 0}}(0)$ sera très faible et la différence $P^{(n)}_{\Phi_0}(0) - P^{(n)}_{\Psi_{\mathrm{T}\neq 0}}(0)$ deviendra pratiquement égale à 1. Puisque la symétrie d'isospin est respectée à un très bon degré d'approximation dans le noyau, on s'attend à ce qu'un tel état avec $\mathrm{T} \neq 0$ ait un poids $|a_{\mathrm{T}\neq 0}|^2$ très faible dans la fonction d'onde corrélée.

Il existe donc une compétition entre ces deux effets et c'est la combinaison des deux qui fera qu'un *pseudo-vecteur propre* de $\hat{\mathbf{T}}^2$ contribuera ou non au mélange d'isospin dans la fonction d'onde au-delà de $|\Phi_0\rangle$. De plus, les différences de probabilités $P^{(n)}_{\Phi_0}(0) - P^{(n)}_{\Psi_\mathrm{T}}(0)$ ne dépendent que des fonctions d'onde à un corps et sont par conséquent indépendantes de l'intensité de l'interaction résiduelle $\hat{V}_\mathrm{res}$ décrivant les corrélations au-delà du champ moyen.

Ainsi, en effectuant le changement de base pour passer des excitations particule-trous $|\Phi\rangle$ aux *pseudo-vecteurs propres* de $\hat{\mathbf{T}}^2$, on met en évidence de façon extrêmement simple et pertinente le contenu en isospin de la fonction d'onde corrélée HTDA. La DCA constitue donc une approximation très efficace d'analyse du mélange d'isospin d'une telle fonction d'onde permettant de mieux comprendre l'évolution de la brisure de cette symétrie en fonction des corrélations dans le système.

5.2.4 Éléments de matrice de $\hat{\mathbf{T}}^2$ dans la base $\mathcal{B}_T$

Dans cette section, nous donnons les expressions des éléments de matrice de l'opérateur $\hat{\mathbf{T}}^2$ dans la base composée par les états du *Toy-Model* décrits dans la figure 5.1 dans un premier temps, puis dans la base $\mathcal{B}_T$ des *pseudo-vecteurs propres* de $\hat{\mathbf{T}}^2$. Ces résultats sont obtenus à partir des développements de l'annexe D. Les éléments de matrice suivants s'expriment en termes des fonctions $\mathcal{R}_\Phi$ et $\mathcal{G}(i,j,k,\ell)$ définies dans cette annexe. Rappelons leur définitions :

$$\mathcal{R}_\Phi = \sum_{n,p\in|\Phi\rangle} |\langle\!\langle n|p\rangle\!\rangle|^2 \qquad \text{et} \qquad \mathcal{G}(i,j,k,\ell) = \delta_{ip}\delta_{jn}\delta_{kn}\delta_{\ell p}\langle\!\langle i|k\rangle\!\rangle\langle\!\langle j|\ell\rangle\!\rangle\,, \tag{5.30}$$

où $\langle\!\langle i|j\rangle\!\rangle$ désigne toujours le recouvrement des parties de spin et d'espace des états à un corps $|i\rangle$ et $|j\rangle$ et δ_{iq} indique que l'état $|i\rangle$ doit être de charge q.

◦ Éléments de matrice de $\hat{\mathbf{T}}^2$ dans la base du Toy-Model

☞ Couplage de $|\Phi_0\rangle$ aux états d'un groupe donné :

$$\langle\Phi_0|\hat{\mathbf{T}}^2|\Phi_0\rangle = Z - \mathcal{R}_{\Phi_0} \tag{5.31}$$
$$\langle\Phi_0|\hat{\mathbf{T}}^2|\Phi_{02}\rangle = \langle\Phi_0|\hat{\mathbf{T}}^2|\Phi_{20}\rangle = 0 \tag{5.32}$$
$$\langle\Phi_0|\hat{\mathbf{T}}^2|\widetilde{\Phi_{11}}\rangle = \sqrt{2}\,\langle\Phi_0|\hat{\mathbf{T}}^2|\Phi_{11}\rangle = -\sqrt{2}\,\mathcal{G}(\overline{p},n,\nu,\overline{\pi}) = -\sqrt{2}\,\langle\!\langle\overline{p}|\nu\rangle\!\rangle\langle\!\langle n|\overline{\pi}\rangle\!\rangle = 0 \tag{5.33}$$
$$\langle\Phi_0|\hat{\mathbf{T}}^2|\widetilde{\Phi'_{11}}\rangle = \sqrt{2}\,\langle\Phi_0|\hat{\mathbf{T}}^2|\Phi'_{11}\rangle - \sqrt{2}\,\mathcal{G}(\overline{p},n,\overline{\nu},\pi) = -\sqrt{2}\,\langle\!\langle p|\nu\rangle\!\rangle\langle\!\langle n|\pi\rangle\!\rangle\,. \tag{5.34}$$

On voit $|\Phi_0\rangle$ ne se couple qu'à $|\widetilde{\Phi'_{11}}\rangle$ et ce, uniquement si les niveaux de trous et de particules définissant le groupe auquel appartient $|\widetilde{\Phi'_{11}}\rangle$ ont les mêmes nombres quantiques Ω et π.

☞ Couplages au sein d'un groupe :

$$\langle\widetilde{\Phi_{11}}|\hat{\mathbf{T}}^2|\widetilde{\Phi_{11}}\rangle = \langle\Phi_{11}|\hat{\mathbf{T}}^2|\Phi_{11}\rangle = Z - \mathcal{R}_{\Phi_{11}} \tag{5.35}$$
$$\langle\widetilde{\Phi_{11}}|\hat{\mathbf{T}}^2|\widetilde{\Phi'_{11}}\rangle = \langle\Phi_{11}|\hat{\mathbf{T}}^2|\Phi'_{11}\rangle = -|\langle\!\langle p|n\rangle\!\rangle|^2 - |\langle\!\langle\pi|\nu\rangle\!\rangle|^2 \tag{5.36}$$
$$\langle\widetilde{\Phi_{11}}|\hat{\mathbf{T}}^2|\Phi_{02}\rangle = \sqrt{2}\,\langle\Phi_{11}|\hat{\mathbf{T}}^2|\Phi_{02}\rangle = -\sqrt{2}\,\mathcal{G}(p,\nu,n,\pi) = -\sqrt{2}\,\langle\!\langle p|n\rangle\!\rangle\langle\!\langle\nu|\pi\rangle\!\rangle \tag{5.37}$$
$$\langle\widetilde{\Phi_{11}}|\hat{\mathbf{T}}^2|\Phi_{20}\rangle = \sqrt{2}\,\langle\Phi_{11}|\hat{\mathbf{T}}^2|\Phi_{20}\rangle = -\sqrt{2}\,\mathcal{G}(\overline{p},\overline{\nu},\overline{n},\overline{\pi}) = -\sqrt{2}\,\langle\!\langle p|n\rangle\!\rangle\langle\!\langle\nu|\pi\rangle\!\rangle \tag{5.38}$$

$$\langle\widetilde{\Phi'_{11}}|\hat{\mathbf{T}}^2|\widetilde{\Phi'_{11}}\rangle = \langle\Phi'_{11}|\hat{\mathbf{T}}^2|\Phi'_{11}\rangle = Z - \mathcal{R}_{\Phi'_{11}} \tag{5.39}$$
$$\langle\widetilde{\Phi'_{11}}|\hat{\mathbf{T}}^2|\Phi_{02}\rangle = \sqrt{2}\,\langle\Phi'_{11}|\hat{\mathbf{T}}^2|\Phi_{02}\rangle = \sqrt{2}\,\mathcal{G}(p,\overline{\nu},n,\overline{\pi}) = \sqrt{2}\,\langle\!\langle p|n\rangle\!\rangle\langle\!\langle\nu|\pi\rangle\!\rangle \tag{5.40}$$
$$\langle\widetilde{\Phi'_{11}}|\hat{\mathbf{T}}^2|\Phi_{20}\rangle = \sqrt{2}\,\langle\Phi'_{11}|\hat{\mathbf{T}}^2|\Phi_{20}\rangle = \sqrt{2}\,\mathcal{G}(\pi,\overline{n},\nu,\overline{\pi}) = \sqrt{2}\,\langle\!\langle p|n\rangle\!\rangle\langle\!\langle\nu|\pi\rangle\!\rangle \tag{5.41}$$

$$\langle\Phi_{02}|\hat{\mathbf{T}}^2|\Phi_{02}\rangle = Z - \mathcal{R}_{\Phi_{02}} \tag{5.42}$$
$$\langle\Phi_{02}|\hat{\mathbf{T}}^2|\Phi_{20}\rangle = 0 \tag{5.43}$$

$$\langle\Phi_{20}|\hat{\mathbf{T}}^2|\Phi_{20}\rangle = Z - \mathcal{R}_{\Phi_{20}} \tag{5.44}$$

On a donc

$$\langle\widetilde{\Phi_{11}}|\hat{\mathbf{T}}^2|\Phi_{02}\rangle = \langle\widetilde{\Phi_{11}}|\hat{\mathbf{T}}^2|\Phi_{20}\rangle = -\langle\widetilde{\Phi'_{11}}|\hat{\mathbf{T}}^2|\Phi_{02}\rangle = -\langle\widetilde{\Phi'_{11}}|\hat{\mathbf{T}}^2|\Phi_{20}\rangle\,. \tag{5.45}$$

De plus, on peut montrer que $\mathcal{R}_{\Phi_{11}} = \mathcal{R}_{\Phi'_{11}}$. Par conséquent, on a

$$\langle\widetilde{\Phi_{11}}|\hat{\mathbf{T}}^2|\widetilde{\Phi_{11}}\rangle = \langle\widetilde{\Phi'_{11}}|\hat{\mathbf{T}}^2|\widetilde{\Phi'_{11}}\rangle\,. \tag{5.46}$$

☞ Couplages entre différents groupes (g_1) et (g_2) :
Dans ce cas de figure, très peu d'éléments de matrice subsistent. Nous listerons alors uniquement les situations conduisant à des éléments de matrice non nuls.

$$\langle\widetilde{\Phi_{11}}^{(g_1)}|\hat{\mathbf{T}}^2|\widetilde{\Phi'_{11}}^{(g_2)}\rangle = \begin{cases} -\langle\!\langle\pi|\nu'\rangle\!\rangle\langle\!\langle\nu|\pi'\rangle\!\rangle & \text{si } (g_1) \text{ et } (g_2) \text{ diffèrent uniquement} \\ & \text{par leur niveau de particule.} \\ -\langle\!\langle p'|n\rangle\!\rangle\langle\!\langle n'|p\rangle\!\rangle & \text{si } (g_1) \text{ et } (g_2) \text{ diffèrent uniquement} \\ & \text{par leur niveau de trou.} \end{cases} \tag{5.47}$$

$$\langle\widetilde{\Phi_{11}}^{(g_2)}|\hat{\mathbf{T}}^2|\widetilde{\Phi'_{11}}^{(g_1)}\rangle = \langle\widetilde{\Phi_{11}}^{(g_1)}|\hat{\mathbf{T}}^2|\widetilde{\Phi'_{11}}^{(g_2)}\rangle \tag{5.48}$$

◦ Éléments de matrice de $\hat{\mathbf{T}}^2$ dans la base $\mathcal{B}_T$

☞ Couplages de $|\Phi_0\rangle$ aux autres *pseudo-vecteurs propres* de $\hat{\mathbf{T}}^2$:

$$\langle\Phi_0|\hat{\mathbf{T}}^2|\Psi_0^{(1)}\rangle = -\langle\!\langle p|\nu\rangle\!\rangle\langle\!\langle n|\pi\rangle\!\rangle \tag{5.49}$$

$$\langle\Phi_0|\hat{\mathbf{T}}^2|\Psi_0^{(2)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\langle\!\langle p|\nu\rangle\!\rangle\langle\!\langle n|\pi\rangle\!\rangle \tag{5.50}$$

$$\langle\Phi_0|\hat{\mathbf{T}}^2|\Psi_1\rangle = 0 \tag{5.51}$$

$$\langle\Phi_0|\hat{\mathbf{T}}^2|\Psi_2\rangle = -\sqrt{\frac{2}{3}}\langle\!\langle p|\nu\rangle\!\rangle\langle\!\langle n|\pi\rangle\!\rangle \tag{5.52}$$

☞ Couplages entre les *pseudo-vecteurs propres* d'un groupe donné :
Là encore, seuls les éléments de matrice non nuls sont listés.

$$\langle\Psi_0^{(1)}|\hat{\mathbf{T}}^2|\Psi_0^{(1)}\rangle = Z - \mathcal{R}_{\Phi_{11}} - |\langle\!\langle p|n\rangle\!\rangle|^2 - |\langle\!\langle\pi|\nu\rangle\!\rangle|^2 \tag{5.53}$$

$$\langle\Psi_0^{(2)}|\hat{\mathbf{T}}^2|\Psi_0^{(2)}\rangle = Z - \frac{1}{3}\Big(\mathcal{R}_{\Phi_{02}} + \mathcal{R}_{\Phi_{20}} + \mathcal{R}_{\Phi_{11}}\Big) + \frac{1}{3}\Big(\langle\!\langle p|n\rangle\!\rangle - \langle\!\langle\pi|\nu\rangle\!\rangle\Big)^2 - 2\langle\!\langle p|n\rangle\!\rangle\langle\!\langle\pi|\nu\rangle\!\rangle \tag{5.54}$$

$$\langle\Psi_0^{(2)}|\hat{\mathbf{T}}^2|\Psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}\Big(\mathcal{R}_{\Phi_{02}} - \mathcal{R}_{\Phi_{20}}\Big) \tag{5.55}$$

$$\langle\Psi_0^{(2)}|\hat{\mathbf{T}}^2|\Psi_2\rangle = \frac{1}{3\sqrt{2}}\Big(2\mathcal{R}_{\Phi_{11}} - \mathcal{R}_{\Phi_{02}} - \mathcal{R}_{\Phi_{20}}\Big) - \frac{\sqrt{2}}{3}\Big(\langle\!\langle p|n\rangle\!\rangle - \langle\!\langle\pi|\nu\rangle\!\rangle\Big)^2 \tag{5.56}$$

$$\langle\Psi_1|\hat{\mathbf{T}}^2|\Psi_1\rangle = Z - \frac{1}{2}\Big(\mathcal{R}_{\Phi_{02}} + \mathcal{R}_{\Phi_{20}}\Big) \tag{5.57}$$

$$\langle\Psi_1|\hat{\mathbf{T}}^2|\Psi_2\rangle = \frac{1}{2\sqrt{3}}\Big(\mathcal{R}_{\Phi_{20}} - \mathcal{R}_{\Phi_{02}}\Big) \tag{5.58}$$

$$\langle\Psi_2|\hat{\mathbf{T}}^2|\Psi_2\rangle = Z - \frac{1}{6}\Big(\mathcal{R}_{\Phi_{02}} + \mathcal{R}_{\Phi_{20}} + 4\mathcal{R}_{\Phi_{11}}\Big) + \Big(\langle\!\langle p|n\rangle\!\rangle - \langle\!\langle\pi|\nu\rangle\!\rangle\Big)^2 + 4\langle\!\langle p|n\rangle\!\rangle\langle\!\langle\pi|\nu\rangle\!\rangle \tag{5.59}$$

☞ Couplages entre *pseudo-vecteurs propres* appartenant à des groupes (g_1) et (g_2) différents :
Ici également nous ne listons que les éléments de matrice non nuls.

$$\langle \Psi_0^{(1)(g_1)} | \hat{\mathbf{T}}^2 | \Psi_0^{(1)(g_2)} \rangle = \begin{cases} -\langle\langle \pi | \nu' \rangle\rangle \langle\langle \nu | \pi' \rangle\rangle & \text{si } (g_1) \text{ et } (g_2) \text{ diffèrent uniquement} \\ & \text{par leur niveau de particule.} \\ -\langle\langle p' | n \rangle\rangle \langle\langle n' | p \rangle\rangle & \text{si } (g_1) \text{ et } (g_2) \text{ diffèrent uniquement} \\ & \text{par leur niveau de trou.} \end{cases} \tag{5.60}$$

$$\langle \Psi_0^{(2)(g_1)} | \hat{\mathbf{T}}^2 | \Psi_0^{(2)(g_2)} \rangle = \begin{cases} -\frac{1}{6} \langle\langle \pi | \nu' \rangle\rangle \langle\langle \nu | \pi' \rangle\rangle & \text{si } (g_1) \text{ et } (g_2) \text{ diffèrent uniquement} \\ & \text{par leur niveau de particule.} \\ -\frac{1}{6} \langle\langle p' | n \rangle\rangle \langle\langle n' | p \rangle\rangle & \text{si } (g_1) \text{ et } (g_2) \text{ diffèrent uniquement} \\ & \text{par leur niveau de trou.} \end{cases} \tag{5.61}$$

$$\langle \Psi_0^{(2)(g_1)} | \hat{\mathbf{T}}^2 | \Psi_2^{(g_2)} \rangle = \begin{cases} -\frac{\sqrt{2}}{3} \langle\langle \pi | \nu' \rangle\rangle \langle\langle \nu | \pi' \rangle\rangle & \text{si } (g_1) \text{ et } (g_2) \text{ diffèrent uniquement} \\ & \text{par leur niveau de particule.} \\ -\frac{\sqrt{2}}{3} \langle\langle p' | n \rangle\rangle \langle\langle n' | p \rangle\rangle & \text{si } (g_1) \text{ et } (g_2) \text{ diffèrent uniquement} \\ & \text{par leur niveau de trou.} \end{cases} \tag{5.62}$$

$$\langle \Psi_0^{(2)(g_2)} | \hat{\mathbf{T}}^2 | \Psi_2^{(g_1)} \rangle = \langle \Psi_0^{(2)(g_1)} | \hat{\mathbf{T}}^2 | \Psi_2^{(g_2)} \rangle \tag{5.63}$$

$$\langle \Psi_2^{(g_1)} | \hat{\mathbf{T}}^2 | \Psi_2^{(g_2)} \rangle = \begin{cases} -\frac{1}{3} \langle\langle \pi | \nu' \rangle\rangle \langle\langle \nu | \pi' \rangle\rangle & \text{si } (g_1) \text{ et } (g_2) \text{ diffèrent uniquement} \\ & \text{par leur niveau de particule.} \\ -\frac{1}{3} \langle\langle p' | n \rangle\rangle \langle\langle n' | p \rangle\rangle & \text{si } (g_1) \text{ et } (g_2) \text{ diffèrent uniquement} \\ & \text{par leur niveau de trou.} \end{cases} \tag{5.64}$$

5.2.5 Éléments de matrice de $\hat{H}$ dans la base $\mathcal{B}_T$

Afin de déduire l'importance de chacun des états de la base $\mathcal{B}_T$ dans la fonction d'onde fondamentale HTDA, nous allons examiner l'impact au premier ordre des perturbations de l'interaction résiduelle $\hat{V}_{\text{res}}$ sur l'état non perturbé $|\Phi_0\rangle$.

Rappelons que, dans l'approche HTDA, le hamiltonien du système $\hat{H}$ s'écrit (voir chapitre 2)

$$\hat{H} = \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_0 \rangle + \hat{H}_{\text{IQP}} + \hat{V}_{\text{res}} \, . \tag{5.65}$$

Bien que les états de la base $\mathcal{B}_T$ ne soient pas états propres du hamiltonien $\hat{H}_{\text{IQP}}$, cet opérateur reste néanmoins diagonal dans cette représentation [2]. Pour chaque groupe g, on peut définir une énergie

2. Cette propriété tient au fait que le hamiltonien $\hat{H}_{\text{IQP}}$ est un opérateur à un corps et que l'on ne considère pas d'excitations de type 1p1h dans notre modèle. La base $\mathcal{B}_T$ n'est donc pas complète vis-à-vis de cet opérateur.

d'excitation individuelle moyenne E_g^* (au sens des énergies propres du hamiltonien $\hat{H}_{\rm IQP}$ dans la base HTDA d'origine) telle que

$$E_g^* = \frac{1}{4}(E_{02}^* + E_{20}^* + 2E_{11}^*) = E_{11}^* \,, \tag{5.66}$$

où E_{02}^* désigne la valeur propre de $\hat{H}_{\rm IQP}$ associée à l'état $|\Phi_{02}\rangle$ du groupe g, E_{20}^* celle de $|\Phi_{20}\rangle$ et E_{11}^* est celle de $|\widetilde{\Phi_{11}}\rangle$ qui est aussi celle de $|\widetilde{\Phi'_{11}}\rangle$. Compte tenu de la nature de ces excitations, E_{11}^* est la moyenne de E_{02}^* et E_{20}^*.

Ainsi la sous matrice de $\hat{H}_{\rm IQP}$ pour un groupe g sera donnée par

$$\mathrm{mat}_g(\hat{H}_{\rm IQP}) = E_g^* \, \mathbb{1} = E_{11}^* \, \mathbb{1} \,. \tag{5.67}$$

Dans une approche perturbative, le hamiltonien HTDA s'écrira

$$\hat{H} = \langle\Phi_0|\hat{H}|\Phi_0\rangle + \hat{H}_{\rm IQP} + \hat{V}_{\rm res} = \hat{\tilde{H}} + \hat{V}_{\rm res} \,. \tag{5.68}$$

L'état non perturbé satisfait

$$\hat{\tilde{H}}|\Phi_0\rangle = \langle\Phi_0|\hat{H}|\Phi_0\rangle|\Phi_0\rangle \,, \tag{5.69}$$

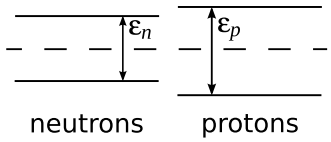
et les déterminants de Slater de la base $\mathcal{B}$ satisfont de façon générale,

$$\hat{\tilde{H}}|\Phi_i\rangle = \big(\langle\Phi_0|\hat{H}|\Phi_0\rangle + E_i^*\big)|\Phi_i\rangle \,. \tag{5.70}$$

Ainsi, au premier ordre des perturbations, l'état perturbé $|\Xi\rangle$ (pour un groupe donné) est donné par

$$|\Xi\rangle = |\Phi_0\rangle + \sum_{\rm T=0}^{1} |\delta\Xi^{\rm (T)}\rangle = |\Phi_0\rangle + \sum_{\rm T=0}^{1} \sum_{|\Phi_i\rangle\in\mathcal{B}} \frac{\langle\Phi_i|\hat{V}_{\rm res}^{\rm (T)}|\Phi_0\rangle}{E_i^*}|\Phi_i\rangle \,. \tag{5.71}$$

Examinons quelle forme prend l'état perturbé $|\Xi\rangle$ en fonction des *pseudo-vecteurs propres* de $\hat{\mathbf{T}}^2$ lorsqu'on ne considère qu'un seul canal d'isospin de $\hat{V}_{\rm res}$. Pour cela définissons l'écart relatif des énergies individuelles de neutron ε_n et de proton ε_p pour un groupe donné



$$\varepsilon = \frac{\varepsilon_p - \varepsilon_n}{\varepsilon_p + \varepsilon_n} \,. \tag{5.72}$$

Avec ces notations, on remarque que

$$E_{02}^* = 2\varepsilon_p \,, \quad E_{20}^* = 2\varepsilon_n \quad \text{et} \quad E_{11}^* = \varepsilon_n + \varepsilon_p = \frac{1}{2}\big(E_{02}^* + E_{20}^*\big) \,. \tag{5.73}$$

Les intensités de l'interaction résiduelle dans chaque canal seront traduites par les quantités sans dimension

$$x_1 = \frac{\langle\Phi_{20}|\hat{V}_{\rm res}|\Phi_0\rangle + \langle\Phi_{02}|\hat{V}_{\rm res}|\Phi_0\rangle}{E_{11}^*} \tag{5.74}$$

$$x_0 = \frac{\langle\widetilde{\Phi_{11}}|\hat{V}_{\rm res}|\Phi_0\rangle + \langle\widetilde{\Phi'_{11}}|\hat{V}_{\rm res}|\Phi_0\rangle}{\sqrt{2}\, E_{11}^*} \,. \tag{5.75}$$

De plus, nous désignerons par λ, μ_0 et μ_1 les quantités suivantes, basées sur les éléments de matrice de $\hat{V}_{\rm res}$ intervenant dans le développement perturbatif (5.71),

$$\lambda = \frac{\langle\Phi_{20}|\hat{V}_{\rm res}|\Phi_0\rangle - \langle\Phi_{02}|\hat{V}_{\rm res}|\Phi_0\rangle}{x_1\, E_{11}^*} \,, \tag{5.76}$$

$$\mu_0 = \frac{\langle\widetilde{\Phi_{11}}|\hat{V}_{\rm res}^{(T=0)}|\Phi_0\rangle - \langle\widetilde{\Phi'_{11}}|\hat{V}_{\rm res}^{(T=0)}|\Phi_0\rangle}{\sqrt{2}\, x_0\, E_{11}^*} \,, \tag{5.77}$$

$$\mu_1 = \sqrt{2}\, \frac{\langle\widetilde{\Phi_{11}}|\hat{V}_{\rm res}^{(T=1)}|\Phi_0\rangle - \langle\widetilde{\Phi'_{11}}|\hat{V}_{\rm res}^{(T=1)}|\Phi_0\rangle}{x_1\, E_{11}^*} - 1 \,. \tag{5.78}$$

Le seul canal d'isospin de $\hat{V}_{\rm res}$ impliqué dans (5.74) et (5.76) est le canal T = 1 tandis que le canal T = 0 est le seul à contribuer à la somme des éléments de matrice dans (5.75). Par contre, les deux canaux d'isospin de $\hat{V}_{\rm res}$ peuvent contribuer à la différence des éléments de matrice de (5.77) et (5.78) et leur distinction est par conséquent clairement indiquée. Les paramètres λ, μ_0 et μ_1 sont des quantités qui mesurent l'effet sur les fonctions d'onde individuelles de la brisure d'isospin causée par l'interaction coulombienne. Ces trois paramètres sont par conséquent très faibles.

Ainsi, le canal T = 0 de l'interaction $\hat{V}_{\rm res}$ donnera, au premier ordre en x_0,

$$|\delta\Xi^{(0)}\rangle = x_0|\Psi_0^{(1)}\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}}\,\mu_0\,x_0\,|\Psi_2\rangle + \frac{x_0}{\sqrt{3}}\,\mu_0\,|\Psi_0^{(2)}\rangle\,, \tag{5.79}$$

tandis que le canal T = 1 donnera, au premier ordre en x_1,

$$|\delta\Xi^{(1)}\rangle = \frac{x_1}{\sqrt{3}}\left[\frac{1+\lambda\varepsilon}{1-\varepsilon^2} + \frac{1}{2}(\mu_1+1)\right]|\Psi_0^{(2)}\rangle - \frac{x_1}{\sqrt{2}}\,\frac{\lambda+\varepsilon}{1-\varepsilon^2}\,|\Psi_1\rangle + \frac{x_1}{\sqrt{6}}\left[\frac{\varepsilon(\varepsilon+\lambda)}{1-\varepsilon^2} - \mu_1\right]|\Psi_2\rangle\,. \tag{5.80}$$

Ainsi, on voit que le canal T = 0 de l'interaction résiduelle $\hat{V}_{\rm res}$ va favoriser essentiellement l'état $|\Psi_0^{(1)}\rangle$, le poids des états $|\Psi_2\rangle$ et $|\Psi_0^{(2)}\rangle$ étant pondéré par le paramètre μ_0 qui est petit devant 1. Par contre, le canal T = 1 favorisera les états $|\Psi_0^{(2)}\rangle$ et dans une moindre mesure les états $|\Psi_1\rangle$ et $|\Psi_2\rangle$. En effet, si le paramètre ε est petit devant 1, une hiérarchie s'établit dans (5.80) entre ces trois états. Toute chose égale par ailleurs, le poids de l'état $|\Psi_0^{(2)}\rangle$ proportionnel à x_1, celui de $|\Psi_1\rangle$ varie comme à $x_1\,\varepsilon$ et celui de $|\Psi_2\rangle$ varie comme $x_1\,\varepsilon^2$.

5.3 Invariance de la base HTDA $\mathcal{B}$ et approximation DCA généralisée

◦ Invariance de la base HTDA $\mathcal{B}$

La réorganisation des états de la base $\mathcal{B}$ en groupes (clusters) n'est pas utile que pour appliquer l'approximation DCA en vue d'analyser le contenu en isospin d'une fonction d'onde corrélée. Elle constitue également un moyen sûr de construire une base $\mathcal{B}$ invariante d'isospin (à l'interaction coulombienne près).

Le problème se pose lorsque l'on tronque l'espace à N corps selon le schéma basé sur l'énergie d'excitation individuelle E^* de chaque configuration. Du fait de l'asymétrie des spectres à un corps des neutrons et des protons, il se peut qu'une ou plusieurs configurations, non autorisées par l'énergie de coupure E_0^*, soient absentes dans un groupe donné. Une telle situation constituera une source de brisure non physique de la symétrie d'isospin et sera donc à proscrire.

Pour cela, il suffira de construire la base $\mathcal{B}$ en terme de groupes dès le départ et de rejeter tout groupe incomplet à la construction. Cependant, le problème va se poser à nouveau avec le sous ensemble des doubles paires ou celui des triples paires ou de tout autre ordre d'excitation retenu pour la description de la fonction d'onde corrélée. Pour tout ordre d'excitation, il faut être capable de classer les configurations par groupes invariants d'isospin (dans la limite sans interaction coulombienne) afin de rejeter ceux qui sont incomplets à cause de l'existence d'une énergie de coupure E_0^*.

En pratique, nous avons étendu cette structure en groupes aux doubles et triples paires. Chaque groupe sera repéré par un jeu de niveaux de trous et de particules mis en jeu. Pour les doubles paires, l'excitation peut concerner de un à deux niveaux, pour les états de trous comme pour ceux de particules. Pour les triples paires, deux ou trois niveaux seront concernés pour les états de trous comme pour ceux

	N_h	N_p	Taille
SP	1	1	4
DP	1	1	1
	1	2	4
	2	1	4
	2	2	38
TP	2	2	4
	2	3	38
	3	2	38
	3	3	472

TABLEAU 5.1 – Taille des groupes d'excitations de simples paires (SP), doubles paires (DP) et triples paires (TP) en fonction des différentes situations possibles. Une situation donnée correspond à une certain nombre N_h de niveaux de trous impliqués dans l'excitation et un certain nombre N_p de niveaux de particules.

de particules. La taille de chaque groupe complet est donnée dans le tableau 5.1 suivant les différentes situations.

◦ APPROXIMATION DCA GÉNÉRALISÉE

Une fois les groupes d'états construits de façon à respecter la symétrie d'isospin, il est en principe possible de déterminer de façon générale la forme des *pseudo-vecteurs propres* de $\hat{\mathbf{T}}^2$ associés à chacun de ces groupes. Une méthode possible pour y parvenir est de construire un opérateur $\hat{\mathbf{T}}^2$ qui correspond à une situation de symétrie d'isospin conservée et de le diagonaliser dans chacun des groupes. On retient ensuite en mémoire la matrice de passage qui permet de passer des états de la base $\mathcal{B}$ à la base $\mathcal{B}_T$ généralisée. En présence d'interaction coulombienne, la symétrie est brisée et on obtient les poids de chaque *pseudo-vecteur propre* dans la fonction d'onde mélangée par application de la matrice de passage.

Il est donc en principe possible d'appliquer l'approximation DCA à tous les ordres d'excitation pris en compte. En pratique cette extension a été réalisée pour les doubles paires. Compte tenu de la taille grandissante des groupes (il s'avère que le groupe comprenant 38 états joue un rôle important parmi les doubles paires), une analyse semi-numérique s'impose pour estimer le mélange d'isospin. On pourra en effet tenter de reproduire le mélange α^2 par cette approche mais difficilement réussir à l'expliquer en lien avec la structure en doubles paires de la fonction d'onde comme on peut le faire avec les simples paires.

On pourra ainsi estimer la contribution globale des doubles paires dans le mélange d'isospin de la fonction d'onde mais on ne pourra pas prédire quelles configurations sont principalement en jeu. D'après l'étude du chapitre 3, on sait toutefois qu'il s'agira de configurations dont l'ordre d'excitation des neutrons est $\nu = 1$, 2 et 3 équitablement partagées lorsque le canal T = 1 de l'interaction résiduelle $\hat{V}_\delta$ domine et des configurations $\nu = 2$ uniquement si le canal T = 0 de $\hat{V}_\delta$ domine.

Chapitre 6

Mélange d'isospin dans les noyaux $N = Z$

Contenu du chapitre

Introduction

6.1 Aspects numériques

6.2 Mélange d'isospin dans le vide $|\Phi_0\rangle$

6.2.1 Évolution en fonction Z

6.2.2 Impact du traitement de l'interaction de Coulomb

6.3 Influence des corrélations d'appariement sur α^2

6.3.1 Structure des fonctions d'onde corrélées

6.3.2 Mélange d'isospin des fonctions d'onde corrélées

- Rôle de la composante $T_0 + 2$
- Apport des corrélations d'appariement au mélange d'isospin
- Influence du traitement de l'interaction de Coulomb

6.4 Interprétation des résultats avec la DCA

6.4.1 Contribution des différents ordres d'excitation

6.4.2 Détail des simples paires

6.4.3 Impact du traitement de l'interaction coulombienne

Introduction

Dans ce chapitre, nous allons présenter la principale étude réalisée dans ce travail de thèse. Celle-ci porte sur l'évaluation du mélange d'isospin dans les états fondamentaux de noyaux $N = Z$ et l'étude du rôle des corrélations d'appariement, traitées avec la force $\hat{V}_\delta$ dans l'approche HTDA, dans ce mélange d'isospin.

Lors de cette étude, nous nous sommes intéressés aux états fondamentaux des noyaux suivants : le ^{28}Si, le ^{48}Cr, le ^{68}Se (pour ce noyau, nous avons considéré ses minima oblate et prolate) et enfin le ^{76}Sr. L'analyse en isospin des fonctions d'onde corrélées HTDA est réalisée au moyen des outils présentés dans le chapitre 4 où l'on a considéré le développement (4.43) de ces fonctions d'onde sur des états de bon isospin allant jusqu'à l'ordre $T_0 + 2$. Une interprétation des mécanismes par lesquels les corrélations d'appariement véhiculent la brisure de la symétrie d'isospin causée par l'interaction coulombienne est donnée au moyen de l'approximation DCA développée au chapitre 5 et des formules perturbatives établies dans ce même chapitre.

Dans une première partie, nous présenterons les conditions numériques de calcul. Puis nous discuterons brièvement du mélange d'isospin dans les solutions de champ moyen constituant le point de

	b	q	E_0^* (MeV)
$^{28}\mathrm{Si}^{(o)}$	0.635	0.920	40.506
$^{48}\mathrm{Cr}^{(p)}$	0.560	1.150	33.845
$^{68}\mathrm{Se}^{(o)}$	0.490	0.845	30.135
$^{68}\mathrm{Se}^{(p)}$	0.560	1.150	30.135
$^{76}\mathrm{Sr}^{(p)}$	0.480	1.330	29.038

TABLEAU 6.1 – Valeurs de quelques paramètres numériques pour les différents noyaux considérés. Les paramètres b et q sont les paramètres de taille et de déformation respectivement de la base B.O.H.S.A. (voir annexe C). L'énergie E_0^* est l'énergie de coupure pour la troncation de l'espace à N corps.

départ des calculs HTDA. Enfin, nous présenterons et interpréterons les résultats concernant le mélange d'isospin des solutions corrélées obtenues avec HTDA.

6.1 Aspects numériques

Les déterminants de Slater $|\Phi_0\rangle$ servant de base aux calculs HTDA sont obtenus à partir de calculs HF+BCS avec l'interaction phénoménologique de Skyrme SIII dans le canal particule-trou et une force de séniorité G dans le canal particule-particule dont l'intensité dépend du nombre de neutrons et de protons (désignés de façon générique par N_q) comme

$$G^{(q)} = \frac{G_0^{(q)}}{11 + N_q} \qquad \text{avec} \qquad G_0^{(n)} = G_0^{(p)} = -17.7 \text{ MeV} . \tag{6.1}$$

Tous les états dont l'énergie est inférieure à 6 MeV au-dessus du potentiel chimique λ sont pris en compte dans ce premier traitement des corrélations d'appariement. La contribution des états situés au bord de cette fenêtre est pondérée par une fonction de Fermi dont la diffusivité est de 0.2 MeV.

Les états individuels sont décomposés dans une base d'oscillateur harmonique à symétrie axiale (la B.O.H.S.A. décrite dans l'annexe C) où l'on a pris en compte 11 couches majeures. Les paramètres de base b et q sont optimisés pour chaque noyau et sont listés dans le tableau 6.1.

Pour les calculs HTDA, l'espace de configuration est limité par une énergie de coupure sur l'énergie d'excitation de quasi-particule de $E_0^* = 3\hbar\omega = 3 \times 41A^{-1/3}$. La valeur de ces énergies de coupure est donnée dans le tableau 6.1.

Nous tenons compte, dans notre modèle, des excitations de simples (SP), doubles (DP) et triples (TP) paires sur le quasi-vide $|\Phi_0\rangle$.

6.2 Mélange d'isospin dans le vide $|\Phi_0\rangle$

Le mélange d'isospin dans l'état de champ moyen $|\Phi_0\rangle$, noté α_0^2, est obtenu en calculant la probabilité d'isospin de la composante dominante donnée par les formules générales (4.38). Pour tous les noyaux considérés ici (noyaux pairs-pairs $N = Z$ dans leur état fondamental) la composante dominante d'isospin est $\mathrm{T}_d = \mathrm{T}_0 = 0$. Ainsi, α_0^2 vaut simplement,

$$\alpha_0^2 = -\sum_{j=1}^{\mathcal{N}} \Gamma_{0j} \langle \Phi_0 | \hat{\mathbf{T}}^{2j} | \Phi_0 \rangle , \tag{6.2}$$

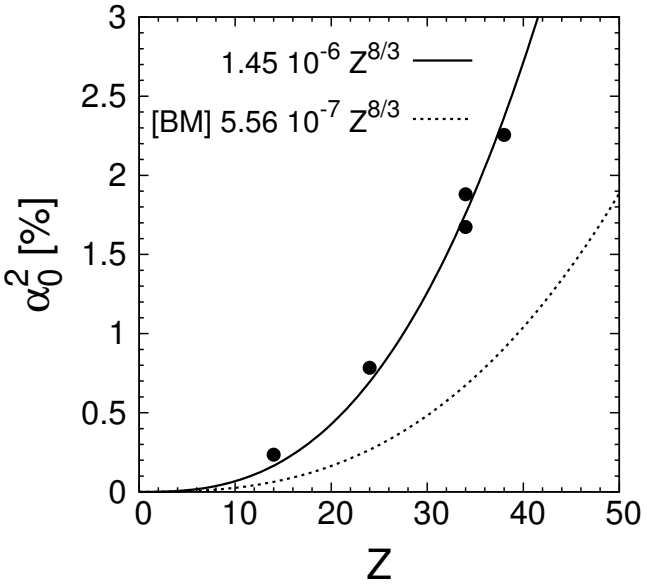


FIGURE 6.1 – Évolution en fonction du nombre Z de protons du mélange d'isospin dans $|\Phi_0\rangle$. Le terme d'échange de l'interaction coulombienne est traité exactement dans HF+BCS et on tient compte de la composante T_0+2. La tendance générale en $Z^{8/3}$ est mise en évidence par la courbe en trait plein. Le résultat de l'approche hydrodynamique de Å. Bohr, J. Damgård et B. R. Mottelson [63], donné en (6.4), est représentée par la courbe en traits pointillés dans le cas $N = Z$.

où le signe de Γ_{0j} est $(-)^j$. Pour un état $|\Phi_0\rangle$ avec $T_z = 0$ comme ici, on peut montrer, à partir de (4.63), que

$$\langle\Phi_0|\hat{\mathbf{T}}^{2j}|\Phi_0\rangle = \sum_{\ell=0}^{j} C_{j\ell}\langle\Phi_0|\hat{T}_-^{\ell}\hat{T}_+^{\ell}|\Phi_0\rangle\,, \tag{6.3}$$

où les coeficients $C_{j\ell}$ sont des entiers positifs, définis par l'action de $P_{j\ell}(\hat{T}_z)$ (voir l'annexe D.1) sur un état $T_z = 0$.

6.2.1 Évolution en fonction Z

Les premières estimations de mélange d'isospin dans les noyaux atomiques remontent aux modèles macroscopiques. Parmi ces modèles, l'approche hydrodynamique de Å. Bohr, J. Damgård et B. R. Mottelson [63] consiste à quantifier les modes normaux associés à l'effet de polarisation, par le champ coulombien, d'une densité isovectorielle sphérique. Une telle approche permet d'établir l'expression suivante pour le mélange d'isospin.

$$\alpha^2 = 3.5 \times 10^{-7}\, Z^2\, A^{2/3}\,. \tag{6.4}$$

Ce résultat est tracé en traits pointillés sur la figure 6.1 dans le cas $N = Z$.

En 1993, des calculs de mélange d'isospin dans le cadre d'approches RPA [64] ont conduit à des résultats 2 à 4 fois plus grands que ceux donnés par l'expression (6.4). Nous avons voulu confronter nos résultats, obtenus avec HF+BCS, avec l'expression (6.4) afin de voir si l'allure en $Z^{8/3}$ ainsi prédite pour les noyaux $N = Z$ était reproduite ici.

Nous avons donc reporté sur la figure 6.1 les résultats que l'on a obtenus pour les solutions de champ moyen $|\Phi_0\rangle$ avec un traitement exact de l'interaction coulombienne et en tenant compte de la composante $T_0 + 2$. Un ajustement approché a permis d'établir une tendance générale du mélange d'isospin dans $|\Phi_0\rangle$ dont l'expression est

$$\alpha_0^2 \simeq 1.45 \times 10^{-6}\, Z^{8/3}\,. \tag{6.5}$$

On retrouve donc bien une tendance globale en $Z^{8/3}$ mais le facteur multiplicatif est 2.6 fois plus grand que celui de l'expression (6.4). Nous aboutissons donc à la même conclusion que celle des travaux de la référence [64].

Noyau	α_0^2 (%)	
	exact	Slater
$^{28}\mathrm{Si}^{(o)}$	0.235	0.239
$^{48}\mathrm{Cr}^{(p)}$	0.784	0.785
$^{68}\mathrm{Se}^{(o)}$	1.880	1.815
$^{68}\mathrm{Se}^{(p)}$	1.673	1.635
$^{76}\mathrm{Sr}^{(p)}$	2.255	2.227

TABLEAU 6.2 – Paramètre de mélange d'isospin α_0^2 (exprimé en %) dans le quasi-vide d'excitations particule-trou $|\Phi_0\rangle$. Le potentiel d'échange coulombien est traité exactement dans un cas et avec l'approximation de Slater dans l'autre.

6.2.2 Impact du traitement de l'interaction de Coulomb

Les valeurs moyennes (6.3) ne dépendent que des recouvrements des parties spatiales et de spin des états de neutron et de proton occupés dans $|\Phi_0\rangle$. On le voit clairement à l'ordre le plus bas dans le développement en isospin (4.43) pour lequel on obtient

$$\alpha_0^2 = \frac{1}{2}\langle\Phi_0|\hat{T}_-\hat{T}_+|\Phi_0\rangle = \frac{Z}{2} - \frac{1}{2}\sum_{n,p\in\Phi_0} |\langle\langle n|p\rangle\rangle|^2 \,. \tag{6.6}$$

En étudiant le mélange d'isospin dans l'état $|\Phi_0\rangle$ on va alors sonder les recouvrements des fonctions d'onde à un corps des neutrons et des protons. Le tableau 6.2 présente les résultats obtenus pour α_0^2 lors d'un traitement exact de l'interaction coulombienne dans HF+BCS ou approché grâce à l'approximation de Slater.

Comme on peut le déduire de ce tableau, les résultats obtenus dans les deux situations sont très proches et l'erreur relative associée à l'approximation de Slater n'excède pas 3.5%. Ce résultat montre clairement que les fonctions d'onde à un corps des protons sont très peu modifiées par le traitement approché du potentiel coulombien. En revanche, nous avions vu au chapitre 1 que les énergies individuelles des protons étaient modifiées d'un traitement à l'autre de ce potentiel de plusieurs centaines de keV. Bien que ce dernier effet soit sans conséquence pour le mélange d'isospin dans $|\Phi_0\rangle$, on s'attend à ce qu'il soit d'une importance capitale quant à la contribution des corrélations au niveau HTDA. En effet, l'énergie d'excitation particule-trou, qui va fortement dépendre du traitement de l'interaction coulombienne au niveau du champ moyen, joue un rôle majeur dans la physique de l'appariement dans HTDA.

6.3 Influence des corrélations d'appariement sur α^2

6.3.1 Structure des fonctions d'onde corrélées

Il est connu que dans un traitement HF+BCS ou HTDA appliqué aux corrélations d'appariement dans les noyaux pairs-pairs loin de la ligne $N = Z$, l'état fondamental est composé majoritairement par l'état HF plus des excitations de paires $\mathrm{T}_z = \pm 1$ (i.e. *nn* et *pp*). Pour les noyaux $N = Z$, on s'attend à ce que le pairing $\mathrm{T}_z = 0$ (paires *np*) joue un rôle important dans la description de l'état fondamental. C'est pourquoi nous allons considérer dans notre étude le canal T = 1 complet de l'interaction résiduelle $\hat{V}_\delta$ ainsi que le canal T = 0.

Avant de calculer le mélange d'isospin dans les fonctions d'onde corrélées HTDA de nos quatre noyaux, nous allons examiner la structure de ces fonctions d'onde en fonction de l'intensité de l'interaction résiduelle dans chacun des canaux d'isospin. La structure en ordre d'excitation de ces fonctions d'onde est présentée sur la figure 6.2. Toutes les excitations de simples (SP), doubles (DP) et triples paires

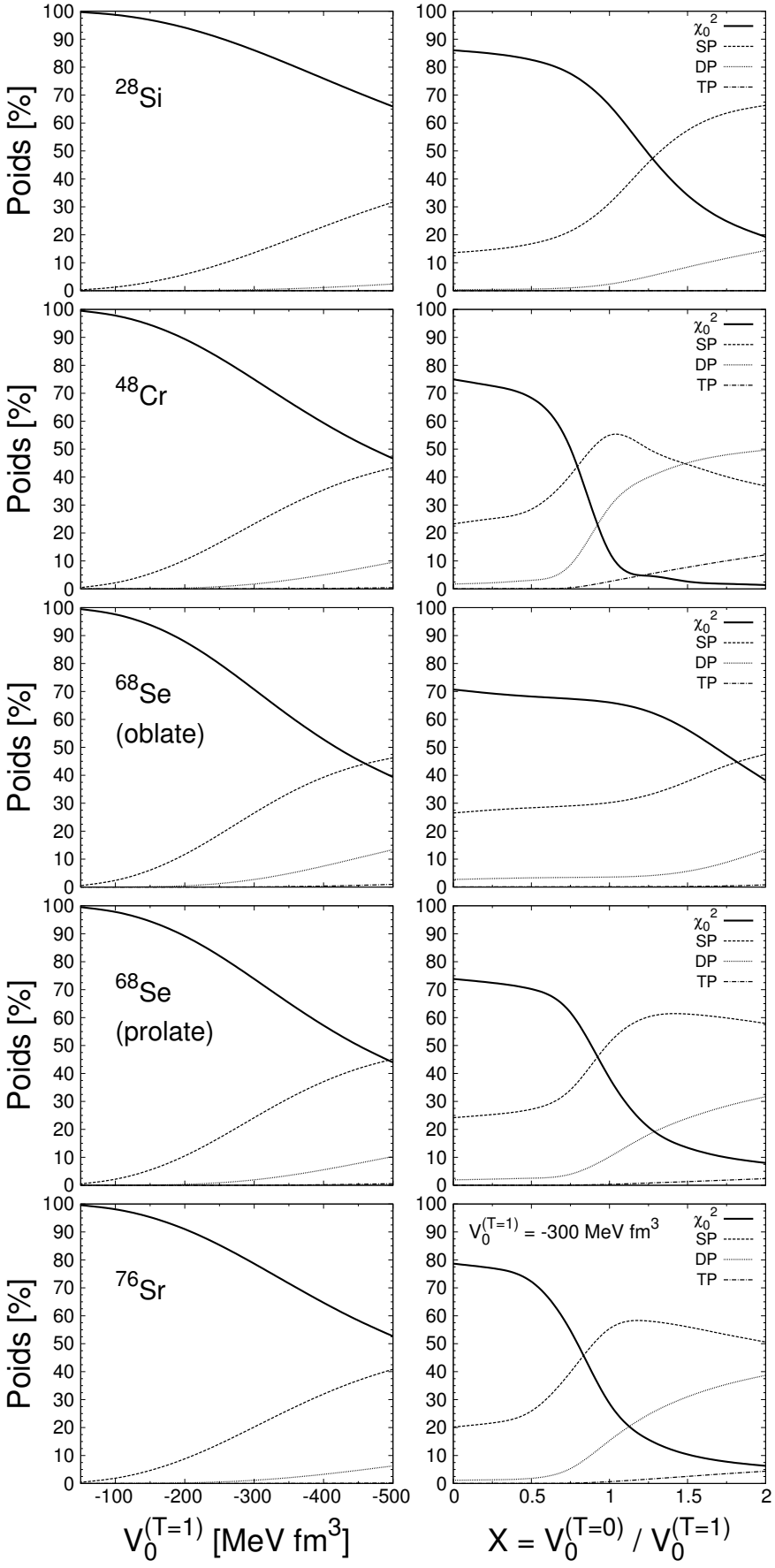


FIGURE 6.2 – Évolution de la structure des fonctions d'onde corrélées en simples paires (SP), doubles paires (DP) et triples paires (TP), en fonction de l'intensité de l'interaction $\hat{V}_\delta$ dans les deux canaux d'isospin : à gauche, en fonction de $V_0^{(\mathrm{T=1})}$ pour $X = 0$; à droite, en fonction de X pour $V_0^{(\mathrm{T=1})} = -300$ MeV fm^3.

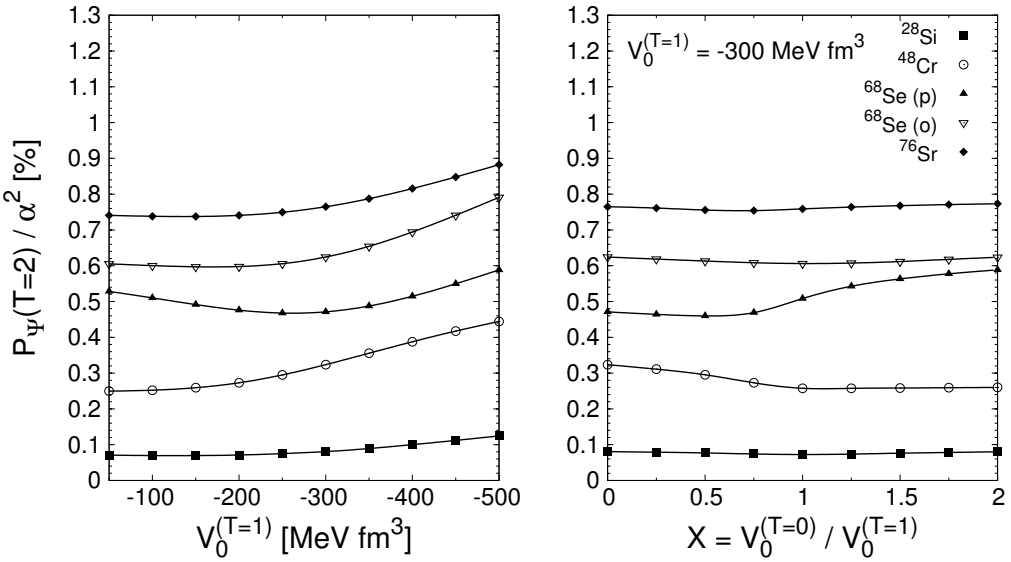


FIGURE 6.3 – Contribution relative de la probabilité $P_\Psi(2)$ au mélange d'isospin α^2 en fonction de l'intensité de l'interaction résiduelle $\hat{V}_\delta$ dans le canal T = 1 à gauche et T = 0 à droite et pour les différents noyaux considérés.

(TP) autorisées par une énergie de coupure $E_0^* = 3\hbar\omega$ sont prises en compte dans le modèle.

Les observations faites au chapitre 3 concernant le ^{48}Cr semblent se généraliser ici à l'ensemble des noyaux considérés. En fonction de l'intensité de $\hat{V}_\delta$ dans le canal T = 1, le poids de tous les ordres d'excitation augmente et le taux de corrélation atteint entre 35 et 55% pour une intensité $|V_0^{(\mathrm{T}=1)}| = 500$ MeV fm^3. Comme on l'a vu au chapitre 3, bien que le poids des excitations TP soit toujours négligeable dans la fonction d'onde corrélée, la présence de ces excitations permet d'obtenir un poids pour les DP convergé au pourcent.

En fonction de l'intensité de $\hat{V}_\delta$ dans le canal T = 0, il existe toujours un seuil au-delà duquel les excitations SP vont dominer la structure de la fonction d'onde corrélée. La position de ce seuil en X varie d'un noyau à l'autre, ce qui montre qu'elle est fortement dépendante de l'allure du spectre des états individuels dans le champ moyen de départ (obtenu avec HF+BCS). Ce seuil correspond également à l'apparition des excitations TP. À l'exception du ^{28}Si et du ^{68}Se dans sa solution oblate, les excitations SP saturent ensuite à un maximum d'environ 60% puis diminuent au profit des DP. On peut supposer qu'il en est de même pour le ^{28}Si et le ^{68}Se oblate mais à plus fortes valeurs de X.

En complément de ces résultats, on peut également garder en tête ceux du chapitre 3 concernant l'analyse détaillée en isospin de chaque composante SP, DP et TP en fonction des intensités $V_0^{(\mathrm{T}=1)}$ et $V_0^{(\mathrm{T}=0)}$. Le cas unique du ^{48}Cr avait été abordé mais il est tout à fait représentatif de ce qui se passe ici pour les autres noyaux.

6.3.2 Mélange d'isospin des fonctions d'onde corrélées

◦ RÔLE DE LA COMPOSANTE $\mathrm{T}_0 + 2$

Afin de tester l'importance relative de la composante $\mathrm{T}_0 + 2$ dans le calcul du mélange d'isospin, une troncation à l'ordre $\mathrm{T}_0 + 1$ a également été considérée pour les 4 noyaux étudiés (5 cas différents au total). Ces résultats sont présentés sur les figures 6.3 et 6.4.

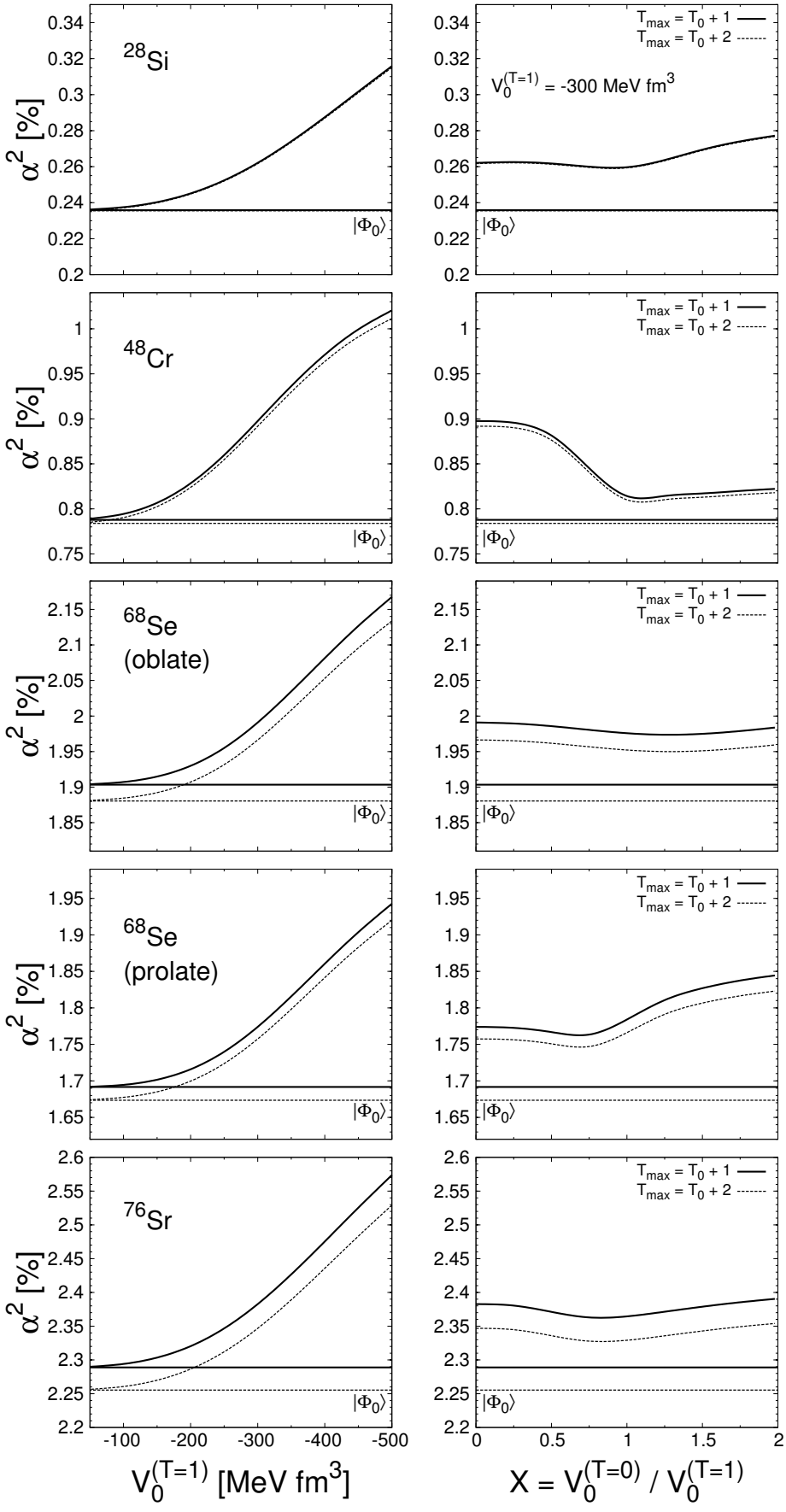


FIGURE 6.4 – Évolution du mélange d'isospin des fonctions d'onde corrélées en fonction de l'intensité de l'interaction $\hat{V}_\delta$ dans les deux canaux d'isospin : à gauche, en fonction de $V_0^{(\mathrm{T=1})}$ pour $X = 0$; à droite, en fonction de $X = V_0^{(\mathrm{T=0})}/V_0^{(\mathrm{T=1})}$ pour $V_0^{(\mathrm{T=1})} = -300$ MeV fm^3. Le calcul du mélange d'isospin est effectué en tronquant le développement (4.43) à l'ordre $\mathrm{T}_0 + 1$ (en traits pleins) et $\mathrm{T}_0 + 2$ (en traits pointillés). La valeur obtenue en l'absence de corrélations (i.e. dans la solution $|\Phi_0\rangle$) est rappelée par des lignes horizontales pour chaque ordre de troncation.

Sur la figure 6.4 on a tracé le mélange d'isospin α^2 obtenu avec les deux ordres de troncation pour l'ensemble des noyaux considérés. Les lignes en traits pleins correspondent à l'ordre de troncation le plus bas en isospin dans l'expression (4.43) tandis que l'ordre $\mathrm{T}_0 + 2$ correspond aux courbes en traits pointillés. À chaque fois, la valeur obtenue en l'absence de corrélation, dans la solution $|\Phi_0\rangle$, est indiquée par des lignes horizontales. On peut remarquer que la contribution de la composante $\mathrm{T}_0 + 2$ des fonctions d'onde corrélées est relativement indépendante de l'intensité de l'interaction résiduelle dans les deux canaux d'isospin. De plus, bien que très faible par rapport à $P_\Psi(1)$, la probabilité $P_\Psi(2)$ croît rapidement avec Z.

Ces deux caractéristiques de la distribution d'isospin dans les fonctions d'onde corrélées sont mises davantage en valeur sur la figure 6.3 où l'on a reporté la contribution relative de la probabilité $P_\Psi(2)$ au mélange d'isospin

$$\frac{P_\Psi(2)}{P_\Psi(1) + P_\Psi(2)} = \frac{P_\Psi(2)}{\alpha^2} \,. \tag{6.7}$$

Entre le ^{28}Si ($Z = 14$) et le ^{76}Sr ($Z = 38$), cette contribution de $P_\Psi(2)$ au mélange d'isospin augmente d'un ordre de grandeur.

Toutefois, compte tenu de la faible contribution de $P_\Psi(2)$ au mélange d'isospin et de son indépendance vis-à-vis de l'intensité de l'interaction $\hat{V}_\delta$, nous poursuivrons le reste de notre étude en évaluant le paramètre α^2 à l'ordre le plus bas en isospin, soit pour $\mathrm{T}_0 + 1$.

◦ Apport des corrélations d'appariement au mélange d'isospin

D'autres observations concernant le mélange d'isospin lui-même, peuvent être faites à partir de la figure 6.4. Le paramètre α^2 présente tout d'abord une sensibilité différente aux deux canaux de l'interaction résiduelle $\hat{V}_\delta$. Il est en effet beaucoup plus sensible au canal $\mathrm{T} = 1$ qu'au canal $\mathrm{T} = 0$. En fonction de l'intensité $V_0^{(\mathrm{T}=1)}$, le paramètre de mélange α^2 augmente rapidement. En revanche, en fonction de X, il évolue beaucoup moins vite. Cette évolution n'est d'ailleurs plus monotone et α^2 a parfois même tendance à diminuer.

La contribution des corrélations d'appariement (au-delà de la solution du vide $|\Phi_0\rangle$) au mélange

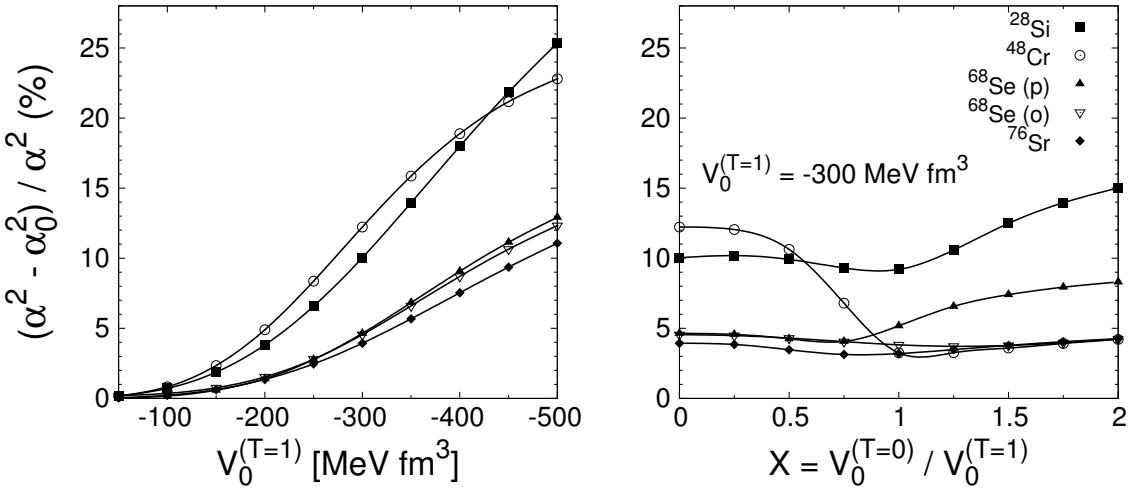


Figure 6.5 – Contribution relative des corrélations d'appariement dans HTDA au mélange d'isospin α^2 calculé en tenant compte de la composante $\mathrm{T}_0 + 1$ seule en fonction de l'intensité de l'interaction résiduelle $\hat{V}_\delta$ dans le canal $\mathrm{T} = 1$ à gauche et $\mathrm{T} = 0$ à droite pour les différents noyaux considérés.

d'isospin peut être caractérisée par la quantité

$$\frac{\alpha^2 - \alpha_0^2}{\alpha^2} \,. \tag{6.8}$$

Sur la figure 6.5, nous avons reporté les valeurs de cette quantité en fonction des intensités de $\hat{V}_\delta$ dans les deux canaux. Pour $|V_0^{(\mathrm{T}=1)}| = 500$ MeV fm^3 et $X = 0$, les corrélations d'appariement dans HTDA contribuent au mélange d'isospin total à hauteur de 10% à 25%. On remarque également que cette contribution des corrélations d'appariement dans le canal T = 1 diminue avec la masse (25% pour le ^{28}Si et 10% pour le ^{76}Sr).

Comme on l'avait vu sur la figure 6.4, le mélange d'isospin α^2 varie beaucoup moins en fonction de l'intensité de $\hat{V}_\delta$ dans le canal T = 0 (la valeur typique de $V_0^{(\mathrm{T}=1)} = -300$ MeV fm^3 pour la colonne de droite de la figure 6.4 ayant été prise à titre d'exemple). En fonction de ce canal, la part de mélange provenant des corrélations d'appariement au-delà de la valeur pour le vide $|\Phi_0\rangle$ s'élève au maximum à 15%.

Contrairement à la situation où seul le canal T = 1 est présent, aucune tendance générale n'apparaît clairement sur le panneau droit de la figure 6.5 pour l'ensemble des noyaux. Les variations de α^2 avec X présentent une complexité importante que l'on tentera de comprendre avec les outils de la DCA.

◦ Influence du traitement de l'interaction de Coulomb

Avant d'interpréter les résultats précédents, nous allons nous intéresser à l'impact du traitement de l'interaction coulombienne, aussi bien au niveau du champ moyen que de l'interaction résiduelle dans HTDA, sur le mélange d'isospin α^2. Sur la figure 6.6 on présente le calcul du paramètre α^2 pour chacun des noyaux considérés en tenant compte de la composante $\mathrm{T}_0 + 1$ seule. Le calcul est réalisé dans trois situations différentes correspondant à un traitement particulier de l'interaction coulombienne :

- **Situation (1) :** Le potentiel d'échange coulombien dans HF+BCS est calculé exactement. De plus, on ne tient pas compte de l'interaction coulombienne résiduelle dans HTDA.
- **Situation (2) :** Le potentiel d'échange coulombien est calculé avec l'approximation de Slater. Là encore, on ne tient pas compte de l'interaction coulombienne résiduelle dans HTDA.
- **Situation (3) :** Comme dans la situation (1), le potentiel d'échange coulombien dans HF+BCS est calculé exactement. Cependant on tient compte de l'interaction coulombienne résiduelle dans HTDA. Toutefois, la force de Coulomb est prise telle quelle et aucune procédure de renormalisation n'est appliquée pour l'adapter à notre espace de configuration.

Tout d'abord, l'utilisation de l'approximation de Slater pour calculer le potentiel d'échange coulombien au niveau de la solution de champ moyen conduit de façon générale à un mélange d'isospin plus faible dans HTDA que lorsque ce potentiel est traité exactement. La différence obtenue entre les situations (1) et (2) augmente fortement avec l'intensité du canal T = 1 de l'interaction $\hat{V}_\delta$. Au contraire cette différence diminue avec l'intensité dans l'autre canal d'isospin. Pour le ^{48}Cr, qui présente un comportement extrême, cette différence semble même tendre vers 0 avec $V_0^{(\mathrm{T}=0)}$. Les valeurs de α^2 obtenues pour $X = 0$ et $V_0^{(\mathrm{T}=1)} = -50$ MeV fm^3 dans les situations (1) et (2) correspondent pratiquement à celles de α_0^2 listées dans le tableau 6.2. Évidemment, cette valeur limite de α_0^2 est la même dans les situations (1) et (3).

De façon générale, à l'exception toutefois du ^{28}Si, la présence d'un canal résiduel de l'interaction coulombienne dans HTDA se traduit par une augmentation du mélange d'isospin. Compte tenu de l'échelle en α^2 qui est dilatée par un facteur 3 pour le ^{28}Si par rapport au ^{48}Cr, on peut considérer que la différence entre les situations (1) et (3) est négligeable en première approximation.

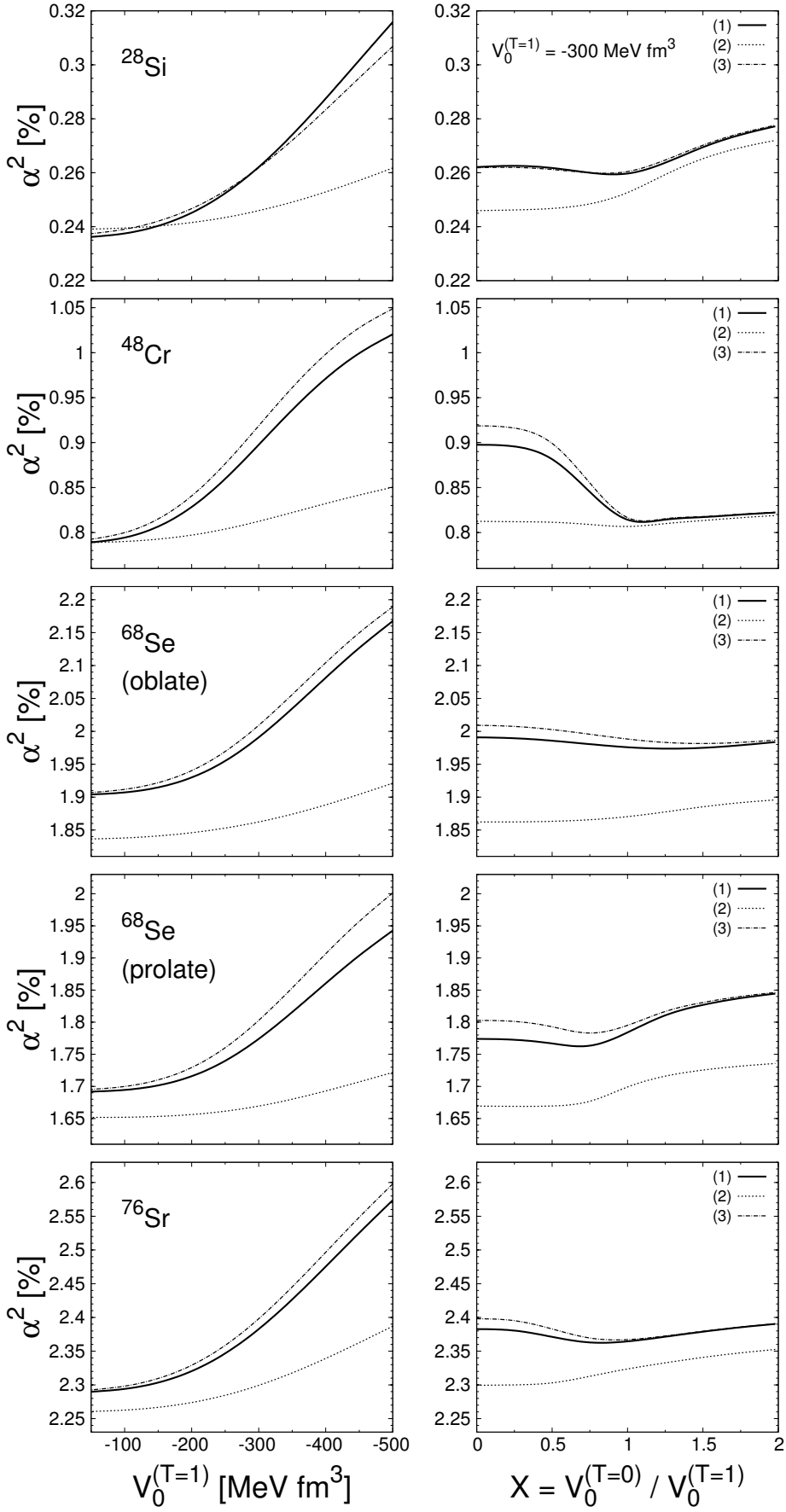


FIGURE 6.6 – Évolution du mélange d'isospin des fonctions d'onde corrélées en fonction de l'intensité de l'interaction $\hat{V}_\delta$ dans les deux canaux d'isospin : à gauche, en fonction de $V_0^{(\mathrm{T=1})}$ pour $X = 0$; à droite, en fonction de X pour $V_0^{(\mathrm{T=1})} = -300$ MeV fm^3. Le calcul du paramètre α^2 est effectué dans les trois situations suivantes :

(1) Le potentiel d'échange coulombien dans HF+BCS est calculé exactement, on ne tient pas compte de l'interaction coulombienne résiduelle dans HTDA,
(2) Le potentiel d'échange coulombien est calculé avec l'approximation de Slater, on ne tient pas compte de l'interaction coulombienne résiduelle dans HTDA,
(3) Le potentiel d'échange coulombien dans HF+BCS est calculé exactement et on tient compte de l'interaction coulombienne résiduelle dans HTDA.

Cet effet d'augmentation de α^2 en présence de l'interaction coulombienne résiduelle varie en fonction des différents canaux de $\hat{V}_\delta$ de façon opposée. L'écart entre le mélange d'isospin calculé dans les situations (1) et (3) augmente en effet avec $V_0^{(\mathrm{T}=1)}$ tandis qu'il diminue rapidement en fonction de $V_0^{(\mathrm{T}=0)}$ à partir de $X \sim 1$.

6.4 Interprétation des résultats avec la DCA

Dans ce dernier paragraphe, nous allons tester la qualité de l'approximation DCA présentée au chapitre 5. Nous verrons que cette approximation est très bonne. Dans un deuxième temps, nous allons donc interpréter les résultats précédents concernant le mélange d'isospin obtenus dans HTDA. De façon générale, les variations du mélange d'isospin α^2 en fonction de l'intensité de $\hat{V}_\delta$ dans ses deux canaux sont bien reproduites lorsqu'on ne retient que les composantes T_0 et $\mathrm{T}_0 + 1$ dans les fonctions d'onde corrélées. L'analyse que nous ferons avec la DCA sera par conséquent basée sur cet ordre de troncation. De plus, elle ne sera considérée que pour les simples paires et les doubles paires.

6.4.1 Contribution des différents ordres d'excitation

Dans le cadre de l'approximation DCA, on change de base pour passer des excitations particule-trou $|\Phi_i\rangle$ aux *pseudo-vecteurs propres* de $\hat{\mathbf{T}}^2$ notés $|\Psi_{\mathrm{T},i}\rangle$. On suppose ensuite que l'opérateur $\hat{\mathbf{T}}^2$ (ainsi que toutes ses puissances) sont diagonaux dans cette nouvelle base, même en présence d'interaction coulombienne. En incluant toutes les excitations appariées jusqu'aux triples paires dans notre modèle, le mélange d'isospin approché (5.28) devient

$$\alpha^2 \approx \alpha_0^2 + C_{\mathrm{SP}} + C_{\mathrm{DP}} + C_{\mathrm{TP}} \,, \tag{6.9}$$

où, C_{SP}, C_{DP} et C_{TP} représentent les contributions des *pseudo-vecteurs propres* de $\hat{\mathbf{T}}^2$ construits parmi les excitations de simples, doubles et triples paires.

Sur la figure 6.7, on a tracé la contribution des simples et doubles paires au mélange d'isospin. La somme de ces deux contributions est notée « (1) + (2) » sur cette figure. Elle est comparée à la quantité $\alpha^2 - \alpha_0^2$ (cercles) qui mesure l'apport des corrélations d'appariement au-delà de $|\Phi_0\rangle$ au mélange d'isospin (voir la section précédente, en particulier la figure 6.5). Le mélange d'isospin total α^2 est obtenu à l'ordre $\mathrm{T}_0 + 1$. La différence entre ces deux calculs peut avoir deux origines, d'une part les termes non diagonaux de $\hat{\mathbf{T}}^2$ que l'on néglige dans la DCA et d'autre part, l'apport des triples paires qui ne sont pas prises en compte dans la DCA. Ces deux types de contributions ne sont pas définis positives (voir eq. (5.29)) et on peut parfois surestimer le mélange d'isospin avec la DCA.

De façon globale, on peut voir que l'approximation DCA est de très bonne qualité. En effet, dans toutes les situations où les excitations de triples paires sont négligeables (avec un poids inférieur à 1%), l'accord entre le calcul complet (cercles) et l'approximation DCA « (1) + (2) » est excellent. Ceci constitue un argument fort pour penser que les termes non diagonaux de $\hat{\mathbf{T}}^2$ dans la base de ces *pseudo-vecteurs propres* sont réellement négligeables. La valeur de ces termes non diagonaux étant indépendante de l'intensité de $\hat{V}_\delta$, on peut raisonnablement penser que tout écart perceptible entre ces deux calculs est uniquement dû à la contribution des triples paires.

Il est toutefois difficile de corréler la contribution au mélange d'isospin de ces excitations de triples paires avec leur poids dans la fonction d'onde car il faut également tenir compte de leur contenu en isospin (voir eq. (5.29)). Le seul cas qui présente un désaccord assez important entre les deux calculs est celui du ^{68}Se dans sa solution prolate en présence du canal $\mathrm{T} = 0$ de $\hat{V}_\delta$ pour $X \gtrsim 1$. Bien que les excitations de triples paires aient un poids modéré (il est de l'ordre de 2% pour $V_0^{(\mathrm{T}=1)} = -300$ MeV fm^3 et $X = 2$) leur contribution est significative du fait d'une importante différence des

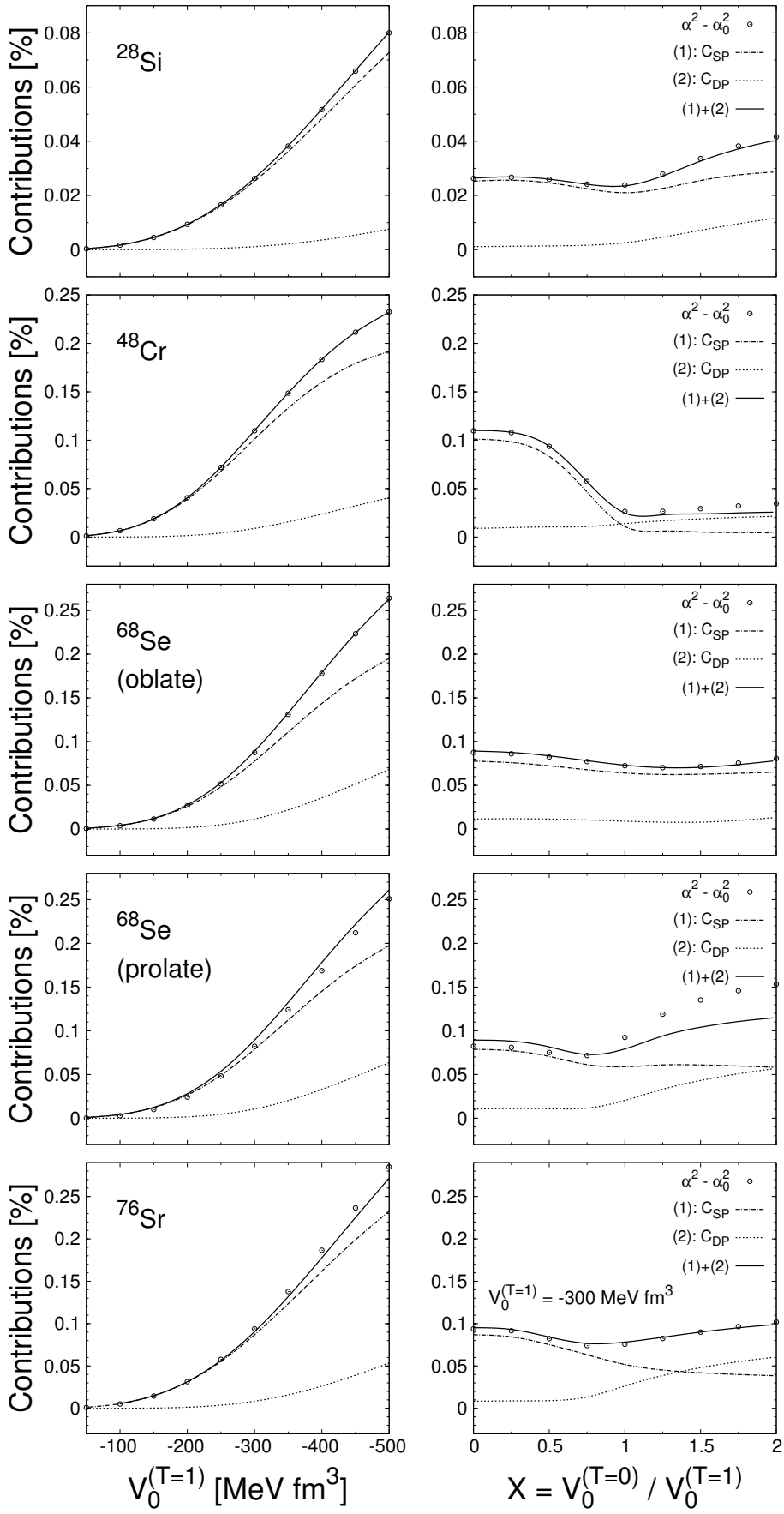


FIGURE 6.7 – Décomposition de la contribution $\alpha^2 - \alpha_0^2$ des corrélations d'appariement au-delà du champ moyen au mélange d'isospin dans l'état fondamental de chaque noyau en termes des contributions provenant des groupes de SP et de DP en fonction de $V_0^{(\mathrm{T=1})}$ (à gauche) et en fonction de X avec $V_0^{(\mathrm{T=1})} = -300$ MeV fm^3 (à droite).

probabilités $P^{(1)}_{\Phi_0}(0) - P^{(1)}_{\Psi_{\rm TP}}(0)$ (en supposant que cette différence de probabilités puisse se factoriser). Un exemple de mécanisme opposé est donné par le ^{48}Cr pour lequel les excitations de triples paires jouent un rôle important dans la fonction d'onde corrélée (voir fig. 6.2) alors que leur apport au mélange d'isospin est assez minime.

Maintenant que nous avons validé la qualité de l'approximation DCA, nous allons nous en servir pour discuter l'allure du mélange d'isospin α^2, ou, plus particulièrement, de l'apport des corrélations d'appariement à ce mélange, en fonction de l'intensité de l'interaction résiduelle $\hat{V}_\delta$ dans les deux canaux d'isospin.

En fonction de l'intensité de $\hat{V}_\delta$ dans le canal T = 1, on voit que cette contribution augmente de façon monotone. Elle est due en grande partie aux excitations de simples paires, les doubles paires apportant une contribution de près d'un ordre de grandeur plus faible.

En fonction du canal T = 0, nous avions déjà remarqué que la quantité $\alpha^2 - \alpha_0^2$ variait de façon plus complexe. On constate que la contribution des doubles paires est toujours croissante et, la plupart du temps, assez faible (avec une exception pour les deux noyaux en bas de la figure 6.7). Dans le détail ces allures dépendent du noyau considéré. Voici les quelques observations que l'on peut faire pour les cinq cas considérés ici.

- Pour le ^{28}Si, le léger affaiblissement à $X \sim 1$ est dû aux simples paires, les doubles paires ayant juste pour effet de renforcer le mélange au-delà de cette valeur.
- Pour le ^{48}Cr, la contribution des doubles paires est à peu près constante et l'allure est explicable là aussi par la contribution des simples paires.
- Pour le ^{68}Se dans sa solution oblate, chaque contribution est à peu près constante, les doubles paires contribuant pour un ordre de grandeur en-dessous des simples paires.
- Pour le ^{68}Se dans sa solution prolate, cette fois ce sont les simples paires qui ne varient pas beaucoup en comparaison des doubles paires et la remontée que l'on observe au-delà de $X \sim 1$ est due aux doubles paires ainsi qu'aux triples paires comme nous l'avons vu.
- Enfin, pour le ^{76}Sr, les contributions des simples paires et des doubles paires varient en sens opposés de sorte à pratiquement se compenser en fonction de X.

Ainsi, on voit que la variation du mélange d'isospin dans une fonction d'onde corrélée va dépendre du noyau considéré. La contribution des excitations de simples paires explique en bonne partie l'allure de ce mélange en fonction de l'intensité de $\hat{V}_\delta$ dans chacun des canaux d'isospin.

La question qui se pose alors est de savoir si malgré tout il n'existerait pas un mécanisme responsable de cette allure qui soit le même dans tous les cas considérés ici. Pour répondre à cette question, nous allons analyser plus en détail la contribution des simples paires.

6.4.2 Détail des simples paires

Afin d'analyser la contribution des excitations de simples paires au mélange d'isospin total, nous allons utiliser le fait que, pour cette classe d'excitations particule-trou, les *pseudo-vecteurs propres* de $\hat{\mathbf{T}}^2$ sont peu nombreux et peuvent être facilement explicités (voir la section 5.2.1). En effet, pour un groupe d'excitations de simples paires donné (au sens de la DCA) on peut former quatre *pseudo-vecteurs propres* de $\hat{\mathbf{T}}^2$: deux associés à la valeur T = 0, un associé à T = 1 et un état associé à la valeur T = 2. Rappelons leurs expressions :

$$|\Psi_0^{(1)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\widetilde{\Phi_{11}}\rangle + |\widetilde{\Phi'_{11}}\rangle\right), \qquad |\Psi_0^{(2)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\Big(|\Phi_{02}\rangle + |\Phi_{20}\rangle\Big) + \frac{1}{\sqrt{6}}\left(|\widetilde{\Phi_{11}}\rangle - |\widetilde{\Phi'_{11}}\rangle\right),$$
$$|\Psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|\Phi_{02}\rangle - |\Phi_{20}\rangle\Big), \qquad |\Psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}\Big(|\Phi_{02}\rangle + |\Phi_{20}\rangle\Big) - \frac{1}{\sqrt{3}}\left(|\widetilde{\Phi_{11}}\rangle - |\widetilde{\Phi'_{11}}\rangle\right).$$

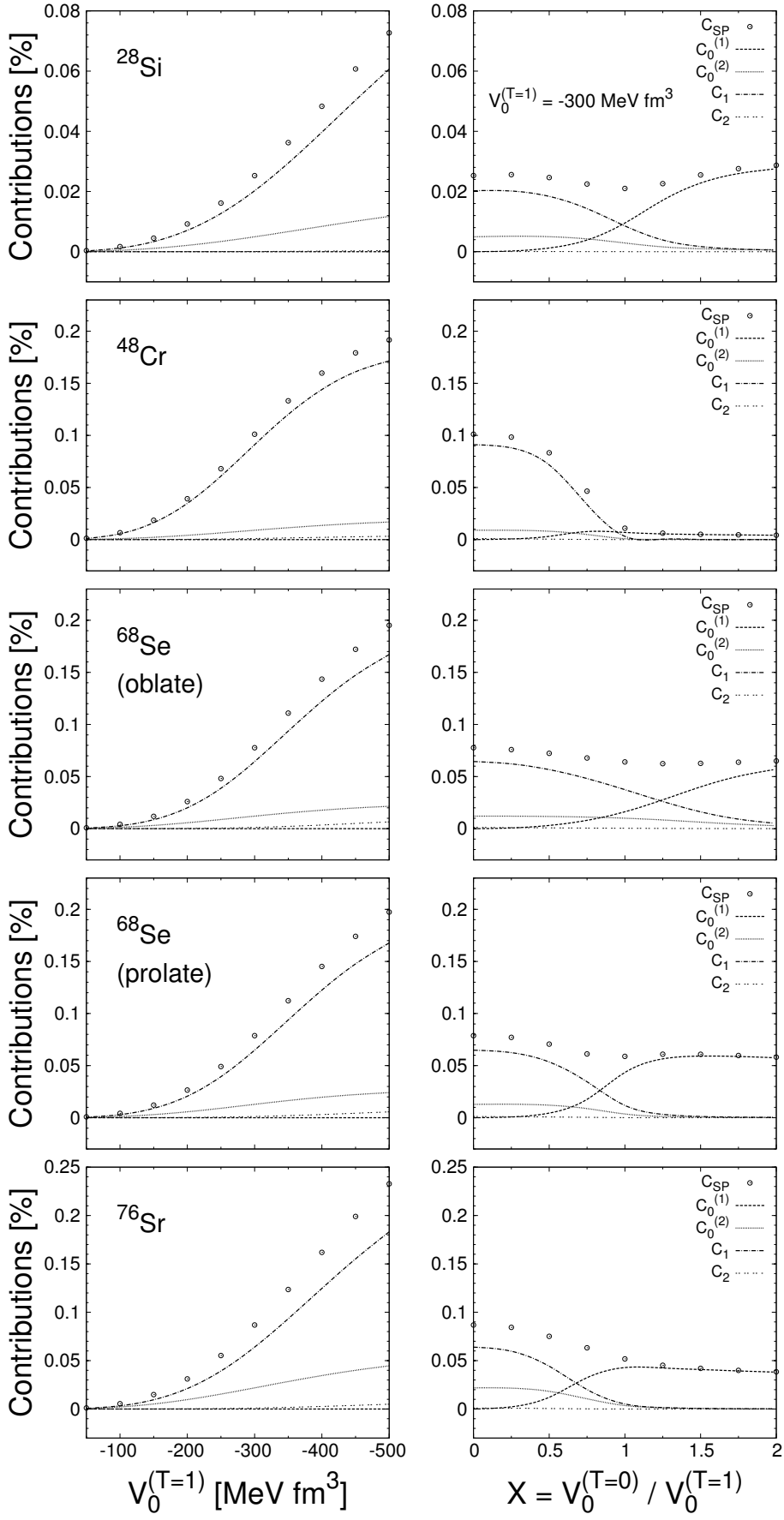


FIGURE 6.8 – Détail de la contribution C_{SP} des excitations SP décomposée en termes de celle de chaque *pseudo-vecteur propre* de $\hat{\mathbf{T}}^2$ au paramètre de mélange d'isospin dans chaque fonction d'onde fondamentale en fonction de $V_0^{(\mathrm{T=1})}$ (à gauche) et en fonction de X avec $V_0^{(\mathrm{T=1})} = -300$ MeV fm^3 (à droite). La contribution des simples paires C_{SP} est définie par la somme $C_{\mathrm{SP}} = C_0^{(1)} + C_0^{(2)} + C_1 + C_2$.

Les états $|\Phi_{02}\rangle$, $|\Phi_{20}\rangle$, $|\Phi_{11}\rangle$, $|\Phi'_{11}\rangle$ sont les excitations de simples paires décrites par la figure 5.1.

La figure 6.8 présente la contribution des différents types de *pseudo-vecteurs propres* ci-dessus au mélange d'isospin total. Pour un type de *pseudo-vecteur propre* donné, on a additionné la contribution de tous les groupes de simples paires en supposant qu'ils sont découplés (DCA). Ces contributions sont notées $C_0^{(1)}$, $C_0^{(2)}$, C_1 et C_2 en référence au nom des *pseudo-vecteurs propres* associés. La somme de ces quatre contributions donne C_{SP} par définition.

En fonction de l'intensité de l'interaction résiduelle $\hat{V}_\delta$ dans le canal T = 1, on peut remarquer que la contribution dominante vient des états de type $|\Psi_1\rangle$. Contribuent ensuite les états $|\Psi_0^{(2)}\rangle$ (un ordre de grandeur en-dessous) suivis des états de type $|\Psi_2\rangle$. Les états de type $|\Psi_0^{(1)}\rangle$ apportent toujours une contribution négligeable au mélange d'isospin.

En fonction de l'intensité du canal T = 0 de $\hat{V}_\delta$, on voit clairement deux mécanismes en compétition. Pour les faibles valeurs de X et à intensité $V_0^{(\mathrm{T}=1)}$ fixée, on retrouve naturellement la situation de chaque figure de gauche associée. La contribution dominante est celle de $|\Psi_1\rangle$ puis vient $|\Psi_0^{(2)}\rangle$ dans une moindre mesure et enfin $|\Psi_2\rangle$.

Puis, à mesure que X augmente, le canal T = 0 devient de plus en plus important par rapport au canal T = 1. La contribution des états de type $|\Psi_1\rangle$ et $|\Psi_0^{(2)}\rangle$ diminue progressivement au profit des états de type $|\Psi_0^{(1)}\rangle$. Cette évolution est générale même si elle est moins marquée pour le ^{48}Cr. Enfin, en présence de canal T = 0, la contribution des états de type $|\Psi_2\rangle$ reste toujours négligeable.

À forte valeur de X, il ne reste plus que la contribution des états de type $|\Psi_0^{(1)}\rangle$ sauf pour le ^{68}Se dans sa solution oblate où la contribution des états de type $|\Psi_1\rangle$ et $|\Psi_0^{(2)}\rangle$ n'a pas encore complètement disparu.

Dans les cas considérés, l'allure globale de la contribution des excitations de simples paires au mélange d'isospin résulte donc d'un changement de régime au cours duquel les états de type $|\Psi_1\rangle$ et $|\Psi_0^{(2)}\rangle$ passent le relais aux états de type $|\Psi_0^{(1)}\rangle$. Dans le cas particulier du ^{48}Cr, ce relais ne se fait pas de façon efficace, les états de type $|\Psi_0^{(2)}\rangle$ n'apportant que très peu de mélange. Nous savons que pour apporter une contribution sensible au mélange d'isospin total, un état $|\Psi\rangle$ donné doit avoir un poids suffisant dans la foncion d'onde corrélée et une composante T = 0 qui diffère suffisamment de celle dans $|\Phi_0\rangle$, de sorte à maximiser le produit du poids et de $P_{\Phi_0}(0) - P_\Psi(0)$. Pour comprendre le rôle de chaque facteur sur cette contribution, nous allons supposer que les différences de probabilités d'isospin $P_{\Phi_0}(0) - P_\Psi(0)$ sont les mêmes pour tous les *pseudo-vecteurs propres* de $\hat{\mathbf{T}}^2$ d'un type donné. Ainsi, on supposera que les contributions tracées sur la figure 6.8 peuvent s'écrire comme

$$C_0^{(1)} \approx \Delta P_0^{(1)} \sum_i \left|a_{0,i}^{(1)}\right|^2 \quad ; \qquad C_0^{(2)} \approx \Delta P_0^{(2)} \sum_i \left|a_{0,i}^{(2)}\right|^2$$
$$C_1 \approx \Delta P_1 \sum_i |a_{1,i}|^2 \quad ; \qquad C_2 \approx \Delta P_2 \sum_i |a_{2,i}|^2 \ ,$$

où les termes $\Delta P_{\mathrm{T}}^{(i)}$ sont donnés par

$$\Delta P_0^{(1)} = P_{\Phi_0}(\mathrm{T}=0) - P_{\Psi_0^{(1)}}(\mathrm{T}=0) \quad \forall\, |\Psi_0^{(1)}\rangle \tag{6.10}$$
$$\Delta P_0^{(2)} = P_{\Phi_0}(\mathrm{T}=0) - P_{\Psi_0^{(2)}}(\mathrm{T}=0) \quad \forall\, |\Psi_0^{(2)}\rangle \tag{6.11}$$
$$\Delta P_1 = P_{\Phi_0}(\mathrm{T}=0) - P_{\Psi_1}(\mathrm{T}=0) \quad \forall\, |\Psi_1\rangle \tag{6.12}$$
$$\Delta P_2 = P_{\Phi_0}(\mathrm{T}=0) - P_{\Psi_2}(\mathrm{T}=0) \quad \forall\, |\Psi_2\rangle \ . \tag{6.13}$$

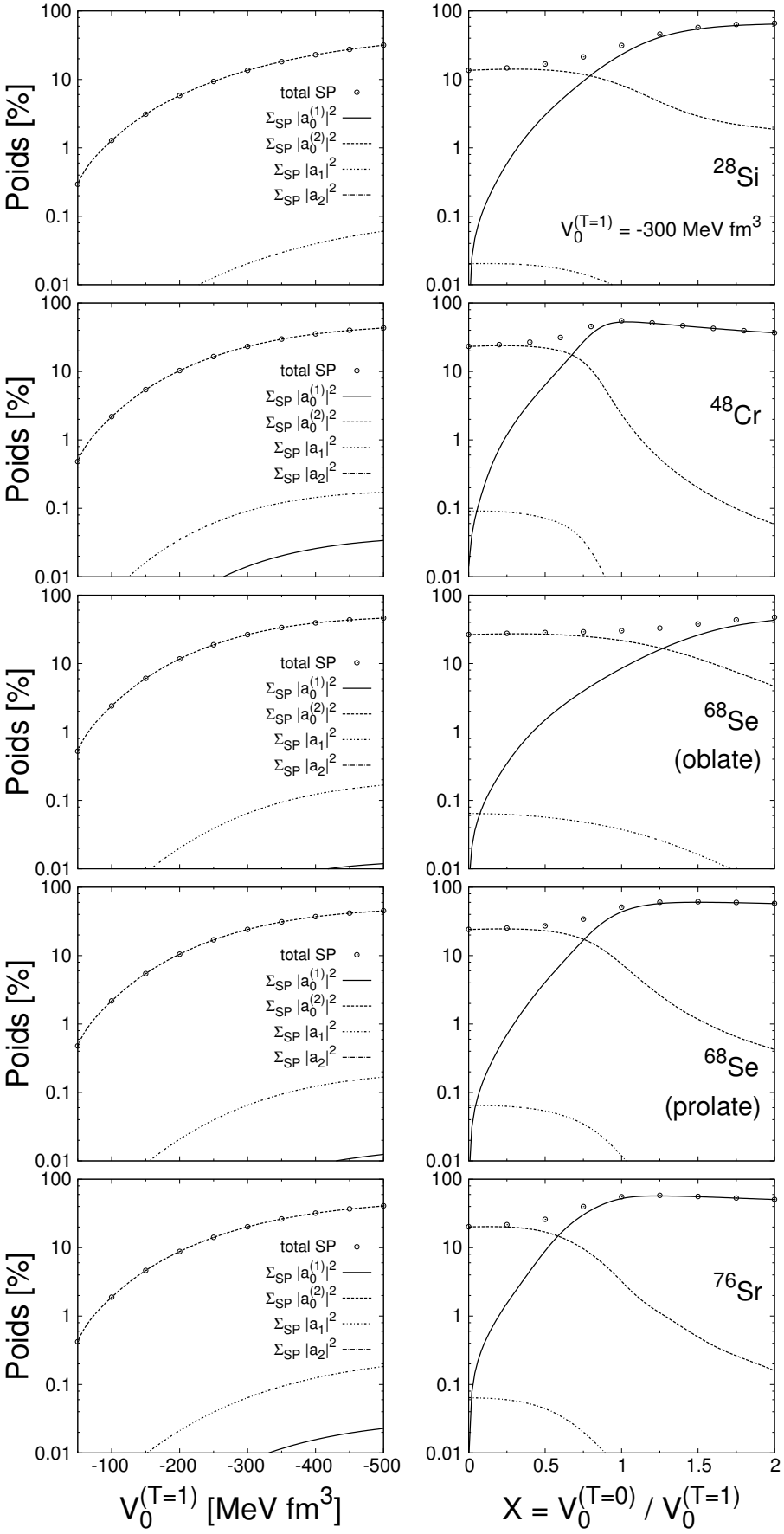


FIGURE 6.9 – Poids des différentes catégories de *pseudo-vecteurs propres* de $\hat{\mathbf{T}}^2$ au sein des simples paires dans la fonction d'onde corrélée en fonction de $V_0^{(\mathrm{T=1})}$ (à gauche) et en fonction de X avec $V_0^{(\mathrm{T=1})} = -300$ MeV fm^3 (à droite). Le poids total des excitations de simples paires dans chaque fonction d'onde est repéré par des cercles. Une échelle semi-logarithmique est utilisée en ordonnée pour faire ressortir le poids des configurations les plus faibles.

Sur la figure 6.9, nous avons reporté les poids totaux des *pseudo-vecteurs propres* de $\hat{\mathbf{T}}^2$ de type $|\Psi_0^{(1)}\rangle$, $|\Psi_0^{(2)}\rangle$, $|\Psi_1\rangle$ et $|\Psi_2\rangle$. En supposant que les relations (6.10)–(6.13) sont valables, on peut déduire de cette figure, connaissant les C_i (c.f. figure 6.8), les quantités $\Delta P_{\mathrm{T}}^{(i)}$ et ainsi séparer, pour chaque type d'état, les deux effets en compétition. De façon générale, nous savons que $\Delta P_{\mathrm{T}}^{(i)}$ sera faible si $\mathrm{T} = 0$ et proche de 100% sinon. C'est précisément l'écart à ces valeurs limites qui nous est inconnu et qui varie d'un noyau à l'autre.

En fonction de l'intensité dans le canal $\mathrm{T} = 1$ de $\hat{V}_\delta$, les poids des *pseudo-vecteurs propres* de $\hat{\mathbf{T}}^2$ suivent toujours la même hiérarchie. Pratiquement tout le poids des excitations de simples paires est dû aux états de type $|\Psi_0^{(2)}\rangle$, deux ordres de grandeur plus bas apparaissent les états de type $|\Psi_1\rangle$ et un ordre de grandeur encore plus bas apparaissent les états de type $|\Psi_0^{(1)}\rangle$. Les états de type $|\Psi_2\rangle$ ont un poids tellement faible qu'ils n'apparaissent sur aucune figure.

Comme nous l'avions vu au chapitre 5, la hiérarchie entre les états $|\Psi_0^{(2)}\rangle$, $|\Psi_1\rangle$ et $|\Psi_2\rangle$ est tout à fait compréhensible par un raisonnement perturbatif basé sur l'expression (5.80). Le paramètre ε qui y apparaît mesure la différence relative des écarts en énergie entre le niveau occupé et le niveau inoccupé d'un groupe donné des protons par rapport aux neutrons. Ce paramètre est petit devant 1. On voit alors dans (5.80), toute chose égale par ailleurs, que l'état $|\Psi_0^{(2)}\rangle$ a un poids variant comme x_1, que celui de $|\Psi_1\rangle$ varie comme $x_1\,\varepsilon$ et enfin que celui de $|\Psi_2\rangle$ varie comme $x_1\,\varepsilon^2$. Par contre, ce développement perturbatif ne permet pas de déduire comment le poids de l'état $|\Psi_0^{(1)}\rangle$ se compare à celui des trois autres.

En fonction de X et en présence du canal $\mathrm{T} = 1$ avec $V_0^{(\mathrm{T}=1)} = -300$ MeV fm^3, on voit clairement un changement de régime dans les poids des différents types de *pseudo-vecteurs propres* de $\hat{\mathbf{T}}^2$. À mesure que X augmente, les excitations de simples paires passent d'une composition en états $|\Psi_0^{(2)}\rangle$ et $|\Psi_1\rangle$ à une une composition en $|\Psi_0^{(1)}\rangle$ majoritairement.

Là encore les développements perturbatifs du chapitre 5 explique ce changement de régime (voir expression (5.79)). En effet, en présence de canal $\mathrm{T} = 0$ uniquement, le type d'état à être majoritairement alimenté au premier ordre des perturbations est justement l'état $|\Psi_0^{(1)}\rangle$. La partie droite de la figure 6.9 confirme donc bien qu'à très forte valeur de X, tout se passe comme si le canal $\mathrm{T} = 0$ était pratiquement le seul canal actif de l'interaction résiduelle $\hat{V}_\delta$. Cette tendance est générale pour tous les noyaux considérés dans notre étude.

De façon générale, la contribution des états de type $|\Psi_1\rangle$ au mélange d'isospin suit quantitativement la même évolution que le poids de ces états dans les fonctions d'onde corrélées. Quand on lit la valeur du poids de l'ensemble de ce type d'état sur la figure 6.9, pour un jeu quelconque de valeurs de l'intensité de l'interaction $\hat{V}_\delta$ dans les deux canaux d'isospin, on retrouve, avec une très bonne précision, la valeur de leur contribution C_1 tracée sur la figure 6.8. Cette constatation indique que les différences de probabilités ΔP_1 associées à chaque état de type $|\Psi_1\rangle$ sont toutes très proches de 100%.

Dans tous les cas considérés ici, on peut dire que la contribution des états de type $|\Psi_0^{(2)}\rangle$ au mélange d'isospin en fonction de $V_0^{(\mathrm{T}=1)}$ et à faible valeur de X, est due à des poids conséquents dans les fonctions d'onde, la valeur de $\Delta P_0^{(2)}$ étant faible mais suffisante pour ne pas annuler cette contribution. Il en va de même pour la contribution des états de type $|\Psi_0^{(1)}\rangle$ au mélange d'isospin à forte valeur de X, sauf pour le ^{48}Cr. Dans le cas de ce noyau, on peut supposer que la différence de probabilité $\Delta P_0^{(1)}$ prend des valeurs trop faibles pour conduire à une contribution significative de ce type d'état au mélange d'isospin (c.f. figure 6.8).

A priori des mécanismes semblables se produisent pour les excitations de doubles et triples paires. La quantité ΔP_{T} pour un état donné, indépendamment de son ordre d'excitation par rapport à $|\Phi_0\rangle$,

est une quantité qui dépend uniquement des recouvrements des parties d'espace et de spin des fonctions d'onde individuelles de neutrons et de protons. Cette quantité introduit donc une forte dépendance dans le spectre à un corps de la contribution des corrélations d'appariement au mélange d'isospin.

6.4.3 Impact du traitement de l'interaction coulombienne

Pour terminer cette étude, essayons de comprendre l'impact sur le mélange d'isospin, des différents traitements de l'interaction de Coulomb.

Nous avions vu, au paragraphe 6.3.2, que l'effet général de l'approximation de Slater était de diminuer le paramètre de mélange quelle que soit l'intensité de l'interaction $\hat{V}_\delta$ dans ses deux canaux d'isospin. Comme on le sait, l'effet de cette approximation sur les fonctions d'onde à un corps est faible comparé à l'impact qu'elle a sur les énergies individuelles. On peut alors supposer en premier lieu que les quantités ΔP_{T}, pour n'importe quel *pseudo-vecteur propre* de $\hat{\mathbf{T}}^2$, sont assez peu modifiées par rapport à la situation (1) qui correspondait à un traitement exact du potentiel d'échange coulombien dans HF+BCS. La principale source de changement pour la contribution des corrélations d'appariement au-delà de $|\Phi_0\rangle$ au mélange d'isospin vient donc des poids des différents *pseudo-vecteurs propres*.

L'expression perturbative (5.80) montre que l'état $|\Psi_1\rangle$ a un poids dépendant linéairement du paramètre ε. Ce paramètre va être particulièrement affecté par la différence de traitement de la force de Coulomb au niveau du champ moyen puisqu'il donne une mesure de la différence des écarts en énergie individuelle entre les niveaux de neutrons et de protons d'un groupe donné. On s'attend naturellement à ce qu'il diminue fortement lorsque l'on a recours à l'approximation de Slater. Cette diminution va donc engendrer la chute du poids des états de type $|\Psi_1\rangle$ (en supposant λ faible devant ε dans (5.80)) dont la contribution au mélange d'isospin est dominante dans la situation (1) quelle que soit la valeur de l'intensité de l'interaction résiduelle $\hat{V}_\delta$ dans le canal $\mathrm{T} = 1$ et pour $X \lesssim 1$. Pour une intensité $V_0^{(\mathrm{T}=1)}$ fixée et dans la région $X > 1$, cependant, ce sont les états de type $|\Psi_0^{(1)}\rangle$ qui contribuent (sauf pour le ^{48}Cr). Le poids de tels états (voir (5.79)) ne dépend pas de ε au premier ordre des perturbations. Il faut donc aller au-delà de cette explication et considérer les effets de l'approximation de Slater sur les fonctions d'onde individelles. Cet effet faible va visiblement être de nature à affecter suffisamment les poids des états de type $|\Psi_0^{(1)}\rangle$ pour cette gamme d'intensité. Là encore, un raisonnement sur les poids est suffisant car on a vu au paragraphe précédent que ce type d'état contribue au mélange d'isospin grâce à un poids important puisque $\Delta P_0^{(1)}$ reste faible.

Pour commenter l'effet de l'interaction résiduelle coulombienne dans HTDA sur le mélange d'isospin, il est bon de remarquer tout d'abord que la hausse constatée sur la figure 6.6 de ce mélange coïncide avec les régions en énergie pour lesquelles les états de type $|\Psi_1\rangle$ constituent la contribution dominante. Entre les situations (1) et (3), le champ moyen est identique. Ceci implique nécessairement que les quantités ΔP_{T}, pour n'importe quel *pseudo-vecteur propre* de $\hat{\mathbf{T}}^2$, sont inchangées. Il s'agit, là encore, d'un effet sur les poids de ces états $|\Psi_1\rangle$. Pour la même raison qu'à l'instant, on peut certifier que les paramètres ε de chaque groupe sont identiques d'une situation à l'autre. La seule façon qu'il reste alors de modifier les poids des états $|\Psi_1\rangle$ est, d'après l'expression perturbative (5.80), via les éléments de matrice de l'interaction résiduelle et donc du paramètre λ.

Il est assez évident, compte tenu de la définition (5.76) de λ, que ce paramètre croît lorsque l'on rajoute, dans le canal résiduel de HTDA, l'interaction coulombienne répulsive qui possède une composante isovectorielle et une composante isotensorielle.

En résumé, on a pu montrer que l'approximation DCA et une approche perturbative au premier ordre permettent d'interpréter le mélange d'isospin dans HTDA. En combinant ces deux outils, nous avons pu comprendre dans quelle mesure et par quels mécanismes les corrélations d'appariement contribuent au mélange d'isospin de la fonction corrélée.

Troisième partie

Application à l'étude des transitions β de Fermi $0^+ \to 0^+$

Chapitre 7

Décroissance β nucléaire et test du Modèle Standard des interactions élémentaires

Contenu du chapitre

Introduction

7.1 Phénoménologie de l'interaction faible

7.1.1 La théorie de Fermi

7.1.2 Brisure de la symétrie de parité et modèle $V-A$

7.1.3 Propriétés du courant hadronique – hypothèse CVC

7.1.4 La règle d'or de Fermi

- Exemple de la décroissance β du neutron

7.2 Classification des interactions faibles

7.2.1 Interactions faibles purement leptoniques

7.2.2 Interactions faibles semi-leptoniques

7.2.3 Théorie de Cabibbo et matrice CKM

7.3 La décroissance β nucléaire

7.3.1 Prise en compte des effets du milieu

- Modification du facteur d'espace des phases
- L'élément de matrice nucléaire

7.3.2 Autres corrections

- Les corrections radiatives
- La correction de mélange d'isospin

7.4 Aspects expérimentaux

7.4.1 Mesures des énergies de transitions Q_β

7.4.2 Mesures des demi-vies totales $T_{1/2}$

7.4.3 Mesure des rapports d'embranchement BR

Introduction

Bien que sa décroissance ait été (indirectement) observée depuis la fin du XIX$^{\text{ème}}$ siècle, le neutron n'a été découvert qu'en 1932 par Chadwick [49, 50]. Lors de cette décroissance, un électron était émis avec un spectre continu en énergie alors que l'on s'attendait à ce qu'il emporte la totalité de l'énergie disponible et soit donc observé avec une énergie cinétique bien définie égale à Q_β. Cette constatation semblait alors être en contradiction avec le principe fondamental de conservation de l'énergie.

Pour remédier à ce problème W. Pauli postula en 1931, l'existence d'une deuxième particule émise, électriquement neutre, le neutrino (ou antineutrino pour la décroissance β^- du neutron). Cette particule a été observée expérimentalement en 1956 par C. L. Cowan, F. Reines *et al.* [65]. Cette découverte a été récompensée en 1995 par le prix Nobel de Physique [1].

La description théorique de cette décroissance a été élaborée en 1934 par E. Fermi avec sa célèbre théorie de l'interaction faible [66, 67]. Depuis cette époque, la théorie de l'interaction faible a connu beaucoup d'améliorations jusqu'à son unification avec la théorie de l'interaction électromagnétique pour conduire, en 1968, à la théorie électrofaible [68, 69]. Cette unification a valu à S. L. Glashow, A. Salam et S. Weinberg le prix Nobel de Physique en 1979. L'ensemble des interactions fondamentales et des particules élémentaires est aujourd'hui décrit dans le cadre du Modèle Standard de la physique des particules.

Ce chapitre n'a pas pour objet de donner une description moderne de l'interaction électrofaible. Nous verrons cependant, en restant au stade d'une théorie proche de la théorie de Fermi (avec toutefois quelques extensions), comment tester certaines hypothèses de base du Modèle Standard à basse énergie grâce à des outils de physique nucléaire. Ces tests permettent notamment d'accéder à l'élément de matrice V_{ud} de la matrice de mélange de quarks de Cabibbo, Kobayashi et Maskawa que nous introduirons dans ce chapitre. Sur le plan expérimental, de nombreuses expériences de physique nucléaire et des particules permettent d'évaluer ce paramètre important. À titre d'exemple, une revue très complète décrivant ces différentes expériences est donnée par I. S. Towner et J. C. Hardy [70].

La première est l'étude de la décroissance β purement vectorielle du pion π^+ [71]. Une telle transition constitue en principe un moyen direct d'évaluation de la constante de couplage vectorielle de l'interaction faible et donc du paramètre V_{ud}. Cependant une telle décroissance est extrêmement rare (rapport d'embranchement de l'ordre de 10^{-8}) et sa mesure est entâchée d'une incertitude importante.

Une autre voie possible est donnée par la décoissance du neutron (voir par exemple [72–74]). Cette décroissance mixte vectorielle et axiale-vectorielle sera décrite brièvement dans ce chapitre.

Quant aux expériences de physique nucléaire, deux possibilités existent pour déterminer le paramètre V_{ud}. La première est l'étude des transitions miroir dans un multiplet $\mathrm{T} = \frac{1}{2}$. La possibilité d'accéder à V_{ud} à l'aide de telles transitions a été mise en évidence par O. Naviliat-Cuncic et N. Severijns en 2009 [75]. Enfin, la dernière voie envisageable est donnée par l'étude de décroissances β nucléaires de Fermi dites *super-permises* entre deux états 0^+ dans un multiplet d'isospin $\mathrm{T} = 1$.

Ces deux dernières transitions vont dépendre de la structure nucléaire, de corrections radiatives ainsi que d'une correction notée δ_C provenant de la brisure de la symétrie d'isospin. Dans notre étude, nous nous sommes intéressés au dernier type de transition mentionné ici, c'est-à-dire les transitions de Fermi nucléaires. Comme nous le verrons, l'évaluation de la correction δ_C ne peut se faire que théoriquement et c'est là précisément le but de notre travail exposé dans le chapitre suivant.

Dans une première partie, nous esquisserons un historique de l'interaction faible en partant de la théorie de Fermi pour aller jusqu'au modèle $V-A$ élaboré par Gell-Mann. Nous présenterons également quelques propriétés du courant hadronique. Enfin, nous montrerons comment relier la constante de

1. Prix Nobel partagé entre F. Reines et M. L. Perl pour « les expériences pionnières en physique des leptons »

couplage de l'interaction faible (seul paramètre libre de la théorie) à certaines observables.

Dans la deuxième section de ce chapitre, nous aborderons le problème du mélange de saveurs des quarks par l'interaction faible.

Dans une troisième partie, nous détaillerons les diverses modifications ou corrections à apporter au formalisme pour pouvoir traiter le cas des décroissances β nucléaires.

Enfin, dans une dernière partie, nous situerons cette étude par rapport aux travaux expérimentaux actuels. En effet, nous présenterons brièvement quelques expériences majeures qui permettent de contribuer à de tels tests du Modèle Standard.

7.1 Phénoménologie de l'interaction faible

7.1.1 La théorie de Fermi

Le but de E. Fermi était d'élaborer une théorie permettant d'expliquer le processus β inverse

$$p + e^- \longrightarrow n + \nu_e \, . \tag{7.1}$$

Afin de rendre compte d'un tel phénomène, E. Fermi supposa qu'il était dû à une nouvelle interaction, l'interaction faible. Pour décrire une telle interaction à un niveau microscopique, il est nécessaire d'élaborer un modèle basé sur la théorie quantique des champs. De plus, du fait que le neutrino et l'électron émis ont une masse faible en comparaison de leur énergie cinétique dans ce processus, une description relativiste du phénomène s'impose. Enfin, du fait du caractère ponctuel de l'interaction (en première approximation) E. Fermi supposa que l'interaction était locale. Le propagateur est donc simplement une constante qui fut englobée dans la constante de couplage (bien sûr, cette hypothèse fut plus tard abandonnée pour rendre la théorie renormalisable).

Fermi procéda alors par analogie avec le formalisme ponctuel de l'électrodynamique quantique (QED) décrivant par exemple la diffusion $e^- p$

$$p + e^- \longrightarrow p + e^- \, , \tag{7.2}$$

pour décrire le processus (7.1).

Cependant une différence de taille sépare les deux interactions à l'œuvre dans les deux processus. Alors que pour l'interaction électromagnétique l'essentiel de son formalisme est déjà connu par la théorie classique des champs, aucun équivalent classique n'existe pour décrire les processus faibles. E. Fermi s'inspira alors de la QED et la transposa tout simplement au cas de la décroissance (7.1).

Dans le cas de la QED, la densité hamiltonienne d'interaction pour le processus (7.2) est donnée par

$$\mathcal{H}_{em} = j^{\mu}_{(e^-)} A^{(p)}_{\mu} = -\frac{e^2}{q^2} \left(\overline{\psi_{e_f^-}} \, \gamma^{\mu} \, \psi_{e_i^-}\right) \left(\overline{\psi_{p_f}} \, \gamma_{\mu} \, \psi_{p_i}\right) , \tag{7.3}$$

où $j^{\mu}_{(e^-)}$ est le courant électromagnétique de transition et $A^{(p)}_{\mu}$, le champ de Maxwell généré par le proton.

On construit donc une densité hamiltonienne d'interaction faible pour décrire le processus (7.1) qui sera de type *courant-courant* avec une forme plus générale [2]

$$\mathcal{H}_w = \sum_i C_i \left(\overline{\psi_p} \mathcal{O}_i \psi_n\right) \left(\overline{\psi_e} \mathcal{O}_i \psi_\nu\right) = \sum_i C_i J^{(w)}_i L_i \, , \tag{7.4}$$

2. Dans la théorie initiale de Fermi, seul le cas d'un courant vectoriel était considéré.

où les C_i sont des constantes de couplage indéterminées, $J_i^{(w)} = \left(\overline{\psi_p}\mathcal{O}_i\psi_n\right)$ et $L_i = \left(\overline{\psi_e}\mathcal{O}_i\psi_\nu\right)$ sont les courants hadronique et leptonique respectivement (dans le canal i).

Les fonctions d'ondes ψ décrivant les quatre particules intervenant dans le processus (7.1) sont solutions de l'équation de Dirac libre

$$(i\hbar\gamma^\mu\partial_\mu - mc)\,\psi = 0\,. \tag{7.5}$$

Les opérateurs $\mathcal{O}_i$ sont des matrices de spin 4×4 généralisant les matrices γ^μ de (7.3) qui définissent un courant j^μ_{em} purement vectoriel pour l'interaction électromagnétique.

Pour que la densité hamiltonienne (7.4) soit un scalaire (ou un pseudo-scalaire) de Lorentz, on peut montrer [76] que les opérateurs $\mathcal{O}_i$ peuvent se ramener aux 16 combinaisons linéaires de matrices γ^μ (linéairement indépendantes) listées dans le tableau 7.1.

Opérateurs $\mathcal{O}_i$	Propriétés de transformations de $\left(\overline{\psi_a}\mathcal{O}_i\psi_b\right)$	Nombre de matrices
$\mathbb{1}$	Scalaire (S)	1
γ^μ	Vecteur (V)	4
$\sigma^{\mu\nu} = \frac{\mathrm{i}}{2}\left[\gamma^\mu, \gamma^\nu\right]$	Tenseur de rang 2 (T)	6
$\gamma^\mu\gamma_5$	Axial-vecteur (A)	4
γ_5	Pseudo-scalaire (P)	1

TABLEAU 7.1 – Opérateurs élémentaires $\mathcal{O}_i$ en fonction des matrices γ^μ. Les indices μ et ν sont toujours différents deux à deux. Dans la littérature on pourra parfois trouver le terme de *pseudo-vecteur* pour désigner le courant axial-vecteur.

Jusqu'ici nous avons utilisé un formalisme relativiste afin de décrire correctement les deux leptons émis. Cependant le neutron et le proton impliqués dans le processus (7.1) possèdent une masse suffisamment importante en comparaison de leur énergie cinétique pour traiter leurs fonctions d'onde dans la limite non relativiste. De façon générale, les spineurs de Dirac $\psi_{n,p}$ décrivant ces deux hadrons dans (7.4) ont pour composantes $\phi_{n,p}$ et $\chi_{n,p}$ telles que

$$\psi_n = \begin{pmatrix}\phi_n\\ \chi_n\end{pmatrix} \qquad \text{et} \qquad \psi_p = \begin{pmatrix}\phi_p\\ \chi_p\end{pmatrix} \tag{7.6}$$

Dans la limite non relativiste, la composante $\phi_{n,p}$ devient très supérieure à la composante $\chi_{n,p}$. La première composante est appelée *grande composante* (elle vérifie alors l'équation de Schrödinger libre dans la limite non relativiste) et la seconde, désignée par le terme de *petite composante*, est négligeable dans ce cas.

Il est alors possible de montrer (voir par exemple [77] pour une démonstration détaillée) que dans cette limite, les différents canaux de la densité hamiltonienne (7.4) se ramènent à

$$S \qquad \overline{\psi_p}\psi_n = \phi_p^\dagger\phi_n - \chi_p^\dagger\chi_n \qquad \longrightarrow \quad \phi_p^\dagger\phi_n$$

$$V \qquad \overline{\psi_p}\gamma^\mu\psi_n = \left\{\phi_p^\dagger\phi_n + \chi_p^\dagger\chi_n\ ,\ \phi_p^\dagger\boldsymbol{\sigma}\chi_n + \chi_p^\dagger\boldsymbol{\sigma}\phi_n\right\} \quad \longrightarrow \quad \phi_p^\dagger\phi_n$$

$$T \qquad \overline{\psi_p}\sigma^{\mu\nu}\psi_n = \left\{ \begin{array}{l} \phi_p^\dagger\sigma_k\phi_n - \chi_p^\dagger\sigma_k\chi_n \quad \text{si } i,j,k \equiv \text{permut. circ. de 1, 2, 3} \\ \\ \mathrm{i}(\phi_p^\dagger\sigma_j\chi_n + \chi_p^\dagger\sigma_j\phi_n) \quad \text{si } i=0 \end{array} \right\} \longrightarrow \phi_p^\dagger\boldsymbol{\sigma}\phi_n$$

$$A \qquad \overline{\psi_p}\gamma^\mu\gamma_5\psi_n = \left\{\phi_p^\dagger\chi_n + \chi_p^\dagger\phi_n, \phi_p^\dagger\sigma_\mu\phi_n + \chi_p^\dagger\sigma_\mu\chi_n\right\} \longrightarrow \phi_p^\dagger\boldsymbol{\sigma}\phi_n$$

$$P \qquad \overline{\psi_p}\gamma_5\psi_n = \phi_p^\dagger\gamma^0\chi_n + \chi_p^\dagger\gamma^0\phi_n \longrightarrow 0$$

Les deux premiers types de courant (S et V) vont correspondre à des transitions appelées *transitions de Fermi* tandis que les deux suivantes (T et A) sont associées aux *transitions de Gamow-Teller*. Le courant pseudo-scalaire (P) disparaît dans la limite non relativiste. Les règles de sélections sur le spin J et la parité π associées à ces deux types de transitions dites *permises* sont données dans le tableau 7.2.

Transition	ΔJ	π_i, π_f	Voie interdite
Fermi	0	+	−
Gamow-Teller	$0, \pm 1$	+	$0^+ \to 0^+$

TABLEAU 7.2 – Règles de sélection associées aux transitions permises de Fermi et Gamow-Teller.

7.1.2 Brisure de la symétrie de parité et modèle $V-A$

Nous disposons désormais d'une forme générale de l'interaction faible légèrement étendue par rapport à la théorie initiale de Fermi qui postulait une forme purement vectorielle des courants dans (7.4) (i.e. $\mathcal{O} \to \gamma_\mu$). La question est de savoir quels sont les types de courant capables de reproduire les observations expérimentales et quelles sont les constantes de couplage correspondantes.

Une première étape vers cette réponse est donnée par une constatation expérimentale. Il s'agit de la décroissance purement hadronique du méson K^+ par plusieurs voies possibles. Le méson K^+ peut en effet décroître par les voies hadroniques suivantes

$$K^+ \longrightarrow \pi^+ + \pi^0 \,, \tag{7.7}$$
$$K^+ \longrightarrow \pi^+ + \pi^+ + \pi^- \,. \tag{7.8}$$

Un gros problème se pose alors puisque la parité intrinsèque du méson π est négative et donc les différents états finaux dans (7.7) et (7.8) sont de parités différentes [3].

T. D. Lee et C.N. Yang [78] proposèrent une explication novatrice pour ce problème. Il suggérèrent la possibilité que l'interaction faible puisse briser la symétrie de parité et proposèrent une série d'expériences permettant de tester leur hypothèse. La plus célèbre d'entre elles fut réalisée par C. S. Wu et al. [79] qui a étudié le cas de la décroissance β du ^{60}Co

$$^{60}\mathrm{Co} \longrightarrow {}^{60}\mathrm{Ni} + e^- + \overline{\nu_e} \,.$$

Cette expérience mit en évidence que les électrons émis étaient préférentiellement d'hélicité gauche. Cela confirma la non conservation de la parité par l'interaction faible.

3. On pensait à l'époque qu'il s'agissait de décroissances de deux particules différentes ayant la même masse et le même spin que le K^+. Ces particules étaient appelées θ^+ et τ^+ et ce casse-tête était désigné sous le nom de *puzzle* τ-θ.

Il est aujourd'hui connu que les leptons sont majoritairement d'hélicité gauche et que les anti-leptons sont d'hélicité droite.

Pour rendre compte de ces observations expérimentales, il est nécessaire de modifier le courant leptonique de (7.4) de la façon suivante,

$$\overline{\psi_e}\mathcal{O}_i\psi_\nu \quad \longrightarrow \quad \overline{(\hat{P}_-\psi_e)}\mathcal{O}_i(\hat{P}_-\psi_\nu) = \overline{\psi_e}(\hat{P}_+\mathcal{O}_i\hat{P}_-)\psi_\nu \tag{7.9}$$

où $\hat{P}_\pm = \frac{1}{2}(\mathbb{1}\pm\gamma_5)$ sont les projecteurs sur les états d'hélicité gauche $(-)$ ou droite $(+)$ [4]. Ces projecteurs sont adjoints l'un de l'autre, $\hat{P}_\pm^\dagger = \hat{P}_\mp$. La dernière égalité dans (7.9) est obtenue grâce aux propriétés générales des matrices γ_μ (voir par exemple [76]).

Ainsi, le courant modifié est simplement obtenu en remplaçant chaque opérateur $\mathcal{O}_i$ par sa restriction au sous-espace d'hélicité négative $(\hat{P}_+\mathcal{O}_i\hat{P}_-)$. Il reste donc à déterminer comment se transforment les différents types d'opérateurs $\mathcal{O}_i$ listés dans le tableau 7.1. Les opérateurs projetés sont listés dans le tableau 7.3.

Opérateurs $\mathcal{O}_i$	Opérateurs projetés $\hat{P}_+\mathcal{O}_i\hat{P}_-$
$\mathbb{1}$	0
γ^μ	$\frac{1}{2}\gamma^\mu(\mathbb{1}-\gamma_5)$
$\sigma^{\mu\nu}$	0
$\gamma^\mu\gamma_5$	$-\frac{1}{2}\gamma^\mu(\mathbb{1}-\gamma_5)$
γ_5	0

TABLEAU 7.3 – Expression des opérateurs élémentaires $\mathcal{O}_i$ projetés sur le sous-espace d'hélicité négative.

La brisure de parité de l'interaction faible et le fait que l'on n'observe que des leptons (en grande majorité) gauches imposent donc une contrainte sur la nature des courants possibles qui contribuent à (7.4). Les courants scalaires, tenseurs et pseudo-scalaires sont donc interdits. Il ne reste que les courants vecteurs (V) et axial-vecteurs (A). Les résultats du tableau 7.3 montrent que la combinaision possible d'un courant vectoriel et axial-vectoriel pour former un courant qui présente une brisure maximale de la parité est la combinaision (à un signe près et au facteur $\frac{1}{2}$ près) $\gamma^\mu(1-\gamma_5)$, c'est-à-dire la combinaison « $V-A$ ».

Comme nous l'avons déjà mentionné, la condition selon laquelle la densité hamiltonienne d'interaction faible doit être un scalaire de Lorentz impose que le courant hadronique $\overline{\psi_p}\mathcal{O}_i\psi_n$ doit être également une combinaison de V et de A. La situation d'un courant $V-A$ pur correspond à une brisure maximale de la parité. Bien que cette forme soit une excellente approximation pour les leptons, il n'y a aucune raison qu'il en soit de même pour les hadrons. De façon générale, le courant hadronique prendra a priori la forme

$$\overline{\psi_p}\gamma^\mu(C_V - C_A\gamma_5)\psi_n = C_V\,\overline{\psi_p}\gamma^\mu(1 - g_A\gamma_5)\psi_n\,. \tag{7.10}$$

4. En réalité les opérateurs $\hat{P}_\pm$ sont appelés opérateurs de projection sur des états de chiralité négative ou positive. Les véritables opérateurs de projection sur des états d'hélicité donnée sont $\hat{P}_\pm = \frac{1}{2}(\mathbb{1} \pm \gamma_5\frac{\boldsymbol{\alpha}.\boldsymbol{p}}{p}) = \frac{1}{2}(\mathbb{1} \pm \gamma_5\frac{E-\beta m_0}{p})$. Ces derniers projecteurs s'identifient aux projecteurs $\frac{1}{2}(\mathbb{1} \pm \gamma_5)$ dans le cas où les leptons émis sont ultra-relativistes $(E \approx p \gg m_0)$. Pour une discussion plus détaillée voir par exemple la référence [77].

Finalement, la densité hamiltonienne d'interaction faible dans le modèle $V-A$ s'écrit

$$\mathcal{H}_w = \frac{G_F\, C_V}{\sqrt{2}} \left[\overline{\psi_p}\gamma^\mu(1 - g_A\gamma_5)\psi_n\right] \left[\overline{\psi_e}\gamma^\mu(1-\gamma_5)\psi_\nu\right] . \tag{7.11}$$

Dans cette dernière expression, la constante de couplage de l'interaction faible est habituellement exprimée en fonction de la constante de couplage de Fermi G_F, qui est déterminée par la mesure de la demi-vie du muon qui décroît par le processus β purement leptonique (voir section 7.2)

$$\mu^- \longrightarrow \nu_\mu + e^- + \overline{\nu}_e \, . \tag{7.12}$$

La valeur la plus récente de G_F est [82]

$$G_F = 1.16637(1) \times 10^{-5}\,\mathrm{GeV}^{-2} \, . \tag{7.13}$$

7.1.3 Propriétés du courant hadronique – hypothèse CVC

Les valeurs des deux constantes sans dimension C_V et g_A peuvent être déterminées par l'expérience, par la mesure de durée de vie de décroissance du neutron ou par la mesure du paramètre d'asymétrie de l'électron lors de cette décroissance β [73, 80, 81].

La valeur du paramètre $g_A = \frac{C_A}{C_V}$ a été déterminée avec précision par cette dernière méthode :

$$g_A = \frac{C_A}{C_V} = 1.2750(9) \, . \tag{7.14}$$

Quant à l'évaluation de la constante C_V, l'étude de décroissances semi-leptoniques (conservant l'étrangeté, voir la section 7.2) aboutit à une valeur très proche de 1 [77],

$$C_V = 0.9858(11) \, . \tag{7.15}$$

Dans le cas hadronique, il est donc clair qu'on n'a pas un courant de type $V-A$ pur. En fait, les hadrons sont également sensibles à l'interaction forte et lors d'une décroissance faible, l'interaction forte va modifier la constante de couplage faible. On parle alors de renormalisation de la constante de couplage par l'interaction forte. En termes de développement perturbatif, cela revient à prendre en compte des diagrammes d'ordres supérieurs tenant compte des couplages entre hadrons par l'interaction forte.

Cependant, si l'on poursuit l'analogie avec l'interaction électromagnétique pour la partie vectorielle du courant, on devrait avoir tout de même $C_V = 1$. En effet, la conservation de la charge électrique impose une contrainte sur le courant vectoriel électromagnétique. Celui-ci doit être de divergence nulle

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla}.\boldsymbol{j} = 0 \, , \tag{7.16}$$

ou, dans le formalisme de quadricourant,

$$\partial_\mu j^\mu = 0 \, . \tag{7.17}$$

Cela vient du fait que la contribution des diagrames d'ordre supérieur est nulle par un jeu de compensations. Ainsi, la charge électrique pour le diagramme d'ordre le plus bas n'est pas renormalisée (voir figure 7.1). Dans le cas de l'interaction électromagnétique, le courant (vectoriel) est conservé (i.e. de divergence nulle).

Par pure analogie avec l'interaction électromagnétique on postule alors [89, 90] que le courant vectoriel de l'interaction faible est conservé. La constante de couplage vectorielle C_V n'est donc pas

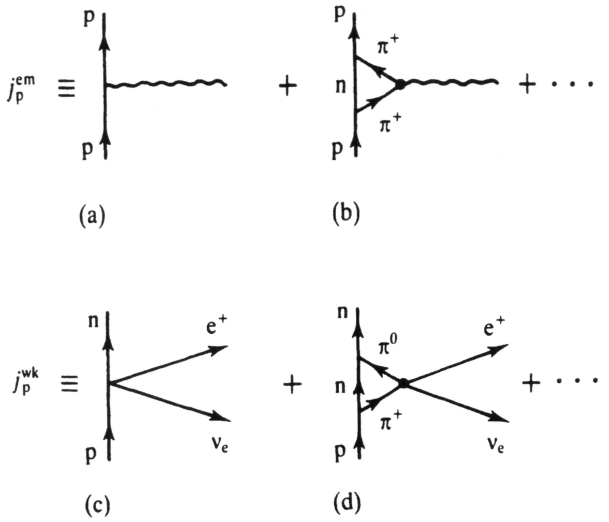


FIGURE 7.1 – En haut : Couplage d'un proton à un champ électromagnétique. En bas : Couplage d'un proton à un champ faible (à faible énergie des bosons $W^{\pm}$). Les diagrammes (a) et (c) représentent le proton nu tandis que (b) et (d) présentent les modifications dues à l'émission d'un pion virtuel. En (a) le proton se couple au champ électromagnétique avec la même constante de couplage e que le pion en (b). *(Figure tirée de [84]).*

renormalisée par l'interaction forte et on pose $C_V = 1$. C'est l'hypothèse CVC (*Conserved Vector Current*). Le choix $C_V = 1$ permet également de bâtir l'interaction électrofaible.

En outre, nous avons vu que pour les transitions semi-leptoniques conservant l'étrangeté, la constante de couplage G différait légèrement de G_F (i.e. $C_V \approx 1$). En fait le désaccord est encore plus important lorsque l'on considère des décroissances semi-leptoniques ne conservant pas l'étrangeté (voir section 7.2.3) où la constante de couplage déduite de l'expérience est environ 4.5 fois plus faible que la constante de Fermi G_F.

Ce problème pourra néanmoins être résolu sans pour autant remettre en cause l'hypothèse CVC. La solution de ce problème sera présentée dans la section 7.2.3.

7.1.4 La règle d'or de Fermi

Avant d'aller plus loin dans la discussion sur l'interaction faible, nous allons discuter la manière dont peut être reliée la constante de couplage de l'interaction à la durée de vie de la particule qui décroît.

La façon de relier ces deux quantités est d'utiliser la théorie des perturbations au premier ordre qui conduit à la célèbre *règle d'or de Fermi* [83]

$$\mathcal{W}_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |\mathcal{M}_{fi}|^2 \, \rho_f \, , \tag{7.18}$$

où $\mathcal{W}_{fi}$ est la densité de probabilité de transition par unité de temps (ou taux de transition), $\mathcal{M}_{fi}$ est l'*élément de matrice de transition* (ou amplitude de probabilité) et ρ_f, la densité d'états finals.

L'élément de matrice de transition d'un état $|\varphi_i\rangle$ vers un état $|\varphi_f\rangle$, causée par une perturbation $\mathcal{H}_{int}$, est donné par

$$\mathcal{M}_{fi} = \langle \varphi_f | \mathcal{H}_{int} | \varphi_i \rangle \, . \tag{7.19}$$

Dans le cas d'une décroissance, la densité de probabilité de transition par unité de temps $\mathcal{W}_{fi}$ n'est rien d'autre que la constante de décroissance, i.e. l'inverse de la durée de vie [84]

$$\mathcal{W}_{fi} = \frac{1}{\tau} = \frac{\ln 2}{t_{1/2}} \,. \tag{7.20}$$

◦ Exemple de la décroissance β du neutron

La décroissance β du neutron est une décroissance mixte Fermi (V) et Gamow-Teller (A). De façon générale, l'élément de matrice sera la somme des deux contributions

$$\mathcal{M}_{fi} = \mathcal{M}_{fi}^{(F)} + \mathcal{M}_{fi}^{(GT)} \,. \tag{7.21}$$

Nous reviendrons plus en détail sur le calcul de cet élément de matrice lorsque nous discuterons le cas de la transition de Fermi nucléaire (voir section 7.3). Nous allons nous intéresser ici au reste du problème, à savoir, le traitement de la densité d'états finals.

Partant de (7.18) et (7.20) et en supposant que l'élément de matrice de transition $\mathcal{M}_{fi}$ est indépendant de l'énergie, la durée de vie τ satisfait la relation

$$\frac{1}{\tau} = \int_{m_e c^2}^{E_0} \frac{d\mathcal{W}_{fi}}{dE_e}\, dE_e = \frac{2\pi}{\hbar}\, |\mathcal{M}_{fi}|^2 \int_{m_e c^2}^{E_0} \frac{d\rho_f(E_0, E_e)}{dE_e}\, dE_e \,. \tag{7.22}$$

où $E_0 = m_e c^2 + 782$ keV $= 1.293$ MeV est l'énergie disponible pour la décroissance du neutron et E_e l'énergie de l'électron. Une fois ces énergies connues ainsi que l'énergie de recul du neutron, on en déduit celle du neutrino E_ν qui est contrainte par la conservation de l'énergie.

Comme l'énergie de recul du neutron est négligeable (i.e. $E_0 = E_e + E_\nu$) et que l'on peut également négliger la masse du neutrino, on peut montrer que [77],

$$d\rho_f(E_0, E_e) = (4\pi)^2 \frac{E_e \sqrt{E_e^2 - m_e c^4}\, (E_0 - E_e)^2}{(2\pi\hbar c)^6}\, dE_e \,. \tag{7.23}$$

En injectant (7.23) dans (7.22), on aboutit à ce que l'on appellera par la suite la quantité ft,

$$ft \equiv f(E_0)\, t_{1/2} = \frac{K}{|\mathcal{M}_{fi}|^2} \,. \tag{7.24}$$

où le facteur d'espace des phases $f(E_0)$ peut être mis sous la forme

$$f(E_0) = \int_1^{\mathcal{E}_0} \mathcal{E}_e \sqrt{\mathcal{E}_e^2 - 1}\, (\mathcal{E}_0 - \mathcal{E}_e)^2\, d\mathcal{E}_e \tag{7.25}$$

obtenu à partir de (7.22) et (7.23) en effectuant le changement de variable $\mathcal{E}_i = \frac{E_i}{m_e c^2}$ (pour $E_i = E_0$ et $E_i = E_e$). La constante K (c.f. [82]) vaut

$$K = \frac{2\pi^3 \hbar^7 \ln 2}{m_e^5 c^4} = 4.79390614(21) \times 10^{-11} \mathrm{GeV}^2\, \mathrm{fm}^6\ \mathrm{s} \,. \tag{7.26}$$

7.2 Classification des interactions faibles

Dans la section précédente, nous avons abouti à une forme de la densité hamiltonienne d'interaction faible basée sur l'hypothèse d'une interaction de contact. Cette densité hamiltonienne va au-delà de la théorie initiale de Fermi et est maintenant capable de rendre compte de la brisure de la symétrie de parité par l'interaction faible. Celle-ci est caractérisée par une constante de couplage $G \propto G_F$ qu'il reste à déterminer.

Trois types d'interactions faibles sont observées dans la nature : celles n'impliquant que des leptons (interactions faibles purement leptoniques), celles impliquant des hadrons et des leptons (interactions faibles semi-leptoniques) et enfin celles n'impliquant que des hadrons (interactions faibles purement hadroniques).

Nous allons ici brièvement décrire les deux premiers types de décroissance. Le troisième type sort du cadre de ce travail et ne sera donc pas abordé. Nous verrons qu'il n'est pas possible de décrire ces différents modes de décroissance par (7.11) avec la même constante de couplage G. Certaines extensions de la densité hamiltonienne (7.11) sont, par conséquent, encore nécessaires.

7.2.1 Interactions faibles purement leptoniques

L'exemple typique de ce mode de décroissance est la désintégration du muon μ^- (7.12). La densité hamiltonienne, adaptée au cas purement leptonique (courant $V-A$ pur), devient

$$\mathcal{H}_\ell = \frac{G_F}{\sqrt{2}} \left[\overline{\psi_{\nu_\mu}} \gamma^\mu (1-\gamma_5) \psi_\mu\right] \left[\overline{\psi_e} \gamma^\mu (1-\gamma_5) \psi_{\nu_e}\right] . \tag{7.27}$$

La mesure de la demi-vie du muon μ^- donne accès (voir section 7.1.4) à la constante de couplage. Pour toute transition leptonique pure, la constante de couplage est la même et est désignée par *constante de couplage de Fermi*, G_F. Sa valeur est donnée en (7.13).

7.2.2 Interactions faibles semi-leptoniques

Là encore, il faut différencier deux cas : les décroissances qui conservent le nombre quantique d'étrangeté S et celles qui ne le conservent pas. Quelques exemples typiques illustrant les deux types de décroissance sont donnés dans le tableau 7.4.

Afin de juger de l'importance relative de ces deux types de décroissance, on compare expérimentalement les taux de transitions correspondants. Prenons l'exemple de la décroissance du π^- pour le premier type ($\Delta S = 0$) et celle du K^+ pour l'autre cas ($\Delta S = 1$).

Exemples de transition	Composition en quark	ΔS
$\pi^- \longrightarrow \mu^- + \overline{\nu}_\mu$	$(\overline{u}d) \longrightarrow -$	0
$n \longrightarrow p + e^- + \overline{\nu}_e$	$(udd) \longrightarrow (uud)$	
$K^+ \longrightarrow \mu^+ + \nu_\mu$	$(u\overline{s}) \longrightarrow -$	1
$\Lambda^0 \longrightarrow p + e^- + \overline{\nu}_e$	$(uds) \longrightarrow (uud)$	

TABLEAU 7.4 – Exemples de transitions semi-leptoniques conservant ou non le nombre quantique d'étrangeté S.

En réalité, les transitions du π^- et du K^+ mentionnées dans le tableau 7.4 ne sont pas les seules existantes pour ces particules. Plusieurs voies sont en effet possibles et il faut dès lors tenir compte des *rapports d'embranchement* pour les transitions d'intérêt. Afin de reproduire théoriquement les bons rapports d'embranchement, il est nécessaire de tenir compte de *corrections radiatives* qui modifient les constantes de couplage.

Une fois ces corrections prises en compte (qui sont de l'ordre de quelques pourcents), on obtient un rapport entre les constantes de couplage des deux types de transition,

$$\frac{G^{(\Delta S=1)}}{G^{(\Delta S=0)}} \approx 0.23\,. \tag{7.28}$$

Cette constatation pose alors un problème majeur. Les décroissances semi-leptoniques violant l'étrangeté sont produites dans la nature avec un taux 20 fois plus faible environ ($(G^{(\Delta S=1)}/G^{(\Delta S=0)})^2$) que les décroissances semi-leptoniques conservant l'étrangeté. La perspective de les unifier avec une seule et même constante de couplage semble donc être compromise.

7.2.3 Théorie de Cabibbo et matrice CKM

Pour remédier à ce problème conceptuel, N. Cabibbo proposa [86] une explication élégante. Il suggéra que l'interaction faible mélange les saveurs des quarks, ou en d'autres termes, que les quarks d' et s', états propres de l'interaction faible, mélangent les saveurs d et s, états propres de l'interaction forte. À l'époque seules les deux premières familles de quarks (u, d) et (c, s) étaient connues. On passe alors des uns aux autres par une rotation des saveurs de quarks d'un angle θ_C, l'angle de Cabibbo

$$\begin{pmatrix} d' \\ s' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta_C & \sin\theta_C \\ -\sin\theta_C & \cos\theta_C \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d \\ s \end{pmatrix}\,. \tag{7.29}$$

On peut expliquer (7.28) de la sorte, en tenant compte des mélanges de quarks : $C_V = \cos\theta_C$ lorsque $\Delta S = 0$ et $C_V = \sin\theta_C$ lorsque $\Delta S = 1$. On trouve ainsi un angle de 13°.

$$\frac{G^{(\Delta S=1)}}{G^{(\Delta S=0)}} = \tan\theta_C \qquad \Rightarrow \qquad \theta_C \approx 13^\circ \tag{7.30}$$

Deux ans plus tard, V. L. Fitch *et al.* découvrirent la violation de la symétrie CP (conjugaison de charge et parité) par l'interaction faible [87]. Nous n'irons pas plus loin dans la discussion de cette caractéristique de l'interaction faible ici mais nous mentionnerons toutefois une conséquence importante sur le formalisme discuté jusqu'ici.

Pour expliquer cette constatation, Kobayashi et Maskawa étendirent la théorie de Cabibbo à une troisième génération de quarks (t, b). La nouvelle matrice de mélange de saveurs de quarks est maintenant connue sous le nom de *matrice CKM* (pour Cabibbo-Kobayashi-Maskawa).

$$\begin{pmatrix} d' \\ s' \\ b' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} V_{ud} & V_{us} & V_{ub} \\ V_{cd} & V_{cs} & V_{cb} \\ V_{td} & V_{ts} & V_{tb} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d \\ s \\ b \end{pmatrix}\,. \tag{7.31}$$

Compte tenu de cette reformulation, il convient désormais d'écrire la constante de couplage vectorielle G_V comme

$$G_V = V_{ud}\, G_F \tag{7.32}$$

dans le cas de transitions semi-leptoniques conservant l'étrangeté et comme

$$G_V = V_{us}\, G_F \tag{7.33}$$

dans le cas de transitions semi-leptoniques ne conservant pas l'étrangeté.

Le quark b a été découvert en 1977 et le quark t en 1994. Kobayashi et Maskawa reçurent le prix Nobel en 2008 pour leur explication de la brisure de CP dans l'interaction faible et la prédiction de l'existence d'une troisième génération de quarks.

De plus, dans le cadre du Modèle Standard, trois générations de quarks seulement existent. Suivant cette hypothèse, la matrice CKM doit être unitaire. Cette hypothèse peut être alors testée par une détermination précise des éléments de cette matrice, à commencer par sa première ligne. On doit avoir en effet

$$|V_{ud}|^2 + |V_{us}|^2 + |V_{ub}|^2 = 1 \,. \tag{7.34}$$

L'élément de matrice dominant de cette première ligne est V_{ud}. Il peut être déterminé par une mesure précise de la durée de vie du neutron [73, 80, 81], à partir de la décroissance du pion ou encore par la mesure des valeurs de « ft » de décroissances β nucléaires de type Fermi dites super-permises.

La valeur la plus récente de ce paramètre donnée par le *Particle Data Group* [82] est de

$$V_{ud} = 0.9746(4)_{\tau_n}(18)_{g_A}(2)_{RC} \,, \tag{7.35}$$

où les différentes incertitudes proviennent de la durée de vie du neutron (τ_n), du rapport $g_A = C_A/C_V$ (la plus importante si l'on prend en compte les divers procédés expérimentaux permettant de le déterminer et qui présentent des désaccords) et enfin de corrections radiatives (RC) en tout genre.

7.3 La décroissance β nucléaire

7.3.1 Prise en compte des effets du milieu

Lorsque l'on traite le cas de la décroissance β d'un noyau atomique et non plus d'un neutron libre, il faut tenir compte de plusieurs effets liés au milieu nucléaire dans lequel baigne par exemple le neutron qui décroît (dans le cas de la décroissance β^-).

Tout d'abord, le calcul de l'élément de matrice de transition doit faire intervenir les fonctions d'onde nucléaires décrivant les noyaux dans l'état initial et l'état final. D'autre part, le facteur d'espace des phases est conditionné par la différence d'énergie de liaison des deux noyaux et est modifié par la charge du noyau final.

Ainsi, l'expression (7.24) établie pour la décroissance du neutron libre considérée au paragraphe 7.1.4, devra être adaptée au cas nucléaire par les modifications que nous allons discuter dans ce qui suit.

◦ Modification du facteur d'espace des phases

Le facteur de l'espace des phases $f(E_0)$ calculé en (7.25) sera modifié de deux façons [85, 91].

Tout d'abord l'énergie maximale disponible E_0 pour les leptons émis ne sera plus donnée par la différence de masse du neutron et du proton mais par

$$E_0 = E_f - E_i = Q_\beta - E_f^* \,, \tag{7.36}$$

où $E_{i,f}$ est l'énergie de liaison du noyau père (fils respectivement), Q_β est la chaleur de réaction β et E_f^*, l'énergie d'excitation du noyau fils. On voit ainsi que seuls les états finals situés dans la région d'énergie $0 \leqslant E_f^* \leqslant Q_\beta$ pourront être peuplés lors de cette décroissance. Évidemment, cette différence

d'énergie conditionnera par ailleurs le type de décroissance (β^+ ou β^-).

D'autre part, la densité d'états finals pour le lepton émis ($e^\pm$) sera affectée par l'interaction coulombienne entre ce lepton chargé et la distribution de charge du noyau final Z_f. Cette déformation du facteur de l'espace des phases est décrite par la *fonction de Fermi* $F(Z_f, E_e)$ dépendant de l'énergie du lepton [93] par

$$F(Z_f, E_e) = \frac{2(1+\gamma)}{(2pR)^{2(1-\gamma)}} \frac{|\Gamma(\gamma + 2\mathrm{i}y)|^2}{\Gamma(2\gamma+1)} e^{\pi y} , \tag{7.37}$$

avec

$$\gamma = \sqrt{1-(\alpha Z_f)^2} \tag{7.38}$$

$$p = \sqrt{E_0^2 - 1} \tag{7.39}$$

$$y = \frac{\alpha Z_f E_0}{p} \tag{7.40}$$

où R est le rayon du noyau et $\alpha = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 \hbar c}$ est la constante de structure fine.

Dans la limite non-relativiste, cette fonction de Fermi tend vers

$$F(Z_f, E_e) \longrightarrow \frac{2\pi\eta}{1 - e^{-2\pi\eta}} , \tag{7.41}$$

avec,

$$\eta = \mp \frac{Z_f\, \alpha}{v_e/c} \qquad \text{pour un } e^\pm \text{ ayant une vitesse } v_e . \tag{7.42}$$

Ainsi, le facteur d'espace des phases (7.25) devient

$$f(Z_f, E_0) = \int_1^{\mathcal{E}_0} \mathcal{E}_e \sqrt{\mathcal{E}_e^2 - 1}\, (\mathcal{E}_0 - \mathcal{E}_e)^2\, F(Z_f, \mathcal{E}_e)\, d\mathcal{E}_e . \tag{7.43}$$

Bien évidemment, d'autres effets sont à prendre en compte pour évaluer avec une précision suffisante le facteur d'espace des phases. Nous avons mentionné ici l'effet dominant, mais il est clair qu'il faut lui ajouter, entre autres, les effets de recul du noyau et de taille du noyau. Pour une discussion complète de ce point nous renvoyons le lecteur, par exemple, à la référence [93]. En toute rigueur, parmi ces corrections supplémentaires, certaines sont différentes selon que l'on considère des transitions de Fermi ou des transitions de Gamow-Teller. Après correction, on a alors deux facteurs d'espace de phase, f^V (Fermi) et f^A (Gamow-Teller), un pour chaque canal [70]. Nous n'irons pas jusqu'à ce degré de détail ici et, comme au final nous ne nous intéresserons qu'aux transitions de type Fermi, nous ne parlerons ici que d'un seul facteur d'espace des phases corrigé $f(Z_f, E_0)$.

◦ L'élément de matrice nucléaire

On s'intéresse ici à l'élément de matrice de transition β entre un état nucléaire initial donné $|\Psi_i\rangle$ et un état nucléaire final donné $|\Psi_f\rangle$. De façon générale, l'élément de matrice de transition sera la somme de deux contributions, un terme de Fermi (vectoriel pur) et un terme de Gamow-Teller (axial-vectoriel pur)

$$|\mathcal{M}_{fi}|^2 = G_F^2 V_{ud}^2 \Big[|M_F|^2 + g_A^2 |M_{GT}|^2 \Big] . \tag{7.44}$$

Ces éléments de matrices seront écrits en terme d'opérateurs de transition de Fermi $\hat{\mathcal{O}}_F$ et de Gamow-Teller $\hat{\mathcal{O}}_{GT}$

$$|M_F|^2 = |\langle \Psi_f | \hat{\mathcal{O}}_F | \Psi_i \rangle|^2 \qquad \text{et} \quad |M_{GT}|^2 = |\langle \Psi_f | \hat{\mathcal{O}}_{GT} | \Psi_i \rangle|^2 . \tag{7.45}$$

L'opérateur de transition de Fermi $\hat{\mathcal{O}}_F$ s'identifie à l'opérateur d'isospin $\hat{T}_\pm$ vu au chapitre 4

$$\hat{\mathcal{O}}_F = \hat{T}_\pm = \sum_{k=1}^{N} \hat{t}_\pm \qquad \text{pour la décroissance } \beta^\pm \,, \tag{7.46}$$

et l'opérateur de Gamow-Teller $\hat{\mathcal{O}}_{GT}$ agira également dans l'espace de spin,

$$\hat{\mathcal{O}}_{GT} = \sum_{k=1}^{N} \boldsymbol{\sigma} \hat{t}_\pm \qquad \text{pour la décroissance } \beta^\pm \,. \tag{7.47}$$

Compte tenu de ces modifications la valeur de « ft » de la relation (7.24) devient

$$ft \equiv f(Z_f, E_0)\, t_{1/2} = \frac{K}{G_F^2 |V_{ud}|^2 \Big[|M_F|^2 + g_A^2 |M_{GT}|^2 \Big]} \,. \tag{7.48}$$

7.3.2 Autres corrections

L'étude des transitions β nucléaires permises (Fermi et Gamow-Teller) permettent via (7.48) de déterminer les constantes de couplage vectoriel et axial-vectoriel de l'interaction faible. Compte tenu de l'hypothèse CVC du Modèle Standard, le second membre de (7.48) doit être une constante indépendante de la transition considérée. La dépendance en Z_f et E_0 du facteur f compense en quelque sorte celle de la demie-vie $t_{1/2}$. Les valeurs de « ft » déduites expérimentalement doivent alors conduire toujours au même résultat.

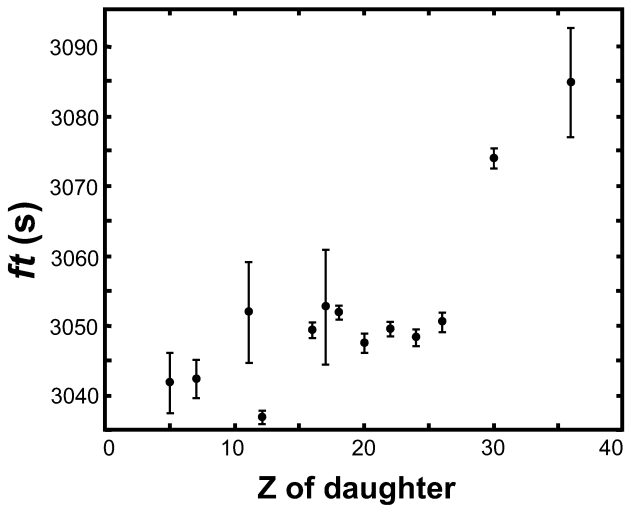


FIGURE 7.2 – Valeurs de « ft » pour les treize transitions de Fermi super-permises les mieux connues expérimentalement. *(Figure tirée de [92]).*

Or, il n'en est rien. Il se trouve que les ft mesurées présentent une importante dépendance dans la transition considérée comme le montre la figure 7.2. Face à une telle constatation, deux conclusions sont possibles. La première est la remise en cause de l'hypothèse CVC. Ce désaccord des valeurs de « ft » est alors la signature d'une physique au-delà du Modèle Standard. L'autre possibilité est que la relation (7.48) ne soit valable qu'en première approximation.

Il est alors obligatoire de s'assurer de pouvoir rejeter la deuxième hypothèse avant de dire que l'hypothèse CVC n'est pas vérifiée à basse énergie. Bien évidemment, cela n'est pas possible à l'heure actuelle et c'est bien la deuxième hypothèse qu'il nous faut considérer pour le moment. Cela dit, le test de l'hypothèse CVC ne sera pas pour autant clos et en raffinant la relation (7.48) avec des corrections, nous allons simplement repousser les limites d'existence d'une physique au-delà du Modèle Standard.

Deux types de corrections sont à apporter à la relation (7.48). Le premier concerne les corrections radiatives prenant en compte les interactions radiatives entre les différents intervenants du processus

y compris les bosons vecteurs intermédiaires $W^{\pm}$ et Z^0, véhiculant l'interaction faible et que nous avons négligés jusqu'ici. Le deuxième type est la correction due au mélange d'isospin dans les noyaux atomiques. Celle-ci est liée au fait que la symétrie d'isospin est brisée par l'interaction électromagnétique (et dans une moindre mesure par l'interaction forte) dans les noyaux et par conséquent, l'isospin T n'est pas un nombre quantique pertinent dans la description des fonctions d'onde nucléaires.

◦ Les corrections radiatives

Nous allons aborder ici la question des corrections radiatives, notées RC, qui modifient les valeurs des constantes de couplage G_V et $G_A = g_A G_V$ des décroissances semi-leptoniques. Pour évaluer correctement ces constantes de couplage *effectives*, il faut tenir compte du rayonnement de freinage de l'électron (ou de positron) émis (bremsstrahlung) ainsi que des échanges de photons virtuels qui se couplent aux bosons vecteurs $W^{\pm}$ et Z^0. L'intensité des couplages électromagnétiques est donnée par α, la constante de structure fine. Pour une transition mixte (Fermi et Gamow-Teller) ces corrections peuvent se factoriser comme l'a montré D. H. Wilkinson dans la reférence [93]. Ainsi, les corrections radiatives RC corrigent l'ensemble de l'expression (7.48).

On distingue alors deux types de corrections, celles qui ne dépendent pas du noyau considéré et qui sont tout à fait générales et celles qui en dépendent. La première correction sera notée Δ'_{R} tandis que la seconde sera notée δ_{R}. En réalité Δ'_{R} contient une petite partie qui dépend de la structure nucléaire et donc de la transition considérée. Cette partie sera extraite de Δ'_{R} plus tard. L'expression de la valeur de « ft » ainsi corrigée s'écrit de façon générale comme [70, 94]

$$\mathcal{F}t = ft(1 + \mathrm{RC}) = ft(1 + \delta_{\mathrm{R}})(1 + \Delta'_{\mathrm{R}}) \,. \tag{7.49}$$

La correction δ_{R} prend la forme suivante

$$\delta_{\mathrm{R}} = \frac{\alpha}{2\pi}\Big[\overline{g}(E_0) + \delta_2 + \delta_3\Big] \,. \tag{7.50}$$

Dans cette expression, E_0 est, comme précédemment, l'énergie maximale disponible pour l'électron émis. La fonction $\overline{g}(E_0)$ inclut des corrections de boucles de grande longueur d'onde moyennées sur tout le spectre β de l'électron ainsi que les effets liés au bremsstrahlung de l'électron. Elle est la seule contribution à l'ordre α. Les termes δ_2 et δ_3 sont des corrections de QED aux ordres $Z\alpha^2$ et $Z^2\alpha^3$ respectivement.

La correction Δ'_{R} s'écrit [70, 94]

$$\Delta'_{\mathrm{R}} = \frac{\alpha}{2\pi}\Big[4\ln\frac{m_Z}{m_p} + \ln\frac{m_p}{m_A} + 2C + \mathcal{A}_g\Big] \,, \tag{7.51}$$

où m_Z est la masse du boson Z^0 et m_p, celle du proton.

Cette correction est composée d'un terme de correction dominante de boucle de courte longueur d'onde ($4\ln\frac{m_Z}{m_p}$) et d'une contribution d'interaction faible axiale-vectorielle, ($\ln\frac{m_p}{m_A} + 2C$). Ce dernier terme est constitué d'une contribution de haute énergie (le terme logarithmique) et d'une contribution de basse énergie [5] ($2C$) où la frontière entre ces deux régimes est pilotée par le paramètre m_A ($\sim 1.2\,\mathrm{GeV}$) qui réalise une coupure en énergie. Enfin, le terme $\mathcal{A}_g = -0.34$ désigne une faible correction de QCD à l'ordre α_S (où α_S est la constante de couplage de l'interaction forte).

Comme nous l'avons déjà mentionné, la correction Δ'_{R} n'est pas tout à fait indépendante de la structure du noyau considéré. En effet, comme l'ont montré W. Jaus et G. Rasche [96], le terme $2C$ en

5. Le facteur 2 est présent afin de respecter la notation d'origine (voir par exemple [95]).

dépend. Il convient alors d'extraire ce qui dépend de la structure nucléaire afin d'isoler complètement les corrections qui ne dépendent pas de la structure de celles qui en dépendent.

Suivant [96], la correction C est donnée par la somme

$$C = C_{\text{Born}} + C_{\text{NS}} \,. \tag{7.52}$$

où $C_{\text{Born}} = 0.829$ (valeur actualisée par [70]) est calculée dans le cadre de l'approximation de Born et correspond au cas d'un nucléon isolé. C_{NS} tient compte de couplages entre les nucléons et dépendra donc du noyau considéré.

Finalement, la correction Δ'_{R} s'écrira comme

$$\Delta'_{\text{R}} = \Delta_{\text{R}} + \delta_{\text{NS}} \,, \tag{7.53}$$

où, $\Delta_{\text{R}} = 2.361(38)\%$ (valeur tirée de [70]) est réellement indépendante de la structure nucléaire et $\delta_{\text{NS}} = (\alpha/\pi)C_{\text{NS}}$ en dépend.

Ainsi, la valeur de « ft » corrigée (7.49) devient

$$\mathcal{F}t = ft(1+\delta_{\text{R}})(1+\Delta_{\text{R}}+\delta_{\text{NS}}) \,. \tag{7.54}$$

◦ La correction de mélange d'isospin

La correction de mélange d'isospin est la dernière correction que l'on considérera dans ce travail. Elle traduit le fait que la symétrie d'isospin n'est pas une symétrie exacte de la nature puisqu'elle est brisée, comme on l'a vu, majoritairement par l'interaction électromagnétique mais aussi par l'interaction forte.

Cette brisure doit être prise en compte lors du calcul des éléments de matrice nucléaires de la transition M_F et M_{GT} (7.45). Les cas particulièrement intéressants à étudier pour tester les limites du Modèle Standard à basse énergie sont les transitions de Fermi $0^+ \to 0^+$ dites *super-permises*, c'est-à-dire impliquant des états isobariques analogues. À la brisure de symétrie d'isospin près, de tels états sont représentés par les mêmes fonctions d'onde d'espace et de spin. Le recouvrement de la fonction d'onde finale $|\Psi_f\rangle$ avec l'état $\hat{T}_+|\Psi_i\rangle$ est donc très grand. En considérant une telle transition, on s'affranchit également de la contribution de Gamow-Teller (interdite pour une transition $0^+ \to 0^+$, voir tableau 7.2) et on peut ainsi directement accéder à la constante de couplage vectorielle de l'interaction faible G_V.

À partir de maintenant, nous ne considérerons plus le cas des transitions de Gamow-Teller. Nous allons donc illustrer le problème de la correction de mélange d'isospin dans le cas d'une transition de Fermi. Le raisonnement est néanmoins applicable aux cas de transitions mixtes. Pour une démonstration complète nous invitons le lecteur à consulter par exemple la référence [70].

Dans ce cas, l'élément de matrice de transition $|\mathcal{M}_{fi}|^2$ se résume à

$$|\mathcal{M}_{fi}|^2 = \widetilde{G_V}^2 |M_F|^2 \,, \tag{7.55}$$

où $\widetilde{G_V}^2$ est la constante de couplage vectorielle effective dépendante des corrections radiatives décrites plus haut.

Dans le cas idéal où la symétrie d'isospin n'est pas brisée[6], les états initial et final sont des états de bon isospin T. Ainsi, l'élément de matrice de Fermi, qui sera noté $(M_F)_0$, vaut simplement

$$(M_F)_0 = \langle \Psi_f | \hat{T}_\pm | \Psi_i \rangle \tag{7.56}$$

$$= \langle \mathrm{T}, \mathrm{T}_z \pm 1 | \hat{T}_\pm | \mathrm{T}, \mathrm{T}_z \rangle \tag{7.57}$$

$$(M_F)_0 = \sqrt{\mathrm{T}(\mathrm{T}+1) - \mathrm{T}_z(\mathrm{T}_z \pm 1)} \,, \tag{7.58}$$

6. Le cas réaliste n'est pas très éloigné de cette situation idéale étant donné que la symétrie d'isospin est faiblement brisée dans les noyaux (voir la discussion du chapitre 5).

où l'on n'a pas tenu compte des autres degrés de liberté caractérisant les fonctions d'ondes initiale et finale, non pertinents dans le problème. La quantité $\mathrm{T}_z = (N-Z)/2$ est la valeur propre de l'opérateur $\hat{T}_z$ associée à l'état initial décrivant un noyau à N neutrons et Z protons, et $\mathrm{T}_z \pm 1$ est celle de la fonction d'onde finale du noyau $(N \pm 1, Z \mp 1)$.

Dans toutes les transitions super-permises considérées pour l'extraction de la constante de couplage vectorielle de l'interaction faible, les états nucléaires en jeu sont toujours des états $\mathrm{T} = 1$. De plus, soit le noyau parent, soit le noyau fils est un noyau $N = Z$ de sorte que $\mathrm{T}_z(\mathrm{T}_z \pm 1) = 0$. Ainsi, on aura toujours

$$(M_F)_0 = \sqrt{2}. \tag{7.59}$$

Lorsqu'on considère un cas réaliste pour lequel la symétrie d'isospin n'est plus une symétrie exacte de l'hamiltonien nucléaire, on dévie légèrement de la situation précédente. L'élément de matrice de transition devient alors, par définition

$$|M_F|^2 = |M_F|_0^2(1-\delta_C)\,, \tag{7.60}$$

où δ_C est la correction de mélange d'isospin de l'ordre du pourcent, voire du dixième de pourcent. Elle dépend du couple de noyaux mis en jeu.

Le calcul de δ_C dans le cadre de l'approche HTDA est l'un des buts de ce travail de thèse et fera l'objet du prochain chapitre.

Toutes les corrections mentionnées dans cette section sont faibles (typiquement de l'ordre du pourcent) et on pourra se permettre de passer d'une forme linéaire du type $(1+\delta_1+\delta_2)$ à une forme produit du type $(1+\delta_1)(1+\delta_2)$ et vice-versa de sorte à regrouper les termes dépendants de la transition considérée entre eux.

Ainsi, on obtient la forme définitive, de la valeur de « ft » corrigée,

$$f(Z_f, E_0)t_{1/2}\,(1+\delta_\mathrm{R})(1+\delta_\mathrm{NS}-\delta_C) \equiv \mathcal{F}t = \frac{K}{G_F^2|V_{ud}|^2|M_F|_0^2(1+\Delta_\mathrm{R})}\,. \tag{7.61}$$

Le membre de droite de cette relation ne contient que des termes indépendants de la transition considérée, dans la mesure ou l'hypothèse CVC est vérifiée. La mesure expérimentale de la force de transition « ft » permettra alors, après correction, de vérifier cette hypothèse à basse énergie.

7.4 Aspects expérimentaux

Les tests du Modèle Standard évoqués plus haut reposant sur la relation (7.61) sont basés sur la mesure expérimentale de la valeur de « ft » et le calcul entièrement théorique des corrections radiatives et de mélange d'isospin, toutes les autres quantités étant connues avec une précision suffisante (en tout cas leurs incertitudes ne sont pas les facteurs les plus limitants pour le moment).

Avant de considérer en détail, dans le prochain chapitre, le calcul théorique de la correction due au mélange d'isospin qui est au cœur de cette thèse, nous allons, dans cette section, nous intéresser à certains aspects expérimentaux de notre problème.

Expérimentalement, les informations concernant la transition qui nous intéresse (i.e. $(0^+, \mathrm{T}=1) \to (0^+, \mathrm{T}=1)$) ne sont pas directement accessibles car une multitude de transitions vers des états excités du noyau fils sont également possibles. Il faut donc tenir compte de toutes ces transitions qui se font, comme nous l'avons déjà évoqué, vers tous les états finals tels que $0 \leqslant E_f \leqslant Q_\beta$ (voir figure 7.3).

En pratique, trois quantités sont donc mesurées. Il s'agit de l'énergie totale de transition Q_β, les demi-vies totales des noyaux émetteurs $T_{1/2}$ et enfin du rapport d'embranchement BR pour la transition étudiée, à savoir la transition super-permise $(0^+, \mathrm{T}=1) \to (0^+, \mathrm{T}=1)$.

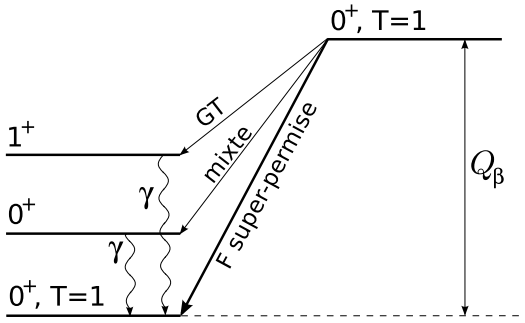


FIGURE 7.3 – Schéma de principe de la décroissance β.

7.4.1 Mesures des énergies de transitions Q_β

Jusqu'en 2004, la méthode habituelle pour mesurer ces énergies de transition consistait à utiliser des réactions impliquant les noyaux parent et fils.

Une première possibilité est d'utiliser une réaction de transfert du type

$$ {}^{A}_{Z}\mathrm{X}_N(p,n)_{Z+1}{}^{A}\mathrm{Y}_{N-1} \, , $$

où ${}^{A}_{Z}\mathrm{X}_N$ et ${}^{A}_{Z+1}\mathrm{Y}_{N-1}$ sont respectivement les noyaux final et initial de la décroissance β^+ étudiée. La détermination du seuil en énergie E_0 pour une telle réaction permet ainsi directement d'obtenir la valeur de Q_β (en oubliant l'énergie de liaison atomique) par

$$ E_0 = Q_\beta + M_n - M_p \, . $$

Cette méthode a été notamment utilisée par S. A. Brindhaban et al. [97] pour déterminer la valeur de Q_β de la décroissance du ${}^{26}\mathrm{Al}^m$.

Bien d'autres possibilités existent. On pourra citer par exemple des réactions mettant en jeu séparément le noyau fils et le noyau parent mais avec le même point commun, comme

$$ {}^{25}\mathrm{Mg}(p,\gamma){}^{26}\mathrm{Al}^m \qquad \text{et} \qquad {}^{25}\mathrm{Mg}(n,\gamma){}^{26}\mathrm{Mg} $$

toujours pour la décroissance du ${}^{26}\mathrm{Al}^m$. On déduit alors la valeur de Q_β par

$$ Q_\beta = Q_{n\gamma} - Q_{p\gamma} - M_n + M_p \, . $$

Depuis, une nouvelle technique expérimentale a ouvert la voie à des mesures beaucoup plus précises des Q_β. Il s'agit de méthode de détermination directe des masses des noyaux parent et fils à l'aide de pièges de Penning. La mesure d'une masse se ramène à une mesure de fréquence cyclotron qui peut être faite avec une très grande précision. Cette méthode a été utilisée pour la première fois par G. Savard et al. [98] dans le cas du ${}^{22}\mathrm{Mg}$.

Grâce à cette nouvelle technique, les précisions atteintes pour les valeurs de Q_β sont de l'ordre de la dizaine d'électronvolts.

7.4.2 Mesures des demi-vies totales $T_{1/2}$

En principe la mesure d'une demi-vie ne pose pas de problème majeur étant donnée qu'elle est directement reliée à la mesure de l'activité de la source considérée. En mesurant l'activité, on accède directement à la demi-vie.

Cependant, en pratique, la précision d'une telle mesure est limitée par un paramètre important, la pureté de l'échantillon. Tout l'enjeu d'une telle expérience est donc d'éliminer les impuretés de la

source. Pour ce faire, on a alors recours à diverses méthodes de séparation.

À titre d'exemple, nous citerons ici une expérience récente de mesure de la demi-vie du ^{38}Ca et du ^{39}Ca [99] (bien que ce dernier ne soit pas concerné par une transition $0^+ \to 0^+$).

Dans cette expérience, les isotopes de calcium sont produits par spallation sur une cible de titane. Une première séparation en masse est réalisée grâce au séparateur d'isotopes en ligne de haute résolution ISOLDE et l'échantillon est ensuite accumulé dans un piège de Penning (REXTRAP). Après une accumulation de 600 ms, l'échantillon est éjecté du piège et est enfin dirigé vers une station d'implantation à bande. Ce dernier trajet, du piège de Penning vers la station d'implantation est l'occasion de réaliser une dernière sélection en masse par mesure du temps de vol. L'échantillon est alors ultra-pur. Cette technique expérimentale est décrite plus en détail dans la référence [100]. La précision obtenue est ainsi de l'ordre de la milliseconde comparée à une durée de vie de quelques centaines de millisecondes (443.8(19) ms pour le ^{38}Ca).

7.4.3 Mesure des rapports d'embranchement BR

La demi-vie totale $T_{1/2}$ obtenue comme dans l'exemple précédent est associée à l'ensemble des voies de décroissances possibles. Cela comprend bien sûr la décroissance super-permise $(0^+, \mathrm{T} = 1) \to (0^+, \mathrm{T} = 1)$ mais aussi toutes transitions autorisées par les règles de sélections vers des états excités du noyau fils dont l'énergie d'excitation est inférieure ou égale à Q_β. Pour obtenir la demi-vie $t_{1/2}$ spécifique à la transition super-permise, il faut donc tenir compte de toutes les autres décroissances possibles et en déduire le rapport d'embranchement (BR) de la transition d'intérêt,

$$t_{1/2} = \mathrm{BR}\, T_{1/2}\,. \tag{7.62}$$

Dans le cas d'une transition vers un état excité du noyau fils, ce dernier se désexcite par émission d'un γ (voir figure 7.3). Le rapport des comptages de ces γ permet donc de déduire le rapport d'embranchement de cette transition particulière. On soustrait ainsi de 100% les rapports d'embranchement des transitions autres que la transition vers le fondamental.

Il y a typiquement trois types de cas à considérer [70]. Le premier est le cas de noyaux parents ayant $\mathrm{T}_z = 0$ et une masse $A \leqslant 54$. Pour de telles transitions, la densité de niveaux au niveau de Fermi du noyau fils est assez faible et extrêmement peu de transitions non super-permises sont possibles dans la fenêtre de Q_β. De plus, aucun état 1^+ n'existe dans cette fenêtre et aucune transition Gamow-Teller n'est donc possible. La transition $(0^+, \mathrm{T} = 1) \to (0^+, \mathrm{T} = 1)$ domine ($\geqslant 99\%$) et toute la difficulté est de détecter les rares γ correspondant aux transitions non analogues. Pour augmenter la statistique associée à la détection de ces γ, il faut augmenter la masse de l'échantillon. Mais alors, les photons γ recherchés sont noyés par les émissions Bremsstrahlung très intenses provenant des positrons. Pour remédier à ce problème il faut alors détecter ces γ de Bremsstrahlung en coïncidence avec les positrons afin de rejeter ces évènements [101].

Pour les émetteurs β avec $\mathrm{T}_z = 0$ et dont la masse $A \geqslant 62$ (on fait référence ici aux transitions les mieux connues [70]), la densité de niveaux devient plus élevée dans le noyau fils et certains états 1^+ commencent à être présents dans la fenêtre de Q_β. Chacune de ces transitions peut contribuer de façon très faible à la demi-vie totale mais combinées entre elles, elles vont y contribuer de façon significative. Les deux mesures les plus récentes de tels rapports d'embranchement ont été réalisées pour le ^{62}Ga [102, 103]. Ce rapport d'embranchement a été évalué à 99.858(8)%.

Enfin, la dernière catégorie est celle de noyaux émetteurs β avec $\mathrm{T}_z = -1$. Dans ce dernier cas le noyau fils est impair-impair et peut avoir plusieurs états 1^+ à basse énergie d'excitation. Ces états vont donc permettrent des transitions de type Gamow-Teller qui contribueront autant voire plus à la demi-vie totale que la décroissance super-permise. Les deux seuls cas connus pour lesquels la transition

$(0^+, \mathrm{T} = 1) \rightarrow (0^+, \mathrm{T} = 1)$ contribue à plus de 90% sont les décroissances du ^{14}O et du ^{34}Ar (voir la référence [70] pour une discussion plus détaillée).

Chapitre 8

Calcul de la correction δ_C dans HTDA

Contenu du chapitre

Introduction

8.1 Quel modèle pour la description de la transition ?

8.1.1 Position du problème

- Problème de la dépendance par rapport à l'état $|\Phi_0\rangle$
- Problèmes liés à la description des noyaux impairs-impairs et/ou avec $N \neq Z$

8.1.2 Choix du modèle

- Principe
- Construction de la base à N corps
- Lisibilité des fonctions d'onde corrélées
- Calcul de la correction δ_C

8.2 Résultats

8.2.1 Description des fonctions d'onde des noyaux initial et final

- Caractéristiques des bases à N corps
- Structure des fonctions d'onde en fonction de l'intensité de $\hat{V}_\delta$
- Détail de la structure en isospin des états corrélés

8.2.2 Mélange d'isospin et correction δ_C

- Mélange d'isospin des fonctions d'onde corrélées
- Impact des corrélations d'appariement sur la correction δ_C

8.2.3 Comparaison avec d'autres modèles

Introduction

Ce chapitre rassemble la dernière partie de ce travail de thèse qui porte sur l'évaluation de la correction de mélange d'isospin δ_C à l'élément de matrice de transition superpermise de Fermi dans le cadre de l'approche HTDA.

Dans un travail antérieur [104], nous avons mené cette étude avec l'ancienne méthode de troncation de l'espace à N corps, pour la transition β^+ du ^{50}Mn. Les résultats obtenus alors ont pu être reproduits avec la nouvelle prescription de construction des bases à N corps. Seuls les nouveaux résultats utilisant cette prescription seront présentés dans ce chapitre (puisqu'ils sont comparables aux précédents). Nous ferons parfois référence néanmoins au travail antérieur [104] à titre de complément.

Dans notre approche, nous adopterons la définition de la correction δ_C du chapitre précédent,

$$\delta_C = 1 - \frac{1}{2}|\langle \Psi_f | \hat{T}_+ | \Psi_i \rangle|^2 \,, \tag{8.1}$$

déduite de l'expression (7.60) pour des états $|\Psi_i\rangle$ et $|\Psi_f\rangle$ dominés par une valeur d'isospin T = 1 (i.e. $|M_F|_0^2 = 2$).

Dans le contexte de l'approche HTDA, nous verrons qu'il n'est pas possible de traiter l'état initial et l'état final indépendamment mais qu'il faut, au contraire, fournir une description simultanée de ces deux états pour que notre approche soit suffisante. Nous verrons par ailleurs qu'une telle description cohérente de l'état initial et de l'état final est nécessaire pour traiter correctement la symétrie d'isospin dans le système total formé par les deux noyaux. Ces considérations seront abordées dans la première section de ce chapitre.

Dans un deuxième temps, le cas concret de la transition β^+ du ^{50}Mn sera examiné. L'impact des corrélations d'appariement sur la correction δ_C sera étudié en lien avec les études des parties I et II de cette thèse.

8.1 Quel modèle pour la description de la transition ?

8.1.1 Position du problème

◦ Problème de la dépendance par rapport à l'état $|\Phi_0\rangle$ dans le cas d'une transition

Dans HTDA, la dépendance du hamiltonien dans l'état $|\Phi_0\rangle$ a trois origines distinctes. La première est la dépendance en densité de l'interaction effective $\hat{V}$ et n'est pas spécifique à l'approche HTDA. Une deuxième dépendance dans le choix de l'état $|\Phi_0\rangle$ vient de la troncation des espaces à un et N corps pour construire l'interaction résiduelle. En effet, même si l'on travaillait avec une interaction effective indépendante de la densité (comme la force de Skyrme SV par exemple), la base à N corps ne serait pas complète du fait de ces deux troncations. Le choix de l'état de référence pour les excitations particule-trou n'est alors plus sans conséquence. Enfin, la dernière cause de dépendance en $|\Phi_0\rangle$ du hamiltonien HTDA réside dans la non cohérence de l'interaction effective $\hat{V}$ entre le champ moyen et la partie résiduelle.

En effet, rappelons l'expression du hamiltonien dans le cadre de l'approche HTDA, lorsqu'on approche l'interaction résiduelle par le produit normal pour $|\Phi_0\rangle$ (voir les sections 2.1.1 et 2.1.3) d'une force schématique $\hat{W}$ (e.g. une force $\hat{\delta}$ pour la description de l'appariement) :

$$\hat{H} = \hat{K} + \hat{V} \approx \langle\Phi_0|\hat{H}|\Phi_0\rangle + \hat{H}_{\text{IQP}} + \hat{V}_{\text{res}}^{app.} \,, \tag{8.2}$$

avec

$$\hat{H}_{\text{IQP}} \equiv \hat{H}_{\text{IQP}}[\Phi_0] = \hat{H}_0 - \langle\Phi_0|\hat{H}_0|\Phi_0\rangle \tag{8.3}$$

$$\text{et} \quad \hat{V}_{\text{res}}^{app.} \equiv \hat{V}_{\text{res}}^{app.}[\Phi_0] = \hat{W} - \hat{\overline{W}} + \langle\Phi_0|\hat{W}|\Phi_0\rangle \,, \tag{8.4}$$

où $\hat{\overline{W}}$ est la réduction à un corps de l'interaction $\hat{W}$ pour $|\Phi_0\rangle$ et $\hat{H}_0 = \hat{K} + \hat{U}$. On voit clairement dans ces expressions, que le hamiltonien de quasi-particules indépendantes et l'interaction résiduelle dépendent du choix cohérent que l'on fait pour le déterminant de Slater $|\Phi_0\rangle$. Une dépendance explicite dans l'état $|\Phi_0\rangle$ sera présente dans l'interaction résiduelle dès lors que l'on ne définit pas $\hat{V}_{\text{res}}^{app.}$ à partir de la même force $\hat{V}$ qui sert à définir le potentiel moyen $\hat{U}$ dans $\hat{H}_0$ (i.e. dès lors que $\hat{W} \neq \hat{V}$).

Dans un tel contexte, si on veut décrire les deux noyaux de façon cohérente avec le même hamiltonien total, il faudra choisir le même quasi-vide $|\Phi_0\rangle$ dans les deux cas. Ceci est nécessaire dès lors que l'on veut calculer correctement l'élément de matrice de la transition entre ces deux états nucléaires.

La question qui reste alors est celle du choix du quasi-vide $|\Phi_0\rangle$. Comme nous allons le voir dans le paragraphe suivant, ce choix va nous être imposé par des contraintes de symétrie d'isospin et de renversement du sens du temps.

◦ Problèmes liés à la description des noyaux impairs-impairs et/ou avec $N \neq Z$

Hormis le problème de cohérence du hamiltonien pour la description de toute transition d'un état nucléaire vers un autre, quels qu'il soient, deux autres problèmes se posent lorsque l'on souhaite décrire l'état initial et l'état final d'une décroissance β.

En effet, dans le cas particulier de la transition considérée, le noyau initial est un noyau impair-impair $N = Z$ et le noyau final est pair-pair avec $N \neq Z$. Dans les deux cas, un problème se pose vis-à-vis des symétries d'isospin et/ou de renversement du sens du temps.

Problème des noyaux $N \neq Z$

Dans notre travail, le déterminant de Slater $|\Phi_0\rangle$ résulte d'un calcul auto-cohérent de type HF. Comme nous l'avons déjà mentionné au chapitre 5, un tel calcul va engendrer une brisure non physique de la symétrie d'isospin. Une solution possible de ce problème est de projeter l'état HF sur des états de bon isospin comme cela a été fait dans les travaux de la référence [62] ou plus récemment par W. Satuła *et al.* [105–110].

Compte tenu de la taille des bases à N corps que l'on manipule dans HTDA, la perspective de réaliser une telle projection d'isospin est pour le moment hors de portée. Pour traiter correctement cette symétrie dans le cadre de HTDA, il est donc inapproprié de définir l'état $|\Phi_0\rangle$ à partir d'un calcul HF ou HF+BCS pour la description du noyau final, le ^{50}Cr.

Problème des noyaux impairs-impairs

Le cas des noyaux impairs-impairs pose deux problèmes, un vis-à-vis de la symétrie d'isospin, et un autre vis-à-vis du renversement du sens du temps.

Du point de vue de l'isospin, il est clair qu'une approche de type champ moyen est inadaptée à la description des noyaux impairs-impairs avec $N = Z$ et $K^\pi = 0^+$. En effet, du fait que les neutrons et les protons sont en nombre impair, on est confronté à un choix arbitraire pour la construction du détermiant de Slater, fonction d'onde d'essai pour la résolution des équations HF.

Au-dessus du dernier niveau complètement rempli (deux neutrons et deux protons), on peut choisir deux configurations conjuguées par renversement du sens du temps conduisant aux nombres quantiques $K^\pi = 0^+$. Une seule de ces deux configurations est illustrée sur la figure 8.1 (à gauche). Clairement, la configuration obtenue par renversement du sens du temps serait aussi acceptable. Ainsi, même en

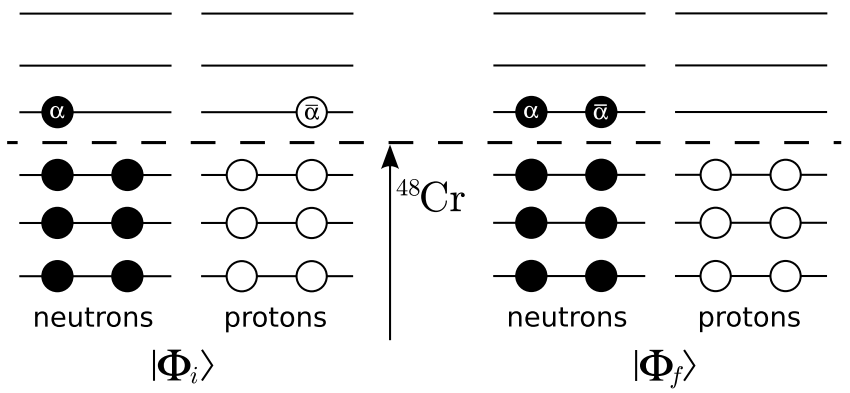


Figure 8.1 – Schéma illustratif des déterminants de plus basse énergie servant à la description du noyau initial (le ^{50}Mn à gauche) et final (le ^{50}Cr à droite).

l'absence d'interaction coulombienne, de tels déterminants de Slater ne pourront jamais avoir un bon isospin. En effet, ces deux configurations sont mélangées en isospin comme l'a montré W. Satuła [107].

Avec les notations de la figure 8.1, on peut considérer, dans la limite de symétrie d'isospin dans l'espace à un corps,

$$|\Phi^{(+)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|\Phi\rangle + |\overline{\Phi}\rangle\Big) \longrightarrow \mathrm{T}=1 \quad \text{et} \quad |\Phi^{(-)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|\Phi\rangle - |\overline{\Phi}\rangle\Big) \longrightarrow \mathrm{T}=0\,. \tag{8.5}$$

On peut donc reconstituer des états de bon isospin (dans cette limite) en construisant des états $|\Phi^{(+)}\rangle$ et $|\Phi^{(-)}\rangle$ et ainsi,

$$\hat{\mathbf{T}}^2|\Phi^{(+)}\rangle = 2|\Phi^{(+)}\rangle \quad \text{et} \quad \hat{\mathbf{T}}^2|\Phi^{(-)}\rangle = 0\,. \tag{8.6}$$

Du point de vue du renversement du sens du temps, les noyaux impairs-impairs vont également poser problème. Dans ce cas de figure, un calcul auto-cohérent de type HF va conduire à une levée de la dégénérescence de Kramers et ainsi à une *polarisation du cœur* (voir par exemple les études [111,112]). Cependant, le nombre total de fermions dans le système étant pair, on peut choisir une solution du hamiltonien paire par renversement du sens du temps. Si l'on brise la dégénérescence de Kramers au niveau HF, il ne sera pas possible de restaurer la symétrie de renversement du temps au niveau HTDA. Ceci pose un problème de cohérence avec la description du noyau final pour lequel cette symétrie est respectée.

Encore une fois, compte tenu de ces deux symétries, un calcul HF ou HF+BCS est inapproprié pour la description du noyau initial, le ^{50}Mn.

La question est maintenant de savoir comment construire un déterminant de Slater $|\Phi_0\rangle$ pertinent pour HTDA et qui satisfasse toutes ces contraintes, à savoir :

- être le même dans la description des deux noyaux pour avoir une cohérence du hamiltonien,
- préserver la dégénérescence de Kramers pour conserver la symétrie de renversement du sens du temps dans l'espace du modèle,
- conduire à des fonctions d'onde corrélées de bon isospin T = 1 dans la limite de l'absence d'interaction coulombienne pour le ^{50}Cr et au sens de (8.5) et pour le ^{50}Mn.

8.1.2 Choix du modèle

◦ Principe

Une solution possible qui permet de satisfaire à toutes les contraintes du problème consiste à prendre comme état $|\Phi_0\rangle$ le déterminant de plus basse énergie résultant d'un calcul HF (ou HF+BCS) réalisé pour le cœur pair-pair $N = Z$ commun aux deux noyaux de la transition, à savoir dans le cas de la décroissance β^+ du ^{50}Mn, le ^{48}Cr.

En faisant ce choix de $|\Phi_0\rangle$ pour la description des deux noyaux, on préserve la dégénérescence de Kramers et on n'a pas a priori de mélange non physique d'isospin. Les bases à N corps servant au calcul HTDA de chaque solution corrélée seront composées d'« excitations » $(n+2)$pnh sur $|\Phi_0\rangle$, soit en créant deux neutrons de plus que le nombre de neutrons annihilés (pour décrire le ^{50}Cr) soit en créant un neutron et un proton de plus que le nombre de neutrons et de protons annihilés (pour décrire le ^{50}Mn). Naturellement l'état $|\Phi_0\rangle$ ne fera partie d'aucune de ces bases à N corps puisqu'il ne possède pas le nombre de particules adéquat.

Le déterminant de Slater de plus basse énergie, ayant le bon nombre de particules et décrivant le ^{50}Cr est noté $|\Phi_f\rangle$. Il est défini par

$$|\Phi_f\rangle = \hat{\mathrm{n}}^\dagger_\alpha \hat{\mathrm{n}}^\dagger_{\overline{\alpha}}|\Phi_0\rangle\,, \tag{8.7}$$

avec la notation de la figure 8.1. Cet état est pair par renversement du sens du temps et sera l'état dominant dans la fonction d'onde corrélée $|\Psi_f\rangle$ dans un régime de faibles corrélations.

L'état analogue pour le ^{50}Mn devra être un état de bon isospin T = 1 en l'absence d'interaction coulombienne. D'après ce que l'on a vu au paragraphe précédent, cet état, noté $|\widetilde{\Phi_i}\rangle$, est donné par

$$|\widetilde{\Phi_i}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|\Phi_i\rangle + |\overline{\Phi_i}\rangle\Big) \quad \text{avec} \quad |\Phi_i\rangle = \hat{\mathrm{n}}^\dagger_\alpha \hat{\mathrm{p}}^\dagger_{\overline{\alpha}}|\Phi_0\rangle \,, \tag{8.8}$$

toujours avec la notation de la figure 8.1.

Les deux états $|\widetilde{\Phi_i}\rangle$ et $|\Phi_f\rangle$ jouent, dans chacune des deux bases, le rôle qui était tenu par $|\Phi_0\rangle$ dans les calculs HTDA habituels. Cependant, à la différence de ces calculs HTDA, les éléments de matrice du hamiltonien (8.2) dans les nouvelles bases (n'incluant pas l'état $|\Phi_0\rangle$) n'ont plus la même structure.

À titre d'exemple, la valeur moyenne de $\hat{H}_{\mathrm{IQP}}$ dans $|\widetilde{\Phi_i}\rangle$ et $|\Phi_f\rangle$ n'est pas nulle et vaut

$$\langle\widetilde{\Phi_i}|\hat{H}_{\mathrm{IQP}}|\widetilde{\Phi_i}\rangle = \langle\widetilde{\Phi_i}|\hat{H}_0|\widetilde{\Phi_i}\rangle - \langle\Phi_0|\hat{H}_0|\Phi_0\rangle = \epsilon^{(n)}_\alpha + \epsilon^{(p)}_\alpha = \mathcal{E}_{np} \,, \tag{8.9}$$

et

$$\langle\Phi_f|\hat{H}_{\mathrm{IQP}}|\Phi_f\rangle = \langle\Phi_f|\hat{H}_0|\Phi_f\rangle - \langle\Phi_0|\hat{H}_0|\Phi_0\rangle = 2\epsilon^{(n)}_\alpha = \mathcal{E}_{nn} \,, \tag{8.10}$$

où $\epsilon^{(n)}_\alpha$ et $\epsilon^{(p)}_\alpha$ sont les énergies individuelles neutron et proton respectivement du premier niveau innoccupé du ^{48}Cr (voir figure 8.1).

De même pour $\hat{V}_{\mathrm{res}}$, on a

$$\langle\widetilde{\Phi_i}|\hat{V}_{\mathrm{res}}|\widetilde{\Phi_i}\rangle = \langle\alpha_n\overline{\alpha_p}|\hat{v}_\delta|\widetilde{\alpha_n\overline{\alpha_p}}\rangle \,, \tag{8.11}$$

et

$$\langle\Phi_f|\hat{V}_{\mathrm{res}}|\Phi_f\rangle = \langle\alpha_n\overline{\alpha_n}|\hat{v}_\delta|\widetilde{\alpha_n\overline{\alpha_n}}\rangle \,, \tag{8.12}$$

où α_n et α_p designent les mêmes états à un corps que précédemment.

◦ Construction de la base à N corps

Dans notre travail, nous nous intéressons aux corrélations d'appariement au-delà du champ moyen décrites avec HTDA. Nous allons donc décrire l'état initial de la transition, le ^{50}Mn et l'état final, le ^{50}Cr, comme des configurations $(n+2)$pnh sur le quasi-vide $|\Phi_0\rangle$ globalement appariées. Ainsi nous ne considérerons que des créations et des destructions de paires (de tous les isospin possibles). Plus précisément, nous allons considérer des configurations de type 2p0h, 4p2h, 6p4h et 8p6h de type transfert de « paires ».

La construction des deux bases à N corps dans lesquelles on va décomposer les fonctions d'onde corrélées initiale et finale doit obéir à la même contrainte que pour les calculs HTDA de mélange d'isospin vus au chapitre 6, à savoir que l'on doit respecter la symétrie d'isospin. À cela vient s'ajouter une nouvelle exigence propre à la description de la transition β. Afin de ne pas induire un biais dans le calcul de l'élément de matrice de transition, ces deux bases doivent être *analogues* l'une de l'autre.

La notion de *bases analogues* prend son sens dans la limite de symétrie d'isospin. Dans cette situation, il faut que l'action de l'opérateur $\hat{T}_+$ sur chaque état de la base correspondant au ^{50}Mn donne un ou plusieurs états de la base du ^{50}Cr. Inversement, l'action de l'opérateur $\hat{T}_-$ sur chaque état de la base du ^{50}Cr doit engendrer un ou plusieurs états tous présents dans celle du ^{50}Mn.

Cette dernière contrainte peut être satisfaite sans une trop grande difficulté si on considère toutes les excitations particule-trou d'un ordre d'excitation donné dans une fenêtre d'énergie d'excitation donnée. Cependant cela devient beaucoup plus difficile à obtenir si l'on tronque l'espace de configurations

par une coupure sur l'énergie d'excitation individuelle comme c'est le cas dans ce travail.

Pour construire des bases à N corps rigoureusement analogues l'une de l'autre, nous allons étendre le concept de groupe d'états introduit au chapitre 5 qui nous avait permis d'obtenir des bases invariantes d'isospin. En pratique, il s'agira de construire les deux bases initiale et finale simultanément pour former des *groupes analogues*. Comme précédemment, un groupe sera défini par la donnée d'un jeu de niveaux de trous et de particules. Pour ce jeu de niveaux on fera une excitation conservant l'isospin ($\Delta \mathrm{T}_z = 0$) pour décrire le ^{50}Mn et en augmentant T_z d'une unité ($\Delta \mathrm{T}_z = 1$) pour décrire le ^{50}Cr (i.e. en créant deux neutrons de plus que le nombre de neutrons détruits).

Pour tronquer les bases initiale et finale en énergie d'excitation particule-trou, on souhaite se référer aux états $|\widetilde{\Phi_i}\rangle$ et $|\Phi_f\rangle$. Tout déterminant de Slater dont l'énergie d'excitation par rapport à $|\widetilde{\Phi_i}\rangle$ (ou $|\Phi_f\rangle$) dépasse une certaine énergie E_0^* sera rejeté de la base initiale (ou finale).

Cependant, pour appliquer ce critère en énergie, on se base en pratique sur la valeur moyenne de $\hat{H}_{\mathrm{IQP}}$ dans chacun de ces états. Or, compte tenu de la dépendance en $|\Phi_0\rangle$ de $\hat{H}_{\mathrm{IQP}}$, l'énergie de coupure E_0^* s'appliquera différemment selon la base considérée. Pour avoir la sélection des états souhaitée, il faudra rejeter ceux dont la valeur moyenne de $\hat{H}_{\mathrm{IQP}}$ dépassera une énergie E_i^* pour la base initiale et E_f^* pour la base finale, avec

$$\langle\Phi|\hat{H}_{\mathrm{IQP}}|\Phi\rangle - \langle\widetilde{\Phi_i}|\hat{H}_{\mathrm{IQP}}|\widetilde{\Phi_i}\rangle \leqslant E_0^* \qquad \Longrightarrow \qquad \langle\Phi|\hat{H}_{\mathrm{IQP}}|\Phi\rangle \leqslant E_i^* = E_0^* + \mathcal{E}_{np}\,, \tag{8.13}$$

et

$$\langle\Phi|\hat{H}_{\mathrm{IQP}}|\Phi\rangle - \langle\Phi_f|\hat{H}_{\mathrm{IQP}}|\Phi_f\rangle \leqslant E_0^* \qquad \Longrightarrow \qquad \langle\Phi|\hat{H}_{\mathrm{IQP}}|\Phi\rangle \leqslant E_f^* = E_0^* + \mathcal{E}_{nn}\,. \tag{8.14}$$

Ainsi, pour qu'un groupe soit retenu dans une base donnée, il faut qu'il soit complet (i.e. que tous les états possibles de ce groupe soient autorisés par l'énergie de coupure) et que le groupe analogue (i.e. le groupe dans l'autre base faisant intervenir les mêmes niveaux à un corps) soit complet également. Si l'une de ces deux conditions n'est pas satisfaite, les deux groupes analogues en question sont rejetés.

La taille des groupes analogues en fonction de l'ordre d'excitation et du nombre de niveaux impliqués est donnée dans le tableau 8.1.

◦ Lisibilité des fonctions d'onde corrélées

Comme nous venons de le voir, la construction de la base à N corps est faite par rapport au cœur $N = Z$ sous-jacent et non pas directement par rapport aux excitations particule-trou des états $|\widetilde{\Phi_i}\rangle$ et $|\Phi_f\rangle$. Afin d'interpréter la structure des fonctions d'onde corrélées de chaque noyau, il sera bon de réexprimer les états de chacune des bases par rapport à leur état non perturbé respectif ($|\widetilde{\Phi_i}\rangle$ et $|\Phi_f\rangle$).

Un problème se pose alors concernant le ^{50}Mn dans son état fondamental $K^\pi = 0^+$. L'état non perturbé $|\widetilde{\Phi_i}\rangle$ n'est pas un déterminant de Slater et l'état $|\overline{\Phi_i}\rangle$ est déjà une excitation 2p2h de $|\Phi_i\rangle$

$$|\overline{\Phi_i}\rangle = -\hat{\mathrm{n}}_{\overline{\alpha}}^\dagger \hat{\mathrm{p}}_\alpha^\dagger \hat{\mathrm{p}}_{\overline{\alpha}} \hat{\mathrm{n}}_\alpha |\Phi_i\rangle\,. \tag{8.15}$$

Ainsi, une excitation de type 4p4h sur $|\Phi_i\rangle$ sera de type 2p2h, 4p4h ou 6p6h sur $|\overline{\Phi_i}\rangle$. Il en va de même pour les excitations à d'autres ordres sur $|\Phi_i\rangle$.

Parmi les excitations 2p0h sur $|\Phi_0\rangle$, la configuraton de plus basse énergie (dans chaque base) correspond à $|\Phi_i\rangle$ et $|\Phi_f\rangle$, les autres seront des excitations d'une paire sur ces deux déterminants de Slater. L'ensemble des 4p2h sur $|\Phi_0\rangle$ contiendra aussi bien des 2p2h que des 3p3h ou des 4p4h sur $|\Phi_i\rangle$ et $|\Phi_f\rangle$. Ces excitations (même d'ordre impair) conduisent par construction toujours à des configurations appariées. Pour les ordres d'excitation impairs, il s'agira alors toujours de brisures/recombinaisons de

			Taille des groupes	
	N_p	N_h	Base initiale	Base finale
2p0h	1	0	1	1
4p2h	1	1	1	1
	2	1	10	9
6p4h	2	1	1	1
	3	1	10	9
	2	2	10	9
	3	2	126	110
8p6h	2	2	1	1
	3	2	10	9
	4	2	126	110
	2	3	10	9
	3	3	126	110
	4	3	1716	1519

TABLEAU 8.1 – Taille des différents groupes pour chaque base selon l'ordre d'excitation et le nombre de niveaux de trous N_h et de particules N_p impliqués. La base initiale correspond à un isospin conservé ($\Delta \mathrm{T}_z = 0$) et la base finale, à un décalage en isospin $\Delta \mathrm{T}_z = 1$ par rapport au cœur pair-pair sous-jacent.

paires. Pour les excitations 6p4h sur $|\Phi_0\rangle$, il en va de même. Elles conduisent à des excitations de type 4p4h, 5p5h ou 6p6h sur $|\Phi_i\rangle$ et $|\Phi_f\rangle$.

Ainsi, pour avoir toutes les excitations jusqu'aux triples paires sur $|\Phi_i\rangle$ et $|\Phi_f\rangle$, il faut inclure les excitations d'ordre 8p6h sur $|\Phi_0\rangle$. Cependant, si l'on veut toutes les excitations de triples paires sur $|\overline{\Phi_i}\rangle$, il faut également prendre en compte les excitations de type 10p8h sur $|\Phi_0\rangle$. En pratique, ces configurations d'ordre élevé ne seront pas prises en compte dans notre modèle. En effet, l'impact des configurations de type 8p6h sur $|\Phi_0\rangle$ est faible comme on le verra par la suite.

Afin d'obtenir une lisibilité satisfaisante de la fonction d'onde corrélée du noyau initial, nous allons donner un sens à la notion d'ordre d'excitation par rapport à $|\widetilde{\Phi_i}\rangle$. Pour ce faire, une configuration donnée sera comparée à $|\Phi_i\rangle$ et également à $|\overline{\Phi_i}\rangle$. Par convention, l'ordre d'excitation de cette configuration par rapport à $|\widetilde{\Phi_i}\rangle$ sera pris comme le minimum des ordres d'excitation déduits des deux comparaisons précédentes. Il est clair qu'une configuration qui sera vue comme une excitation de type 4p4h sur $|\Phi_i\rangle$ par exemple et 2p2h sur $|\widetilde{\Phi_i}\rangle$ n'est pas une excitation dynamique. Cette distinction est uniquement due au renversement du sens du temps et n'est donc pas pertinente dans notre approche. Il est bon de noter ici que ce problème est très spécifique aux solutions $K^\pi = 0^+$ des noyaux impairs-impairs. Un schéma illustratif d'une telle situation est présenté sur la figure 8.2.

◦ CALCUL DE LA CORRECTION δ_C

Une fois les bases à N corps construites, on diagonalise le hamiltonien (8.2) dans chacune d'elle pour obtenir les fonctions d'onde corrélées initiale et finale $|\Psi_i\rangle$ et $|\Psi_f\rangle$. Le calcul de la correction δ_C,

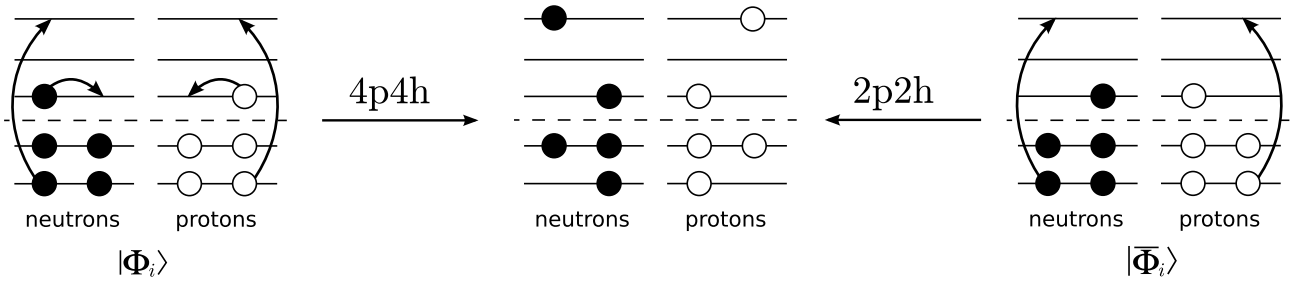


FIGURE 8.2 – Schéma illustratif du problème de la définition de l'ordre d'excitation par rapport à $|\widetilde{\Phi_i}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\Phi_i\rangle + |\overline{\Phi_i}\rangle\right)$. L'état central peut être vu comme une excitation 4p4h par rapport à $|\Phi_i\rangle$ ou 2p2h par rapport à $|\overline{\Phi_i}\rangle$. Dans ce genre de situation l'ordre d'excitation par rapport à $|\widetilde{\Phi_i}\rangle$ est défini comme le plus bas des deux ordres, c'est-à-dire 2 dans cet exemple.

définie par (8.1), se ramène au calcul de l'élément de matrice de transition de Fermi

$$M_F = \langle \Psi_f | \hat{T}_+ | \Psi_i \rangle \, . \tag{8.16}$$

L'opérateur $\hat{T}_+$ est un opérateur à un corps dont les éléments de matrice entre deux déterminants de Slater construits sur la même base à un corps sont donnés par

$$\langle \Phi | \hat{T}_+ | \Phi' \rangle = \begin{cases} \langle\langle a \, ; n | \alpha \, ; p \rangle\rangle & \text{si } |\Phi'\rangle = \hat{\mathrm{p}}^\dagger_\alpha \hat{\mathrm{n}}_a |\Phi\rangle \, , \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \tag{8.17}$$

où $\langle\langle a \, ; n | \alpha \, ; p \rangle\rangle$ désigne le recouvrement des parties d'espace et de spin de la fonction d'onde du neutron dans l'état $|a\rangle$ et du proton dans l'état $|\alpha\rangle$.

Dans la limite où l'intensité de l'interaction résiduelle est nulle (absence de corrélations au-delà du champ moyen), les fonctions d'onde des noyaux initial et final correspondent aux états $|\widetilde{\Phi_i}\rangle$ et $|\Phi_f\rangle = \hat{\mathrm{n}}^\dagger_{\overline{\alpha}} \hat{\mathrm{p}}_{\overline{\alpha}} |\Phi_i\rangle$. Dans cette limite, l'élément de matrice de transition de Fermi devient,

$$M_F = \langle \Phi_f | \hat{T}_+ | \widetilde{\Phi_i} \rangle = \sqrt{2} \, \langle \Phi_f | \hat{T}_+ | \Phi_i \rangle = \sqrt{2} \, \langle\langle \overline{\alpha} \, ; n | \overline{\alpha} \, ; p \rangle\rangle = \sqrt{2} \, \langle\langle \alpha \, ; n | \alpha \, ; p \rangle\rangle \, , \tag{8.18}$$

et la correction δ_C s'identifie à

$$\delta_C = 1 - |\langle\langle \alpha \, ; n | \alpha \, ; p \rangle\rangle|^2 \, . \tag{8.19}$$

Dans le cas du ^{48}Cr où le champ moyen a été obtenu dans les mêmes conditions que pour les études de mélange d'isospin du chapitre 6 et avec un traitement exact du potentiel d'échange coulombien dans le champ moyen, on obtient

$$\delta_C = 0.097 \, \% \, . \tag{8.20}$$

8.2 Résultats

Comme nous l'avons déjà dit, la description dans HTDA des deux noyaux initial et final que sont le ^{50}Mn et le ^{50}Cr est faite à partir d'un calcul de champ moyen HF+BCS effectué pour le cœur pair-pair sous-jacent de ^{48}Cr. Ce champ moyen est obtenu exactement dans les mêmes conditions numériques que pour les études du chapitre 6.

	Base initiale	Base finale
2p0h	14	14
4p2h	1236	1115
6p4h	3944	3476
8p6h	405	359
2p2h	245	245
3p3h	224	224
4p4h	2492	2186
5p5h	1428	1428
6p6h	1185	860
7p7h	16	16
8p8h	8	4
Total	5599	4964

TABLEAU 8.2 – Tailles des bases pour les noyaux initial et final. Le détail en ordre d'excitation est donné par rapport à $|\Phi_0\rangle$ (partie supérieure) et par rapport à $|\widetilde{\Phi_i}\rangle$ et $|\Phi_f\rangle$ (partie inférieure). La taille totale inclut naturellement les états $|\widetilde{\Phi_i}\rangle$ et $|\Phi_f\rangle$.

8.2.1 Description des fonctions d'onde des noyaux initial et final

◦ CARACTÉRISTIQUES DES BASES À N CORPS

Dans notre modèle, l'espace de configuration est tronqué avec une énergie de coupure sur les énergies d'excitation particule-trou de $E_0^* = 3\hbar\omega = 33.845$ MeV fm^3. Dans chacune de ces bases, cela se traduit par une énergie de coupure sur la valeur moyenne de $\hat{H}_{\text{IQP}}$ de $E_i^* = E_0^* + \mathcal{E}_{np}$ et $E_f^* = E_0^* + \mathcal{E}_{nn}$. Dans le cas présent, on a

$$\mathcal{E}_{np} = -17.090 \text{ MeV} \qquad \text{et} \qquad \mathcal{E}_{nn} = -25.181 \text{ MeV}\,, \tag{8.21}$$

ce qui donne

$$E_i^* = 16.754 \text{ MeV} \qquad \text{et} \qquad E_f^* = 8.664 \text{ MeV}\,. \tag{8.22}$$

Pour de telles énergies de coupure, on obtient les tailles données dans le tableau 8.2. On remarque une légère dissymétrie entre les deux noyaux dans les tailles de base pour certains ordres d'excitation ainsi que pour le nombre total. Ceci est un effet de type combinatoire conduisant à des nombres de configurations différents dans les deux noyaux.

Afin de sonder plus en détail la composition de chaque base en isospin, nous avons analysé leur contenu, pour chaque ordre d'excitation (allant des 2p2h jusqu'aux 6p6h) en fonction de l'ordre d'excitation des neutrons ν de la même manière que dans l'analyse du chapitre 3.

Pour le ^{50}Mn, l'ordre d'excitation des neutrons ν est défini dès lors que l'on a établi le déterminant de Slater de référence pour la définition de l'ordre d'excitation total. Ainsi, un état quelconque de la base initiale s'écrira,

$$|\Phi\rangle = \prod_{\ell=1}^{\mathcal{N}_1} \hat{\mathrm{a}}^\dagger_{\alpha_\ell} \prod_{\ell=\mathcal{N}_1}^{1} \hat{\mathrm{a}}_{a_\ell} |\Phi_i\rangle = \prod_{\ell=1}^{\mathcal{N}_2} \hat{\mathrm{a}}^\dagger_{\alpha_\ell} \prod_{\ell=\mathcal{N}_2}^{1} \hat{\mathrm{a}}_{a_\ell} |\overline{\Phi_i}\rangle\,, \tag{8.23}$$

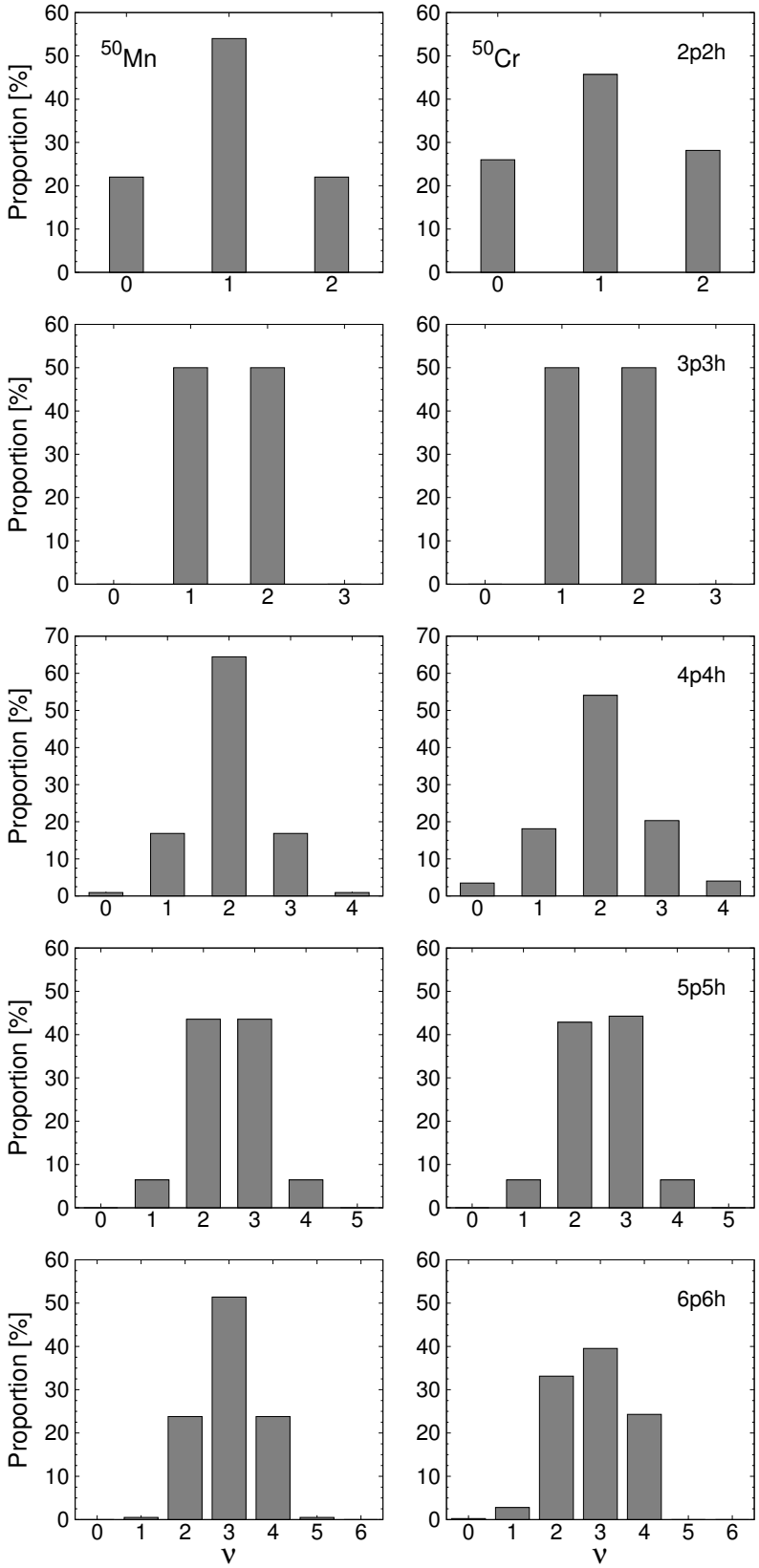


FIGURE 8.3 – Structure en isospin des bases à N corps initiale (à gauche) et finale (à droite) pour les configurations dont l'ordre d'excitation va de 2p2h à 6p6h par rapport à $|\widetilde{\Phi_i}\rangle$ et $|\Phi_f\rangle$.

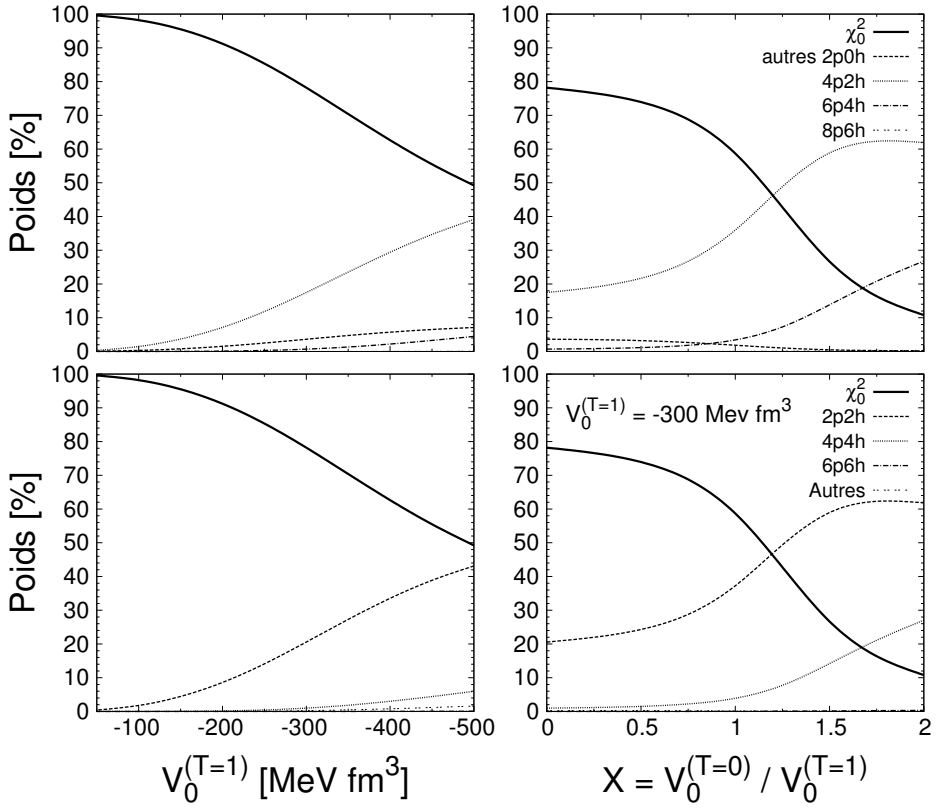


FIGURE 8.4 – Évolution de la structure des fonctions d'onde corrélées initiale et finale en fonction de l'intensité de l'interaction résiduelle $\hat{V}_\delta$ dans le canal d'isospin T = 1 pour $X = 0$ (à gauche) et en fonction de X pour $V_0^{(\mathrm{T}=1)} = -300$ MeV fm^3 (à droite). La structure des fonctions d'onde est la même pour le noyau initial (^{50}Mn) et le noyau final (^{50}Cr). Elle est présentée par rapport au cœur $N = Z$ (en haut) et par rapport aux états non perturbés (en bas).

où $\aleph_1$ (resp. $\aleph_2$) est l'ordre d'excitation de $|\Phi\rangle$ par rapport à $|\Phi_i\rangle$ (resp. $|\overline{\Phi_i}\rangle$). L'ordre d'excitation $\aleph_1$ (resp. $\aleph_2$) est la somme d'un ordre d'excitation des neutrons ν_1 (resp. ν_2) et des protons π_1 (resp. π_2).

Ainsi, l'ordre d'excitation des neutrons que l'on retiendra pour notre analyse sera donné par

$$\nu = \begin{cases} \nu_1 & \text{si } \aleph_1 \leqslant \aleph_2 \\ \nu_2 & \text{si } \aleph_1 > \aleph_2 \,. \end{cases} \tag{8.24}$$

La structure détaillée des deux bases à N corps en fonction de ν est présentée sur la figure 8.3. On peut remarquer sur cette figure des distributions en ν symétriques autour des valeurs centrales $\nu_{\max}/2$ pour la base du ^{50}Mn. Pour la base du ^{50}Cr, ces distributions sont légèrement dissymétriques. Cela vient du fait que l'on utilise une énergie de coupure globale E_0^* pour tous les déterminants de Slater sans distinction de la partie neutron et de la partie proton de l'excitation. De plus, on effectue des excitations ne conservant pas T_z ($\Delta \mathrm{T}_z = 1$). Ces deux faits cumulés entraînent la dissymétrie dans les distributions en ν que l'on observe sur la colonne de droite de la figure 8.3.

◦ STRUCTURE DES FONCTIONS D'ONDE EN FONCTION DE L'INTENSITÉ DE $\hat{V}_\delta$

On s'intéresse maintenant à l'évolution de la structure des fonctions d'onde corrélées obtenues avec HTDA en fonction de l'intensité de la force $\hat{V}_\delta$ responsable des corrélations d'appariement au-delà du

champ moyen. Cette évolution est présentée sur la figure 8.4.

Les deux figures supérieures présentent la structure des fonctions d'onde corrélées en termes d'excitations par rapport au cœur de ^{48}Cr. Seules les configurations dominantes sont mises en valeur. Les deux figures inférieures présentent cette structure en termes d'excitations par rapport à $|\widetilde{\Phi_i}\rangle$ ou $|\Phi_f\rangle$ pour les configurations dominantes. Parmi les configurations de type 2p0h, nous avons distingué l'état de plus basse énergie ($|\widetilde{\Phi_i}\rangle$ ou $|\Phi_f\rangle$).

Dans ces figures, on ne fait jamais référence explicitement aux noyaux considérés. En fait, les deux fonctions d'onde présentent des structures très proches que se soit par rapport au cœur $N = Z$ ou par rapport à l'état non perturbé. Les différences observées entres les deux noyaux n'excèdent jamais 1%, pour chaque ordre d'excitation indépendamment. Ce résultat constitue en soi une première évidence de l'invariance de chaque base par rapport à l'isospin. Autrement dit, à l'isospin près, les deux noyaux considérés doivent être dans des états corrélés analogues et cela doit se traduire par une similitude des fonctions d'onde corrélées (à condition que les bases soient construites convenablement). Cette constatation met en lumière également que notre choix de définition de l'ordre d'excitation pour le ^{50}Mn par rapport à $|\widetilde{\Phi_i}\rangle$ est pertinent.

Les figures inférieures présentent des comportements de la structure des fonctions d'onde corrélées assez proches de ce que l'on avait appris dans l'étude des noyaux pairs-pairs $N = Z$ (voir le chapitre 3). En présence du canal T = 1 de l'interaction résiduelle $\hat{V}_\delta$ uniquement, on obtient une dépopulation lente et régulière du quasi-vide qui se fait principalement au profit des excitations 2p2h qui sont des transferts de simples paires. Les excitations 4p4h sont beaucoup plus faibles, toutes les autres sont négligeables.

En fonction du canal T = 0, les transferts de simples paires vont dominer dans la fonction d'onde au-delà de $X \sim 1$. Les doubles paires jouent un rôle plus important qu'en fonction de $V_0^{(\mathrm{T}=1)}$ mais toutes les autres restent négligeables.

Il est également intéressant de noter que seuls les ordres d'excitation pairs interviennent de façon appréciable dans la fonction d'onde. L'interaction $\hat{V}_\delta$ favorisant les transferts de paires, les configurations 3p3h, 5p5h et 7p7h, bien qu'importantes en nombre, jouent un rôle négligeable dans la physique de l'appariement.

◦ Détail de la structure en isospin des états corrélés

Nous allons maintenant étudier l'influence de chaque canal d'isospin de l'interaction résiduelle $\hat{V}_\delta$ sur le contenu en isospin des fonctions d'onde corrélées, analysé par rapport à l'ordre d'excitation des neutrons ν. L'influence du canal T = 1 de $\hat{V}_\delta$ est représentée sur la figure 8.5 avec une intensité typique de $V_0^{(\mathrm{T}=1)} = -300$ MeV fm^3. L'allure de la distribution en ν est toujours la même quelle que soit l'intensité $V_0^{(\mathrm{T}=1)}$. La figure 8.7 présente le rôle du canal T = 0 de $\hat{V}_\delta$ relativement au canal T = 1 également pour $V_0^{(\mathrm{T}=1)} = -300$ MeV fm^3. Pour chacune de ces figures, le cas du ^{50}Mn est présenté sur la colonne de gauche tandis que celui du ^{50}Cr concerne la colonne de droite.

Sur la figure 8.5, on remarque que les distributions en ν du ^{50}Mn sont toujours centrées sur la valeur $\nu_{\max}/2$. Cette valeur centrale est, en outre, toujours favorisée. Contrairement à ce l'on avait vu au chapitre 3 pour les noyaux $N = Z$, on ne constate pas de rééquilibrage des différentes valeurs de ν, même par pallier (comme nous l'avions constaté sur la figure 3.2). Cette différence s'explique par le fait que, au premier ordre des perturbations, les configurations favorisées sont celles représentées sur la figure 8.6 (en haut). Parmi les excitations de type 2p2h, les configurations $\nu = 0$ et $\nu = 2$ sont défavorisées par rapport aux configurations $\nu = 1$ (cf. figure. 8.6) Il en va de même pour les configurations d'ordre supérieur. Enfin, on remarque que les configurations d'un ordre ν donné, supérieur à la valeur centrale

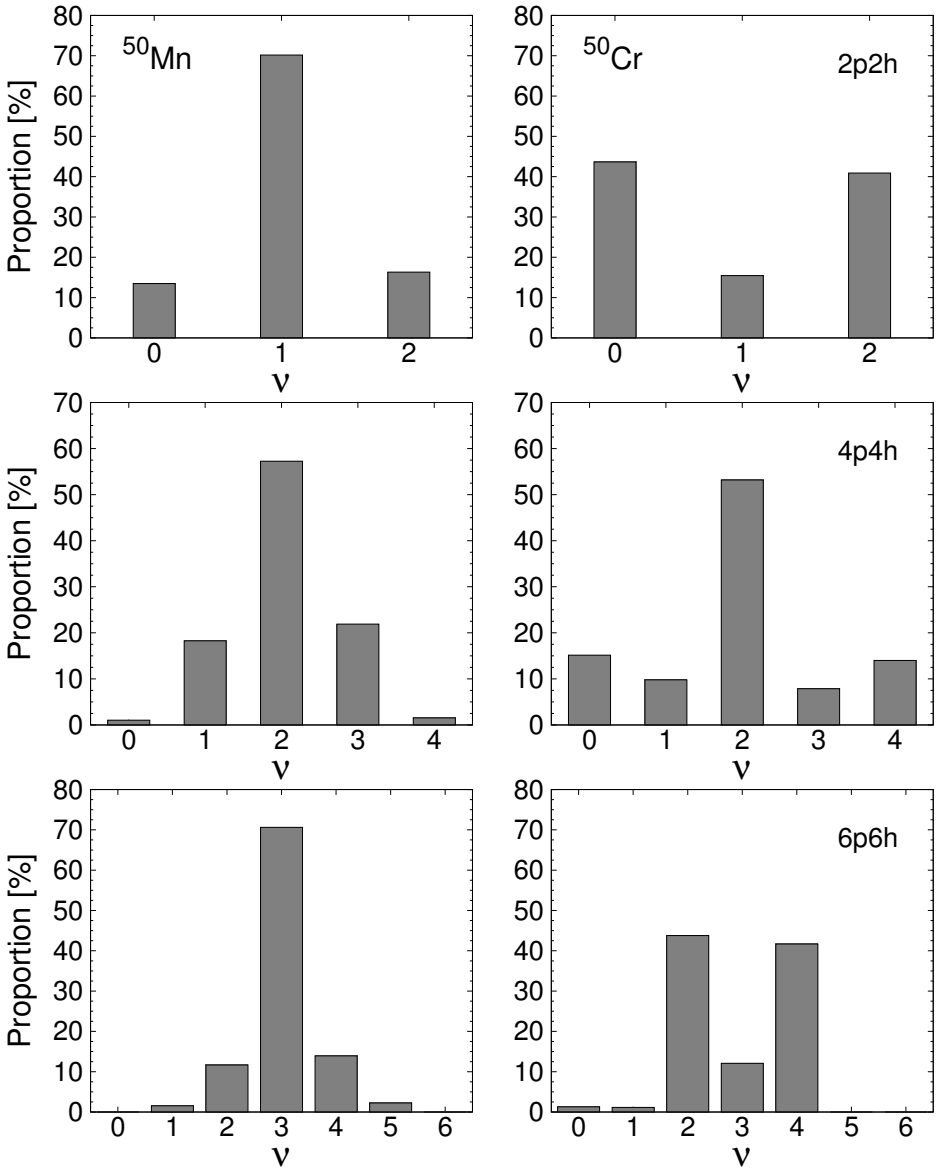


FIGURE 8.5 – Structure en isospin des fonctions d'onde corrélées initiale et finale, détaillées en ordre d'excitation des neutrons ν, en présence d'interaction résiduelle $\hat{V}_\delta$ dans le canal d'isospin T = 1 seul pour $V_0^{(\mathrm{T}=1)} = -300$ MeV fm^3.

$\nu_{\max}/2$, sont légèrement favorisées par rapport à la configuration « miroir » ($\nu' = \nu_{\max} - \nu$). Ceci s'explique par les différences de spectre à un corps des neutrons et des protons comme cela a été discuté au chapitre 3. L'écart en énergie entre les niveaux occupés et inoccupés est plus important pour les protons que pour les neutrons, ce qui explique que les excitations de protons soient légèrement défavorisées.

Pour le ^{50}Cr, on remarque que la valeur centrale de ν est défavorisée parmi les excitations de type 2p2h et 6p6h. En revanche, $\nu = 2$ est favorisée pour les excitations de type 4p4h. Ceci s'explique assez simplement encore une fois par un raisonnement perturbatif au premier ordre. Pour les excitations de type 2p2h, les configurations favorisées sont représentées sur la figure 8.6 (en bas). Exciter une paire nn (au minimum, du niveau α vers le niveau β) ou une paire pp (au minimum, du niveau a vers le niveau α) est toujours moins coûteux en énergie particule-trou que l'excitation d'une paire np (au minimum,

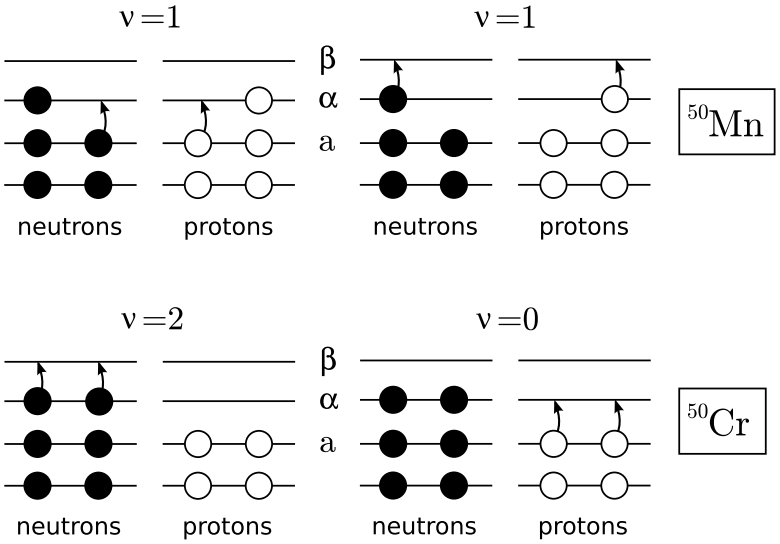


FIGURE 8.6 – Schéma illutratif des excitations de paires les moins coûteuses en énergie d'excitation particule-trou pour chacun des deux noyaux. L'espacement des niveaux est supposé régulier. Pour le ^{50}Mn (en haut), l'excitation d'une paire nn ($\nu = 2$) ou d'une paire pp ($\nu = 0$) nécessiterait de passer au minimum, du niveau a vers le niveau β et est donc défavorisée par rapport aux deux excitations de paires np ($\nu = 1$) représentées ici. Pour le ^{50}Cr (en bas), c'est l'inverse. La paire np la moins coûteuse en énergie d'excitation implique les niveaux a et β et est donc défavorisée par rapport aux transferts de paires nn et pp schématisés ici.

du niveau a vers le niveau β). Pour les excitations de type 4p4h, la contribution dominante, au premier ordre des perturbations sera tout simplement l'excitation simultanée des deux configurations $\nu = 0$ et $\nu = 2$ de la figure 8.6 (partie inférieure), ce qui donne bien $\nu = 2$. Pour les excitations de type 6p6h, les trois valeurs centrales de ν sont majoritairement composées d'une paire nn et de deux paires pp (pour $\nu = 2$), d'une paire nn, d'une paire np et d'une paire pp (pour $\nu = 3$) et d'une paire pp et de deux paires nn (pour $\nu = 4$). Les configurations $\nu = 3$ sont donc défavorisées par rapport aux deux autres à cause de l'excitation de paires np par le même mécanisme que celui utilisé pour les excitations 2p2h.

Lorsque l'on considère une intensité de plus en plus importante dans le canal T = 0, on va favoriser, de façon générale, la valeur centrale de ν. Cette tendance apparaît très clairement sur la figure 8.7 pour le ^{50}Mn qui présente la même allure que le ^{48}Cr vu au chapitre 3.

Pour le ^{50}Cr, la tendance est la même pour les configurations de type 2p2h et 4p4h avec toutefois quelques différences pour ces dernières. On remarque en effet une hausse importante des configurations $\nu = 1$ et $\nu = 3$ vers $X = 0.8$. Au-delà de $X = 1$, le poids de ces configurations décroît et ce sont les configurations avec $\nu = 2$ qui l'emportent. Enfin, pour les configurations d'ordre 6p6h, on observe un comportement beaucoup plus compliqué qui ne semble pas être a priori explicable avec des mécanismes simples. Les configurations $\nu = 4$, parmi les plus importantes à $X = 0$ diminuent de façon monotone à mesure que X augmente. À partir de $X \sim 1$, les configurations $\nu = 2$ et $\nu = 3$ sont les seules à contribuer à la fonction d'onde avec une prépondérance des configurations $\nu = 2$.

8.2.2 Mélange d'isospin et correction δ_C

◦ MÉLANGE D'ISOSPIN DES FONCTIONS D'ONDE CORRÉLÉES

Le ^{50}Mn est un noyau où $T_0 = 0$ (noyau $N = Z$). Expérimentalement, son état fondamental est un état d'isospin T = 1. Dans HTDA, nous avons réalisé un test dans lequel on prenait en compte,

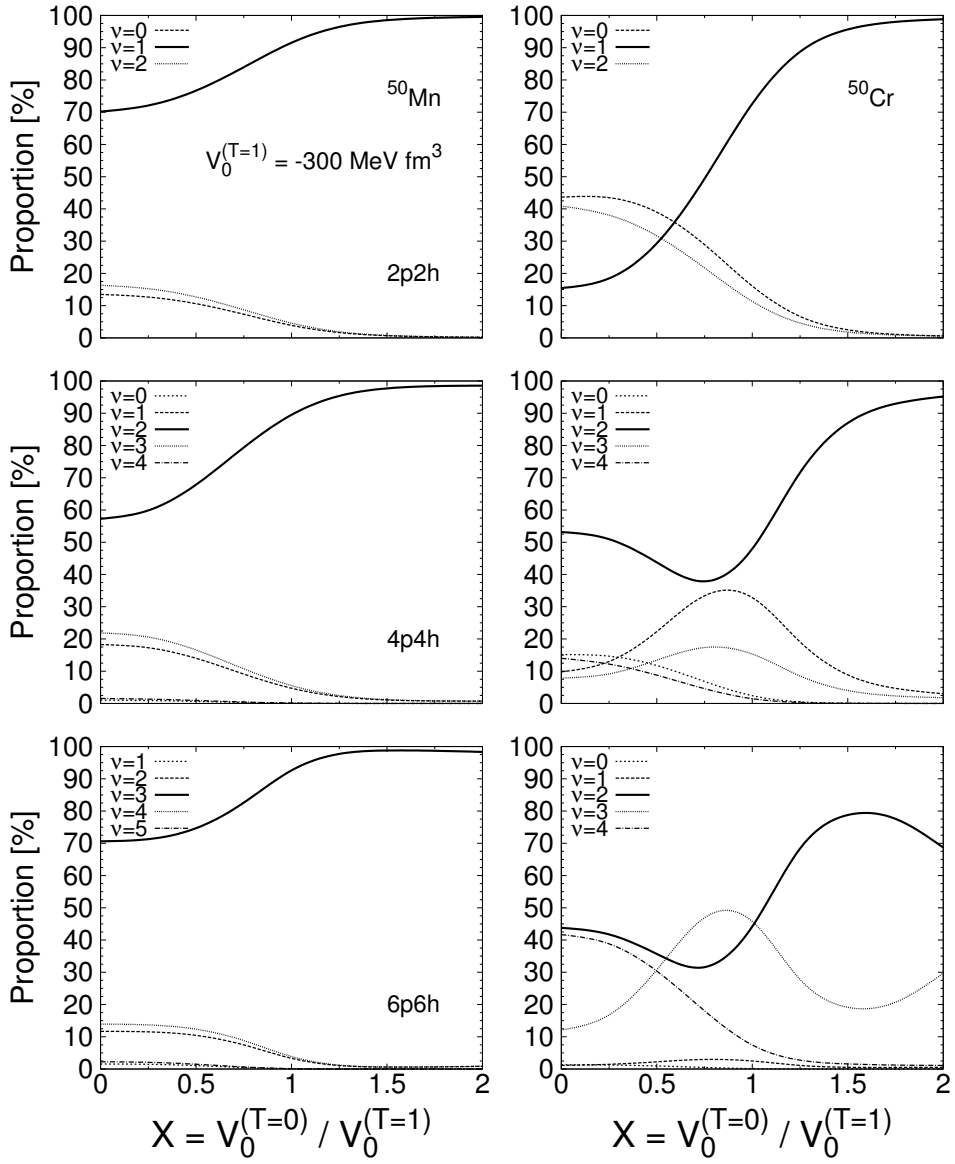


FIGURE 8.7 – Évolution de la structure des fonctions d'onde corrélées initiale et finale, détaillée en ordre d'excitation des neutrons ν, en fonction de l'intensité de l'interaction résiduelle $\hat{V}_\delta$ dans le canal d'isospin T = 0 pour $V_0^{(\mathrm{T}=1)} = -300$ MeV fm^3.

lors de la contruction de la base, tous les états de type $|\Phi^{(+)}\rangle$ et tous les états de type $|\Phi^{(-)}\rangle$ (voir chapitre 2). Par construction, les états $|\Phi^{(+)}\rangle$ sont tous pairs par renversement du sens du temps tandis que les $|\Phi^{(-)}\rangle$ sont impairs. Le hamiltonien du système, préservant la symétrie de renversement du sens du temps, ne couple jamais un état $|\Phi^{(+)}\rangle$ avec un état $|\Phi^{(-)}\rangle$. Comme on l'a vu au début de ce chapitre, la combinaison (+) appliquée à l'état $|\Phi_i\rangle$ donne un état T = 1 (dans la limite sans interaction coulombienne) et la combinaison (−) donne un état T = 0. Nous avons pu vérifier que ce calcul HTDA donne, comme état fondamental, un état T = 1 composé uniquement d'états $|\Phi^{(+)}\rangle$.

Pour évaluer le mélange d'isospin dans un tel noyau où $\mathrm{T}_d = \mathrm{T}_0 + 1$ il faut tenir compte des deux valeurs voisines de T en appliquant les formules approchées (4.54) développées au chapitre 4. Cela implique nécessairement de connaître la valeur moyenne de $\hat{\mathbf{T}}^4$ dans la fonction d'onde corrélée. En

fait, si l'on essaie d'évaluer le mélange d'isospin avec $\hat{\mathbf{T}}^2$ uniquement, en ne tenant compte par exemple que du couplage avec la composante d'isospin $\mathrm{T} = \mathrm{T}_0$, on va surestimer de façon totalement irréaliste la probabilité dominante $P_\Psi(\mathrm{T}_d)$ à tel point qu'elle va excéder 100% conduisant alors à un mélange d'isospin α^2 négatif !

Ainsi, l'expression du mélange d'isospin pour le ^{50}Mn, évaluée avec $\hat{\mathbf{T}}^2$ et $\hat{\mathbf{T}}^4$, est donnée par

$$\alpha^2\left(^{50}\mathrm{Mn}\right) = 1 - \frac{3}{4}\langle\hat{\mathbf{T}}^2\rangle + \frac{1}{8}\langle\hat{\mathbf{T}}^4\rangle\,. \tag{8.25}$$

Le ^{50}Cr est un noyau avec $\mathrm{T}_d = \mathrm{T}_0 = 1$. Pour évaluer le mélange d'isospin dans son état fondamental, il suffit en principe de calculer la valeur moyenne de $\hat{\mathbf{T}}^2$. Cependant par souci de cohérence, nous l'évaluerons également avec $\hat{\mathbf{T}}^2$ et $\hat{\mathbf{T}}^4$ en appliquant la formule (4.45) avec $n = 2$.

Par conséquent, l'expression du mélange d'isospin pour le ^{50}Cr sera

$$\alpha^2\left(^{50}\mathrm{Cr}\right) = \frac{9}{20}\langle\hat{\mathbf{T}}^2\rangle - \frac{1}{40}\langle\hat{\mathbf{T}}^4\rangle - \frac{4}{5}\,. \tag{8.26}$$

Les mélanges d'isospin calculés dans les fonctions d'onde corrélées initiale et finale sont présentés sur la figure 8.8. Ces mélanges sont calculés dans trois situations repérées dans la légende par (1), (2) et (3). La situation (1) correspond à un traitement exact de l'interaction coulombienne dans le champ moyen et en l'absence d'interaction coulombienne dans le canal résiduel. La situation (2) correspond à un traitement approché de l'interaction de Coulomb dans le champ moyen via l'approximation de Slater et toujours en l'absence d'interaction coulombienne dans le canal résiduel. Enfin, la dernière situation, correspond à la prise en compte globale et exacte de l'interaction de Coulomb.

Comme nous l'avons déjà vu dans le chapitre 6, le mélange d'isospin varie assez faiblement, compte tenu de l'échelle utilisée ici, avec l'intensité de l'interaction $\hat{V}_\delta$. Encore une fois on remarque que α^2 est plus sensible au canal $\mathrm{T} = 1$ de $\hat{V}_\delta$ qu'au canal $\mathrm{T} = 0$. Dans une plage de variation de $|V_0^{(\mathrm{T}=1)}|$ allant de 50 MeV fm^3 à 500 MeV fm^3, le mélange d'isospin varie approximativement de 0.1%, alors qu'il varie 4 fois moins lorsque l'on passe de $X = 0$ à $X = 2$, c'est-à-dire de $|V_0^{(\mathrm{T}=0)}| = 0$ MeV fm^3 à 600 MeV fm^3.

On peut remarquer également que le mélange d'isospin obtenu dans le ^{50}Mn est environ deux fois fois supérieur à celui du ^{50}Cr. Ce résultat est tout à fait cohérent avec le fait bien connu selon lequel le mélange d'isospin décroît rapidement lorsque l'on s'éloigne de la ligne $N = Z$ ou, autrement dit, qu'il décroît rapidement lorsque $|\mathrm{T}_z|$ augmente [62, 105, 113]. De plus, si l'on tient compte des échelles, on peut remarquer que l'amplitude de variation du mélange d'isospin est également deux fois plus faible pour le ^{50}Cr que pour le ^{50}Mn.

Plus précisément, on peut voir sur la figure 8.8, qu'un traitement approché de l'interaction coulombienne au niveau du champ moyen, notamment en utilisant l'approximation de Slater pour calculer le champ de Fock (situation (2)), va entraîner une sous-estimation systématique du mélange d'isospin par rapport à un traitement exact effectué dans les situations (1) et (3). Dans la situation (3), on prend en compte la contribution supplémentaire de l'interaction coulombienne à l'interaction résiduelle par rapport à la situation de référence (1). On peut alors remarquer que cette prise en compte complète de l'interaction de Coulomb augmente sensiblement le mélange d'isospin. Concernant l'interaction résiduelle coulombienne, il faut noter ici qu'elle est calculée sans méthode de renormalisation, c'est-à-dire qu'elle est considérée comme une force nue et non comme une force effective adaptée à l'espace du modèle. Dans l'hypothèse où une renormalisation de cette force peut se traduire uniquement par une augmentation de la constante de couplage e^2, on peut comprendre que son effet sur le mélange d'isospin va être amplifié. Toutefois, on peut s'attendre à ce que le facteur de renormalisation soit faiblement supérieur à 1 car l'essentiel des corrélations à longue portée est incluse dans le champ moyen. La construction d'une interaction effective de Coulomb pour le canal résiduel dépasse largement le cadre de ce travail de thèse et nous n'irons pas plus loin dans une telle discussion.

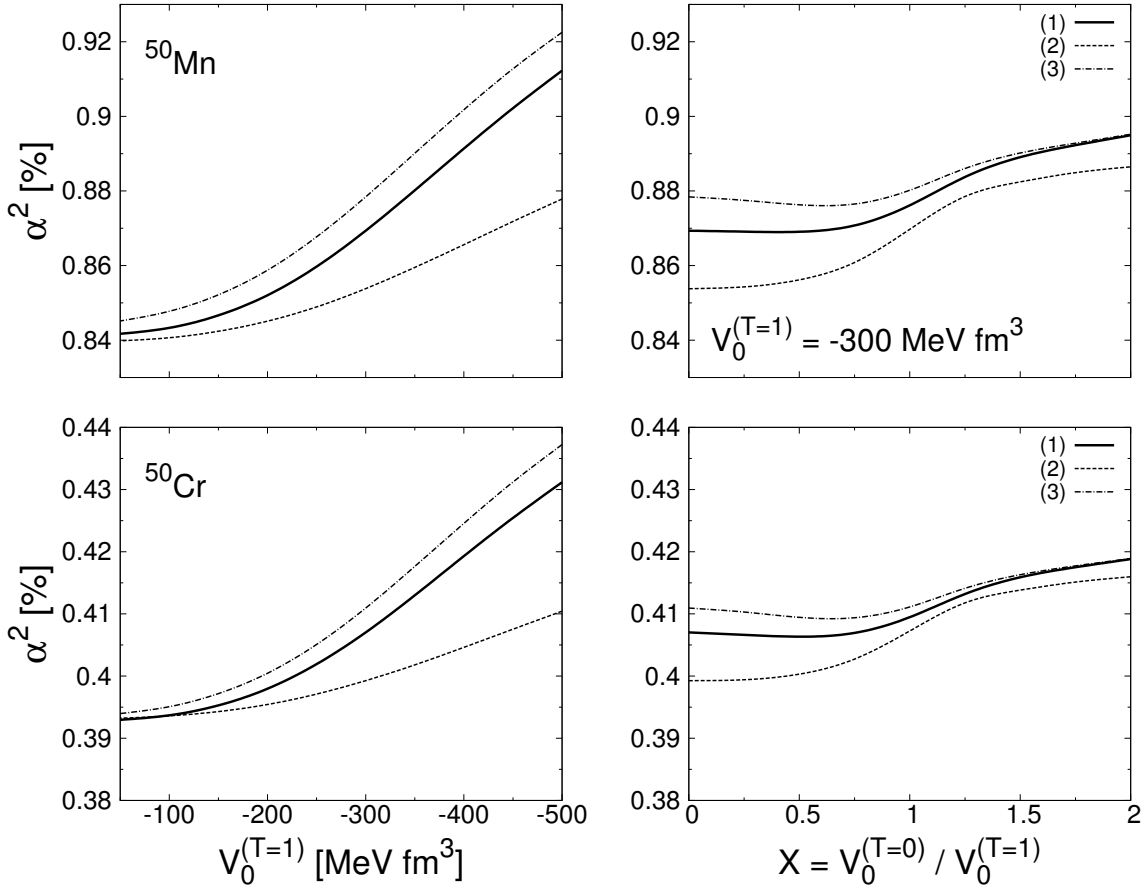


FIGURE 8.8 – Mélange d'isospin dans les fonctions d'onde corrélées initiale et finale calculé en fonction de l'intensité de l'interaction résiduelle $\hat{V}_\delta$ dans le canal T = 1 pour $X = 0$ (à gauche) et en fonction de X pour $V_0^{(\mathrm{T}=1)} = -300$ MeV fm^3 (à droite). Le calcul du mélange est réalisé dans trois situations différentes repérées par (1), (2) et (3). Ces diverses situations sont détaillées dans le texte.

◦ IMPACT DES CORRÉLATIONS D'APPARIEMENT SUR LA CORRECTION δ_C

L'allure de la correction δ_C de mélange d'isospin à l'élément de matrice de transition de Fermi en fonction de l'intensité, dans les deux canaux d'isospin de l'interaction résiduelle $\hat{V}_\delta$, est présentée sur la partie supérieure de la figure 8.9. L'ordre de grandeur de cette correction est de quelques dixièmes de pourcent. En passant de $|V_0^{(\mathrm{T}=1)}| = 50$ MeV fm^3 à 500 MeV fm^3, la valeur de δ_C augmente d'un facteur 3. En revanche, elle n'augmente que faiblement avec le canal T = 0 de l'interaction résiduelle dans un régime où $X < 1$ et diminue au-delà de $X \sim 1$. Elle tend vers une valeur proche de celle obtenue en l'absence de corrélations donnée par (8.19) et (8.20).

La correction δ_C est une quantité qui sonde de façon extrêmement fine la structure des fonctions d'onde initiale et finale. Pour estimer cette correction avec une précision donnée, il faut évaluer l'élément de matrice de transition M_F avec une précision beaucoup plus grande. En effet les erreurs relatives sur ces deux quantités sont reliées par

$$\frac{\Delta M_F}{M_F} = \frac{\Delta\delta_C}{\delta_C}\frac{\delta_C}{2(1-\delta_C)} \simeq \frac{\Delta\delta_C}{\delta_C}\frac{\delta_C}{2} \,. \tag{8.27}$$

En supposant que l'on souhaite obtenir une erreur relative sur δ_C de 10% et en tenant compte du fait que δ_C est négligeable devant 1, on obtient

$$\frac{\Delta M_F}{M_F} = 5.10^{-2} \times \delta_C \, . \tag{8.28}$$

Si l'on estime la valeur de δ_C à environ 2.10^{-3}, on obtient une précision relative requise sur l'élément de matrice de Fermi $\Delta M_F/M_F$ de 10^{-4}. Il semble alors a priori très difficile de pouvoir envisager d'expliquer l'allure que prend la correction δ_C en fonction de l'intensité de l'interaction résiduelle $\hat{V}_\delta$ avec

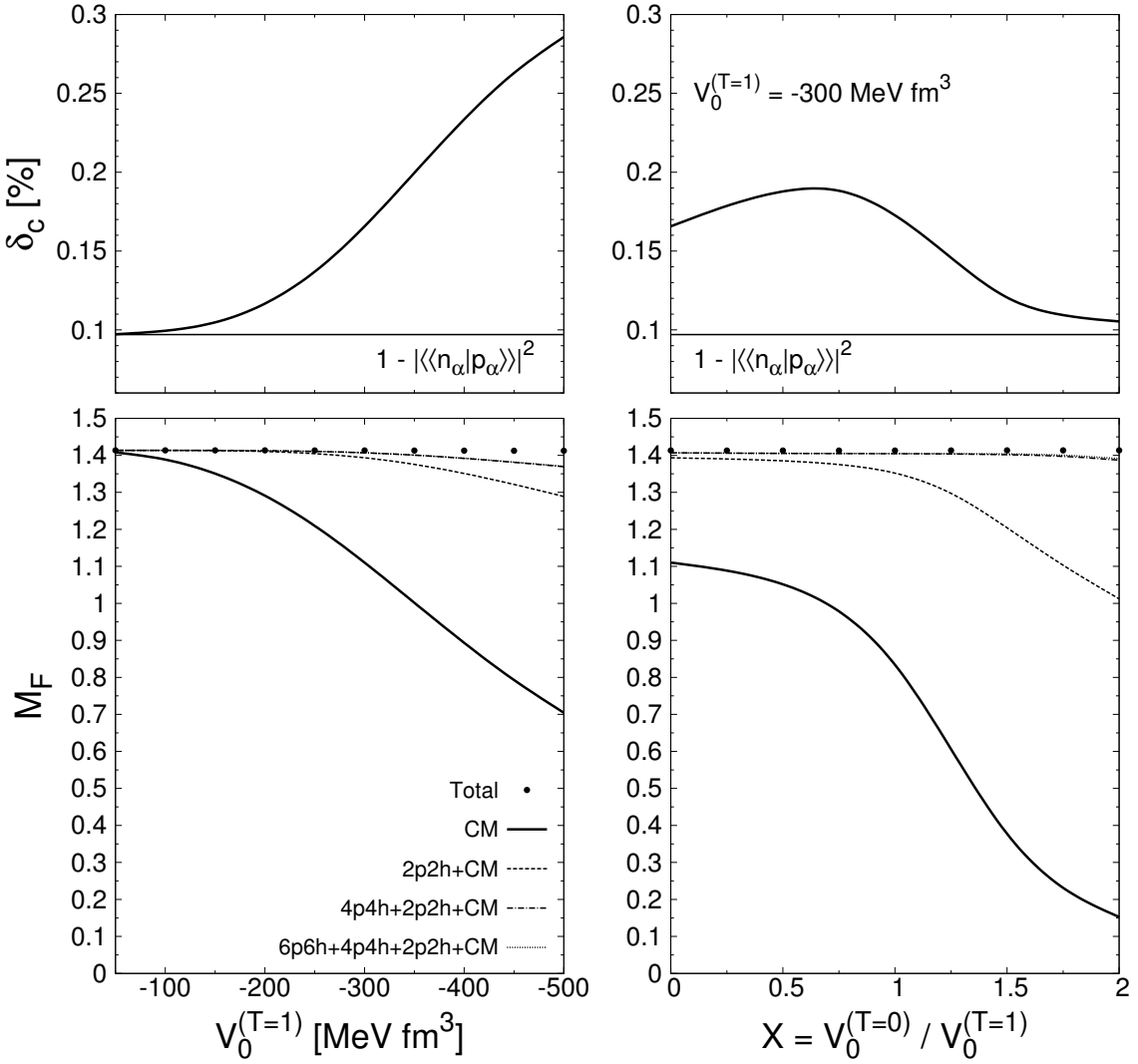


FIGURE 8.9 – En haut : correction δ_C de mélange d'isospin à l'élément de matrice de transition de Fermi calculée en fonction de l'intensité de l'interaction résiduelle $\hat{V}_\delta$ dans le canal T = 1 pour $X = 0$ (à gauche) et en fonction de X pour $V_0^{(\mathrm{T}=1)} = -300$ MeV fm^3 (à droite). En bas : élément de matrice de transition de Fermi M_F, calculé dans les mêmes conditions. Les contributions dominantes à l'élément de matrice de Fermi (représenté en points noirs) sont mises en évidence par les courbes. La contribution de champ moyen ne tenant compte que de $|\widetilde{\Phi_i}\rangle$ et de $|\Phi_f\rangle$ est désignée par « CM » sur les figures inférieures et la valeur de δ_C en l'absence de corrélation est repérée par une ligne horizontale sur les figures supérieures.

des mécanismes simples de structure ne faisant intervenir par exemple que des transferts de simples paires.

Sur la partie inférieure de la figure 8.9, nous avons reporté l'allure de l'élément de matrice de la transition de Fermi (points noirs) en fonction de l'intensité de l'interaction résiduelle dans les deux canaux d'isospin. À cette échelle il n'est pas possible de distinguer la différence entre le résultat total de M_F et la valeur $\sqrt{2}$ correspondant à une symétrie d'isospin respectée. Nous avons également reporté sur cette figure, les contributions dominantes de cet élément de matrice en tenant compte des couplages, via l'opérateur $\hat{T}_+$, entre des ordres d'excitations identiques dans chacun des deux noyaux. En réalité, l'opérateur $\hat{T}_+$ peut coupler des excitations de type $np n\mathrm{h}$ dans la fonction d'onde du ^{50}Mn avec des excitations de type $n'\mathrm{p}n'\mathrm{h}$ dans celle du ^{50}Cr avec $n' = n,\ n \pm 1$.

Si on écrit les fonctions d'onde initiale et finale comme

$$|\Psi_i\rangle = \chi_0^{(i)}|\widetilde{\Phi_i}\rangle + \sum_{n=2}^{8}|\Psi_i^{(n)}\rangle \qquad \text{et} \qquad |\Psi_f\rangle = \chi_0^{(f)}|\Phi_f\rangle + \sum_{n=2}^{8}|\Psi_f^{(n)}\rangle\,, \tag{8.29}$$

avec

$$|\Psi_i^{(n)}\rangle = \sum_{np n\mathrm{h}} \chi^i_{np n\mathrm{h}}|\Phi^{i(+)}_{np n\mathrm{h}}\rangle \qquad \text{et} \qquad |\Psi_f^{(n)}\rangle = \sum_{np n\mathrm{h}} \chi^f_{np n\mathrm{h}}|\Phi^{f(+)}_{np n\mathrm{h}}\rangle\,, \tag{8.30}$$

alors la figure 8.9 montre qu'une bonne approximation de l'élément de matrice M_F est donnée par,

$$M_F \approx \chi_0^{(i)}\chi_0^{(f)}\langle\Phi_f|\hat{T}_+|\widetilde{\Phi_i}\rangle + \langle\Psi_f^{(2)}|\hat{T}_+|\Psi_i^{(2)}\rangle + \langle\Psi_f^{(4)}|\hat{T}_+|\Psi_i^{(4)}\rangle\,, \tag{8.31}$$

Cependant cette approximation nous permet de reproduire la valeur de l'élément de matrice M_F avec une précision relative de l'ordre du pourcent ce qui est largement insuffisant pour le problème qui nous intéresse. Pour fixer les idées, d'après la relation (8.27), on obtient

$$\frac{\Delta\delta_C}{\delta_C} \simeq \frac{\Delta M_F}{M_F}\frac{2}{\delta_C}\,. \tag{8.32}$$

L'erreur commise sur δ_C se déduit donc de celle sur M_F par un facteur multiplicatif de $2/\delta_C$. Dans le cas où $\frac{\Delta M_F}{M_F} = 1\%$ et $\delta_C \approx 2.10^{-3}$ on obtient une erreur relative de

$$\frac{\Delta\delta_C}{\delta_C} \approx 10 = 1000\%\,. \tag{8.33}$$

Nous n'irons pas plus loin ici dans l'investigation des mécanismes responsables de l'allure de la correction δ_C que l'on peut observer sur la figure 8.9. Il nous reste toutefois à examiner l'impact de plusieurs paramètres de notre modèle sur cette allure, comme par exemple l'ordre d'excitation maximum considéré dans le modèle ou encore le traitement de l'interaction coulombienne.

La figure 8.10 présente la correction δ_C calculée en fonction de la richesse des fonctions d'onde considérées. On a inclus dans le modèle des excitations $(n+2)\mathrm{p}n\mathrm{h}$, pour $n = 2$, 4 et 6, par rapport au ^{48}Cr. Ces trois calculs ont été réalisés avec la même énergie de coupure $E_0^* = 33.845$ MeV.

Cette figure montre que la valeur de la correction δ_C est convergée à quelques pourcents avec la prise en compte des excitations de type 8p6h sur le ^{48}Cr qui contiennent une fraction non négligeable des excitations de triples paires par rapport aux états $|\widetilde{\Phi_i}\rangle$ et $|\Phi_f\rangle$. En revanche, si l'on ne tient pas compte des excitations de type 6p4h dans le calcul des fonctions d'onde corrélées, on commet jusqu'à 50% d'erreur sur la valeur de δ_C. La détermination avec précision de la correction δ_C nécessite donc d'atteindre une richesse élevée des fonctions d'onde corrélées initiale et finale.

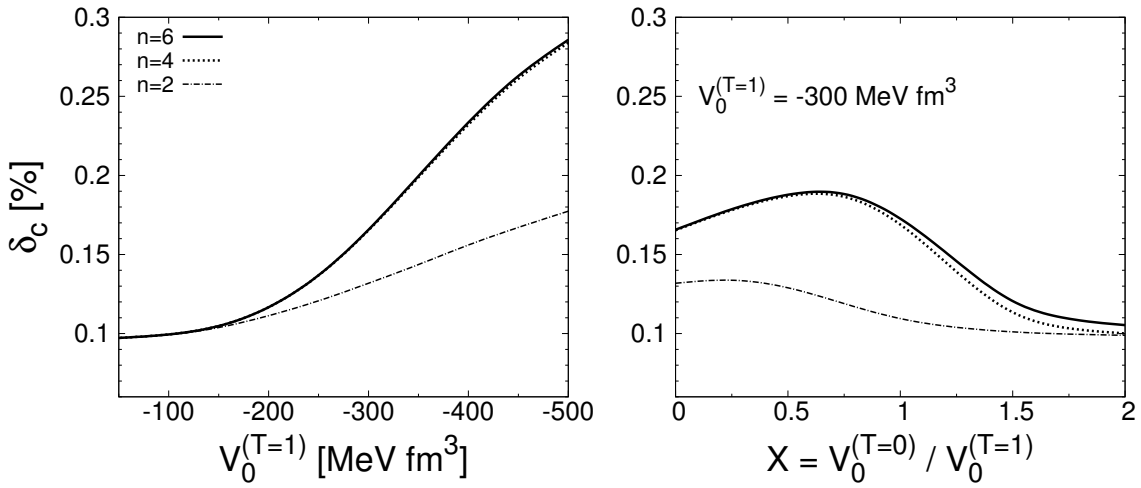


FIGURE 8.10 – Correction δ_C de mélange d'isospin à l'élément de matrice de transition de Fermi calculé en fonction de l'intensité de l'interaction résiduelle $\hat{V}_\delta$ dans le canal T = 1 pour $X = 0$ (à gauche) et en fonction de X pour $V_0^{(\mathrm{T}=1)} = -300$ MeV fm^3 (à droite). Trois calculs sont présentés, correspondants à des richesses de fonctions d'onde incluant tous les ordres d'excitation pairs par rapport au ^{48}Cr allant jusqu'à $(n+2)$pnh avec $n = 2$, 4 ou 6.

Comme on l'a mentionné, un autre facteur important qui va conditionner la valeur de cette correction est le traitement de l'interaction coulombienne, tant au niveau du champ moyen que de l'interaction résiduelle. La figure 8.11 présente les résultats obtenus pour δ_C dans les trois situations décrites dans le paragraphe précédent. La situation (1) est celle d'un traitement exact de l'interaction coulombienne au du niveau champ moyen et de l'absence de la force coulombienne dans le canal résiduel. Cette situation

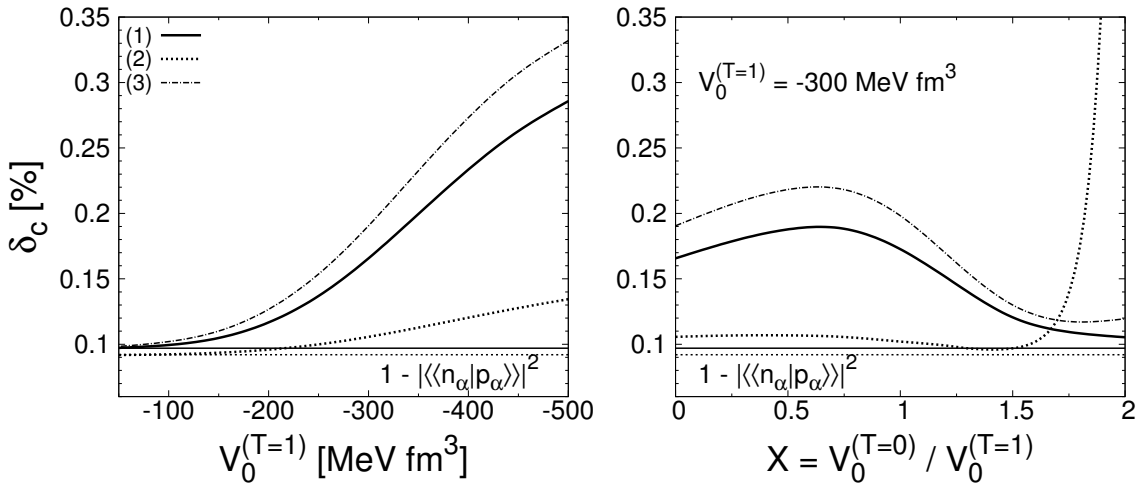


FIGURE 8.11 – Correction δ_C de mélange d'isospin à l'élément de matrice de transition de Fermi calculée en fonction de l'intensité de l'interaction résiduelle $\hat{V}_\delta$ dans le canal T = 1 pour $X = 0$ (à gauche) et en fonction de X pour $V_0^{(\mathrm{T}=1)} = -300$ MeV fm^3 (à droite). Le calcul de δ_C est réalisé dans les mêmes situations (1), (2) et (3) que pour la figure 8.8. La valeur de δ_C dans la limite sans corrélation est représentée par une ligne horizontale suivant le style de tracé de la situation correspondante.

est celle correspondant aux résultats en traits pleins de la figure 8.10. La situation (2) diffère de la précédente par un traitement approché du potentiel d'échange coulombien au niveau du champ moyen via l'approximation de Slater. Enfin, la situation (3) diffère de la première par la prise en compte de l'interaction coulombienne au niveau résiduel dans HTDA.

Tout d'abord, on s'aperçoit que la valeur de la correction δ_C en l'absence de corrélation est très peu sensible au traitement de l'interaction coulombienne au niveau du champ moyen. Comme nous l'avons vu avec le mélange d'isospin au chapitre 6, l'emploi de l'approximation de Slater pour calculer le potentiel d'échange coulombien et l'énergie d'échange associée va surtout affecter les énergies individuelles plus que les fonctions d'onde à un corps. Nous avions vu que les recouvrements des fonctions d'onde à un corps étaient en effet pratiquement insensibles à cette différence de traitement.

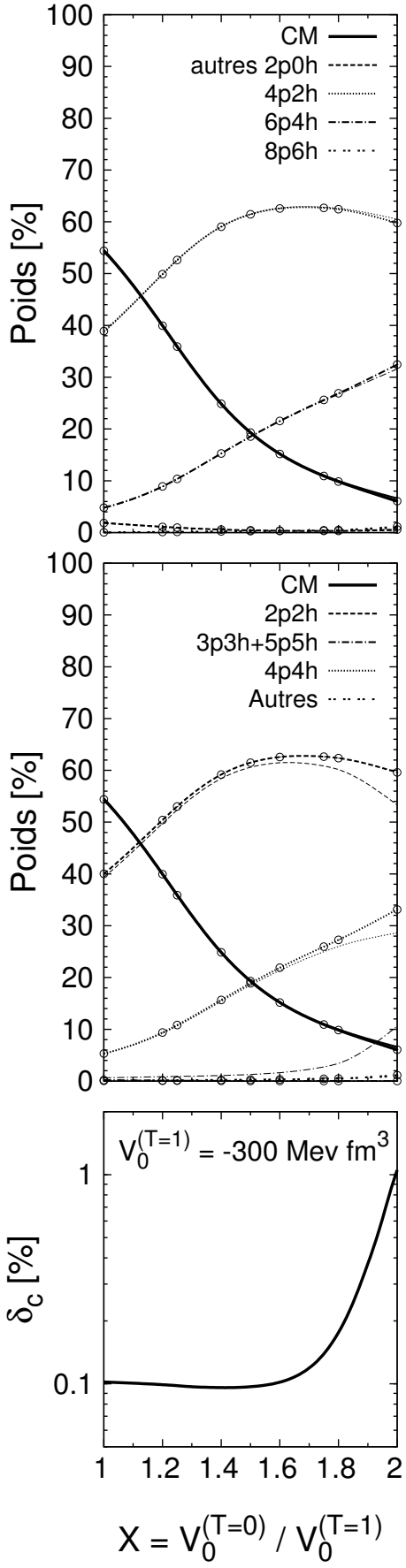
Toutefois, la modification du spectre individuel des protons par l'approximation de Slater va fortement influencer le rôle des corrélations dans HTDA. En effet, dans le cadre de cette approximation, l'écart en énergie entre le dernier niveau de proton occupé et le premier inoccupé va être sous-estimé. Avec l'approximation de Slater, au voisinage du niveau de Fermi comme ailleurs, les spectres individuels des neutrons et des protons sont beaucoup trop similaires et les fonctions d'onde corrélées initiale et finale sont donc beaucoup trop analogues l'une par rapport à l'autre. Ceci se traduit de façon générale par une diminution très sensible de la correction δ_C. De plus, en utilisant les conclusions du chapitre 6 confirmées au paragraphe précédent, le mélange d'isospin des deux noyaux est sous-estimé par l'utilisation de cette approximation. Si la correction δ_C diminue dans la situation (2) par rapport à la situation (1), c'est pour deux raisons principalement : la première est que les deux noyaux sont plus purs en isospin, la seconde est qu'ils sont davantage analogues.

La remontée spectaculaire que l'on peut voir sur la partie droite de la figure 8.11 à forte valeur de X vient apparemment contredire ce raisonnement. Ce comportement surprenant sera discuté un peu plus tard.

Examinons maintenant la situation (3) correspondant à une prise en compte totale de l'interaction coulombienne y compris au niveau résiduel. L'effet général de ce traitement est d'augmenter la correction δ_C. C'est un effet systématique que l'on retrouve sur les deux figures 8.11. Pour expliquer cet effet, on peut utiliser les observations faites au paragraphe précédent. On avait vu que le mélange d'isospin était plus important si on le calculait en tenant compte de la contribution coulombienne à l'interaction résiduelle. C'est donc principalement parce que nos deux solutions corrélées sont plus mélangées en isospin que la correction δ_C augmente. Nous avons examiné par ailleurs les structures en ordre d'excitation des deux fonctions d'onde. Il s'avère que les poids de chaque type de configurations diffèrent (au maximum) de 2%. Cette légère différence de structure contribue également à l'augmentation de δ_C.

Revenons maintenant au comportement de δ_C calculé dans la situation (2) à forte valeur de X. Les résultats du paragraphe précédent sur le mélange d'isospin ne laissent apparaître aucun changement brutal dans le contenu en isospin des fonctions d'onde corrélées initiale et finale. D'après ce que nous avons expliqué précédemment, une hausse aussi spectaculaire de la correction δ_C ne peut alors être causée que par un changement brusque de la structure des fonctions d'onde corrélées qui engendre une importante différence entre elles, les rendant de moins en moins « *analogues* ».

Cette hypothèse est confirmée par la figure 8.12. Sur cette figure, on présente la structure des fonctions d'onde corrélées initiale et finale en fonction de X pour $V_0^{(\mathrm{T}=1)} = -300$ MeV fm^3 et dans la situation (2). Sur le panneau supérieur, cette structure est analysée du point de vue du ^{48}Cr, tandis qu'elle est analysée du point de vue de $|\widetilde{\Phi_i}\rangle$ et $|\Phi_f\rangle$ sur le panneau central. À chaque fois, les courbes reliant des cercles représentent les différentes composantes de la fonction d'onde initiale. Les autres



courbes concernent celles de la fonction d'onde finale. Enfin sur le panneau du bas, on a reporté la correction δ_C correspondante en échelle demi-logarithmique.

Si on regarde la structure de la fonction d'onde finale du point de vue du ^{48}Cr, on ne remarque aucune différence significative entre les deux noyaux. Tous les ordres d'excitation $(n+2)$pnh par rapport à ce cœur sont globalement similaires d'un noyau à l'autre. S'il y a bien une différence entre la structure du ^{50}Cr et du ^{50}Mn, comme on le soupçonne, alors l'examiner avec le point de vue du cœur pair-pair $N = Z$ n'est pas la bonne stratégie.

En se plaçant du point de vue de $|\widetilde{\Phi_i}\rangle$ et $|\Phi_f\rangle$, on remarque effectivement, sur le graphique central, que pour $X \gtrsim 1.5$, une nette différence de structure apparaît entre les fonctions d'onde initiale et finale. La fonction d'onde initiale présente une structure assez similaire à celle obtenue dans la situation (1) (voir figure 8.4). En revanche, au-delà de $X = 1.5$, on remarque qu'une proportion non négligeable de la fonction d'onde finale correspond à des excitations de type 3p3h (surtout) et 5p5h. L'augmentation du poids de ces composantes se fait au détriment des configurations de type 2p2h et 4p4h de telle sorte que le taux de corrélation soit globalement conservé.

L'accroissement de cette différence de structure coïncide parfaitement avec l'augmentation importante de la correction δ_C. Bien que les poids de chaque ordre d'excitation diffèrent d'un noyau à l'autre seulement de quelques pourcents, la correction δ_C est amplifiée d'un facteur 10 entre $X = 1.5$ et $X = 2$. Il est cependant bon de se rappeler qu'une telle amplitude de variation de δ_C correspond à une variation bien moindre de l'élément de matrice de Fermi M_F. En effet, dans la même plage de valeur de X, celui-ci ne varie que de 0.5%.

FIGURE 8.12 – Comparaison de la structure des fonctions d'onde corrélées obtenues dans la situation (2). En haut : structure par rapport au ^{48}Cr. Au milieu : structure par rapport aux états $|\widetilde{\Phi_i}\rangle$ et $|\Phi_f\rangle$. En bas : correction δ_C dans la situation (2). La structure de la fonction d'onde initiale est repérée par les courbes reliant les cercles tandis que celles sans cercles représentent la structure de la fonction d'onde finale.

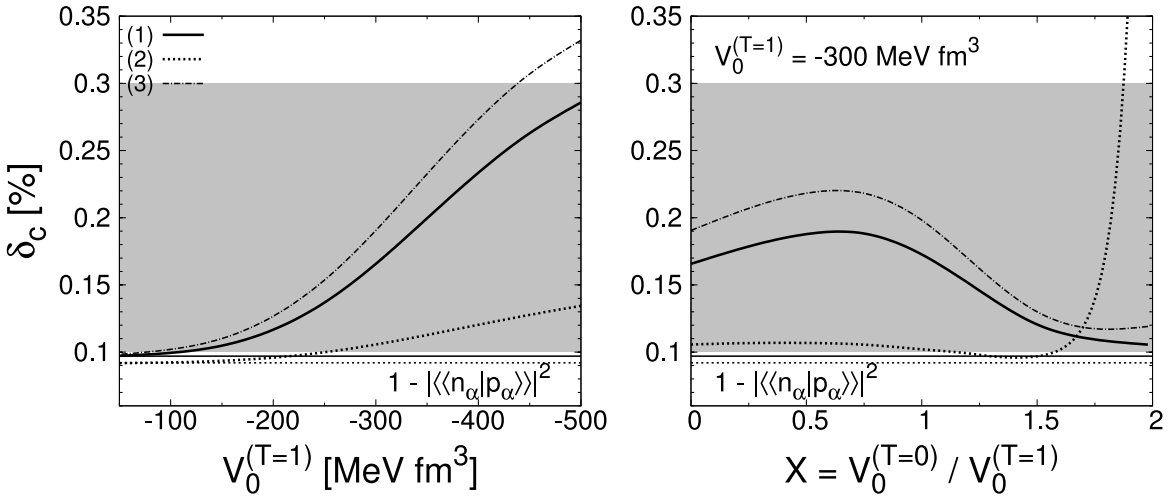


FIGURE 8.13 – Amplitude globale de variation de la correction δ_C. La bande grise représente la barre d'erreur estimée en faisant varier divers paramètres du modèle. La valeur centrale de δ_C est estimée à 0.2%.

8.2.3 Comparaison avec d'autres modèles

Pour conclure cette étude de l'impact des corrélations d'appariement sur la correction de mélange d'isospin à l'élément de matrice de Fermi, nous allons comparer nos résultats avec la valeur donnée par d'autres modèles. Pour ce faire, nous devons au préalable déterminer une valeur moyenne de δ_C obtenue dans notre approche.

Compte tenu de l'amplitude de variation de la correction δ_C en fonction des divers paramètres de notre modèle que nous avons fait varier, on peut estimer de façon approchée une valeur de δ_C raisonnable de

$$\delta_C = (0.2 \pm 0.1)\% \,. \tag{8.34}$$

Encore une fois, l'incertitude sur δ_C que nous estimons ici est à considérer en regard de la précision correspondante de M_F, qui vaut

$$M_F = 1.4128(7) \,. \tag{8.35}$$

La figure 8.13 représente la correction δ_C obtenue en faisant varier divers paramètres du modèle comme les intensités $V_0^{(\mathrm{T}=0)}$ et $V_0^{(\mathrm{T}=1)}$ de l'interaction $\hat{V}_\delta$ ainsi que le traitement de l'interaction coulombienne. La bande grise repésente la barre d'erreur que nous avons estimée. La région des fortes valeurs de X, dans laquelle on obtient une correction δ_C 10 fois supérieure au reste des résultats lorsque l'on se place dans la situation (2), a été ignorée pour l'estimation (8.34) de δ_C. En effet on peut raisonnablement penser que la région $X \approx 2$ est probablement au-delà des valeurs réalistes de X. Nous l'avions fixée ici comme limite supérieure de notre étude.

Dans l'étude de la référence [104], nous avions fait varier d'autres paramètres du modèle comme la paramétrisation de la force de Skyrme. Dans les calculs présents, la paramétrisation SIII a été choisie et dans le travail [104], nous avions, en plus, considéré la paramétrisation SLy4. La pertinence du modèle qui se base sur le choix d'un état $|\Phi_0\rangle$ de référence avait également été testée. Ici, le cœur pair-pair $N = Z$ de ^{48}Cr a été choisi. Dans l'étude [104], le calcul de δ_C a été reproduit avec, pour choix d'état $|\Phi_0\rangle$, le cœur pair-pair $N = Z$ de ^{52}Fe. Les bases à N corps étaient alors construites sur ce cœur via des excitations de type 0p2h, 2p4h et 4p6h. De plus, l'espace de configurations n'était pas tronqué une fois choisie la fenêtre à 1 corps et ainsi, il était plus simple de reconstruire exactement les mêmes bases

à N corps pour les deux choix de cœur ci-dessus. Seule l'influence de la modification des fonctions d'onde à un corps sur la correction δ_C était ainsi testée.

Chacun de ces deux calculs complémentaires donnait des valeurs de δ_C proches de ce que l'on a obtenu ici dans la situation (1) par exemple. Le choix de la barre d'erreur sur δ_C qui est fait ici permet d'inclure les résultats antérieurs [104].

Il reste maintenant à comparer avec les autres travaux qui ont conduit à des valeurs de δ_C dans le cadre d'approches différentes. On peut répertorier sept modèles appliqués aux transitions les mieux connues expérimentalement. Une revue très complète et comparative de tous ces calculs, à l'exception du dernier listé ci-desous (IJP-DFT) a été ralisée dans le travail de la référence [114]. Concernant la transition β^+ du ^{50}Mn, cinq valeurs différentes ont été obtenues dans les approches suivantes,

- Le modèle de Damgård (Dam) [115] : La correction δ_C est due à une distorsion de la partie radiale de la fonction d'onde du proton mis en jeu dans la décroissance β par l'interaction coulombienne. La correction est évaluée analytiquement dans un modèle simple où l'interaction coulombienne est approchée par une force à un corps et les fonctions d'onde inviduelles sont des fonctions propres de l'oscillateur harmonique.
- Le modèle de Towner et Hardy (SM-WS) [114] : La correction δ_C est calculée dans le cadre du Modèle en Couches où les fonctions d'onde individuelles sont des fonctions propres d'un potentiel de Woods-Saxon.
- Le modèle de Ormand et Brown (SM-HF) [116] : La correction δ_C est calculée également dans le cadre du Modèle en Couches mais les fonctions d'onde sont calculées dans l'approximation HF.
- Le modèle d'Auerbach (IVMR) [117] : Dans ce modèle, on suppose que la brisure de symétrie d'isospin dans la décroissance β super-permise est entièrement due au mélange des états analogues avec des états de la résonance monopolaire isovectorielle. Moyennant une série d'approximations, il aboutit à une estimation simple de la correction, $\delta_C = 18.0 \times 10^{-7}\, A^{5/3}$.
- Le modèle de Satuła (IJP-DFT) [109] : La correction δ_C est calculée dans le cadre de l'approximation de HF projeté sur l'isospin et sur le moment cinétique total avec la force de Skyrme SV, indépendante de la densité, choisie pour des raisons techniques. L'interaction coulombienne est ensuite diagonalisée dans la base des états projetés.

Les deux autres modèles, d'abord introduits en 1996 par Sagawa, Van Giai et Suzuki [118], ont été améliorés par la suite et appliqués en 2009 par Liang, Van Giai et Meng [119] aux calculs de 8 des 13 transitions β super-permises les mieux connues expérimentalement. Il s'agit d'approches de champ moyen de type Skyrme-HF (pour le premier modèle) pour la description des noyaux pairs-pairs de chaque transition. L'état du noyau impair-impair intervenant dans la décroissance est décrit par des excitations particule-trou du noyau pair-pair au moyen de l'approximation de phases aléatoires (RPA) avec échange de charge. Dans les calculs les plus récents, la description du noyau pair-pair est faite dans le cadre de l'approximation HF relativiste et également dans une version locale de Hartree relativiste.

Les résultats de ces différents modèles sont reportés dans le tableau 8.3. En prenant en compte notre barre d'erreur théorique, nous obtenons donc le résultat le plus bas après celui d'Auerbach. Notre traitement de la symétrie d'isospin à tous les niveaux, y compris lors de la construction des bases à N corps, nous permet de penser que notre valeur de δ_C constitue une borne inférieure de la

δ_C (%)					
Dam	SM-WS	SM-HF	IVMR	IJP-DFT	Notre travail
0.550	0.655	0.620	0.122	0.75	0.2 ± 0.1

TABLEAU 8.3 – Comparaison des différents résultats existants pour la correction δ_C.

correction. En effet, nous avons vu que cette correction dépendait essentiellement du mélange d'isospin dans les deux états nucléaires initial et final et du degré de ressemblance (à l'isospin près) de ces deux états. En voulant éviter au maximum les différentes sources de brisure non physiques de la symétrie d'isospin, nous avons également limité les sources physiques. De plus, en décrivant les deux états initial et final à partir du même cœur pair-pair $N = Z$, nous avons probablement surestimé le degré de ressemblance de ces deux états. C'est pourquoi nous pensons que notre valeur de δ_C constitue une borne inférieure pour la correction. Afin d'améliorer le calcul de cette correction, il faudrait mettre en place une procédure de restauration de symétrie d'isospin et de moment angulaire avant variation, de sorte à généraliser le travail de Satuła [108–110].

Dans ce contexte, nous comprenons donc pourquoi les autres modèles, à l'exception de celui d'Auerbach (qui est compatible avec le notre si on tient compte de la barre d'erreur) donnent des valeurs plus élevées de δ_C.

Conclusion et perspectives

Dans ce travail de thèse, nous nous sommes intéressés à la brisure de la symétrie d'isospin dans les noyaux $N \sim Z$. Une attention particulière a été portée sur le rôle des corrélations d'appariement au-delà du champ moyen dans cette brisure de symétrie. Le calcul de la correction δ_C de mélange d'isospin à l'élément de matrice de transition de Fermi a également été effectué dans le cas de la décroissance β^+ du ^{50}Mn. Au cours de nos travaux, nous avons pu apporter des réponses aux questions soulevées en introduction.

Dans un premier temps, nous avons montré la complexité du problème de la symétrie d'isospin en lien avec la physique de l'appariement dans HTDA. L'évaluation du paramètre de mélange α^2 et surtout de la correction associée à l'élément de matrice de transition de Fermi nécessite en effet une description très fine des fonctions d'onde corrélées. En particulier nous avons mis en évidence le rôle important des excitations de doubles et triples paires de toute nature possible en isospin (ou même des excitations de type 8p6h dans le cas de la transition). Afin d'arriver à cette constatation, il a fallu concevoir et tester une nouvelle méthode de troncation de l'espace à N corps basée sur une sélection des configurations vis-à-vis de leur énergie d'excitation particule-trou.

Nous avons également examiné le problème de brisure non physique de la symétrie d'isospin lié à la méthode elle-même. Les différentes sources de brisure non physiques ont été répertoriées et un protocole a été développé pour minimiser le plus possible leurs effets. Ce protocole a été appliqué aux calculs de mélange d'isospin et étendu à celui de la transition β.

Afin de calculer le paramètre de mélange d'isospin α^2 dans des fonctions d'onde à N corps, nous avons développé un formalisme de projection approchée permettant de tester la qualité de l'approximation usuelle de faible mélange. Nous avons donc pu montrer que cette approximation était en général de bonne qualité mais que la composante $|\mathrm{T}_z| + 2$ jouait un rôle de plus en plus important en fonction du nombre de protons Z. De plus, pour tout état dont la valeur dominante d'isospin T diffère de $|\mathrm{T}_z|$, l'évaluation correcte du mélange d'isospin requiert la prise en compte, au minimum, des deux composantes voisines de la valeur dominante T_d. Le cas du noyau impair-impair ^{50}Mn, que nous avons examiné, en est un bon exemple.

Concernant les résultats sur le mélange d'isospin, notre étude de l'état fondamental des 5 cas différents de noyaux $N = Z$ pairs-pairs, nous a appris que le traitement de l'interaction coulombienne, tant au niveau du champ moyen qu'au-delà, est de grande importance et doit faire l'objet d'un travail soigné.

Nous avons montré que les corrélations d'appariement au-delà du champ moyen, simulées par une interaction résiduelle de contact $\hat{V}_\delta$, n'apporte pas la même contribution au mélange d'isospin suivant le canal d'isospin de cette interaction. Alors que le canal $\mathrm{T} = 1$ de $\hat{V}_\delta$ a toujours tendance à accroître le mélange d'isospin (contribuant à hauteur de quelques dizaines de pourcents dans le mélange total), le canal $\mathrm{T} = 0$ apporte globalement moins de mélange et a parfois même tendance à compenser l'apport du canal $\mathrm{T} = 1$.

Pour comprendre par quels mécanismes les corrélations d'appariement véhiculent la brisure de sy-

métrie d'isospin au-delà du champ moyen, nous avons développé un outil d'analyse très puissant basé sur une approximation appelée DCA (pour *Decoupled Cluster Approximation*). Cet outil, combiné avec une analyse perturbative des états corrélés, a pu révéler les mécanismes de base d'amplification ou de diminution du mélange d'isospin par les différentes configurations excitées contribuant aux fonctions d'onde corrélées fondamentales. On a pu montrer que la principale contribution des corrélations d'appariement au mélange d'isospin impliquait deux *pseudo-vecteurs propres* de l'opérateur $\hat{\mathbf{T}}^2$: l'état $|\Psi_1\rangle$, favorisé majoritairement par le canal T = 1 de l'interaction $\hat{V}_\delta$ et défavorisé par le canal T = 0, et l'état $|\Psi_0^{(1)}\rangle$ favorisé par le canal T = 0 et défavorisé par le canal T = 1.

Enfin, concernant l'étude de la transition β super-permise du ^{50}Mn, nous avons obtenu une correction δ_C de $(0.2 \pm 0.1)\%$. Au-delà de ce résultat, nous avons mis en évidence l'extrême exigence de précision que requiert l'évaluation de cette correction. L'impact de plusieurs paramètres du modèle sur la valeur de δ_C a été examiné. Afin d'extraire de cette étude une valeur unique, nous nous sommes basés sur les fluctuations de nos résultats pour estimer une barre d'erreur théorique.

Comme pour le mélange d'isospin, la correction δ_C présente une sensibilité différente aux deux canaux d'isospin de l'interaction résiduelle $\hat{V}_\delta$. Elle augmente rapidement avec l'intensité dans le canal T = 1 et varie beaucoup moins avec l'intensité dans le canal T = 0. Lorsque le canal T = 0 domine, l'apport des corrélations neutron-proton à la correction δ_C devient négligeable. Toutefois, cette dernière observation est à relativiser car la transition considérée dans notre étude est basée sur la description du ^{48}Cr dont l'apport des corrélations au mélange d'isospin est particulièrement faible dans cette gamme d'intensité.

Nous avons finalement confronté notre résultat à ceux obtenus par d'autres modèles. Compte tenu des effets négligés dans notre approche, la valeur de la correction δ_C calculée ici est supposée être une borne minimum.

La première perspective à envisager est d'étudier, avec le même modèle, d'autres décroissances comme celles du ^{26}Al^m, du ^{46}V, du ^{54}Co ou encore du ^{74}Rb. En remontant à la constante de couplage vectorielle G_V de l'interaction faible, ces études conduiraient directement à un premier test de l'hypothèse CVC dans HTDA.

Les différentes voies d'amélioration possibles pour estimer plus exactement la valeur de la correction δ_C concernent les différents effets que nous avons négligés dans notre étude.

Tout d'abord, il est clair que les corrélations d'appariement ne sont pas les seules à jouer un rôle important dans la structure des états fondamentaux. Les corrélations vibrationnelles sont notamment importantes et mériteraient d'être prises en compte dans notre modèle. De plus la prise en compte de telles corrélations permettrait de traiter le cas de transitions faisant intervenir des noyaux sphériques pour lesquels les vibrations jouent un rôle dominant par rapport aux corrélations d'appariement.

Il est clair que l'interaction coulombienne n'est pas la seule source de brisure de la symétrie d'isospin dans les noyaux atomiques. L'interaction forte joue également un rôle dans cette brisure à travers les force CIS (*Charge Invariance Breaking*) et CSB (*Charge Symmetry Breaking*). Il est alors intéressant de s'intéressé à l'impact de telles contribution à la fois sur le mélange d'isospin et la correction δ_C.

Ensuite, afin de fournir une meilleure description des états initial et final de la transition, il est nécessaire de s'affranchir de la dépendance en $|\Phi_0\rangle$ du hamiltonien. Une telle tâche demeure très difficile mais une première étape accessible, qui pourrait constituer une très bonne approximation, serait de rétablir la cohérence de l'interaction effective $\hat{V}$ entre le champ moyen et le canal résiduel.

Si on admet qu'une telle entreprise pourrait être réalisée, il resterait encore à restaurer à la fois la symétrie d'isospin et l'invariance par rotation au moyen d'une double projection avant variation. Il est connu que ce genre de procédure pose de sérieux problèmes techniques dès lors que l'on travaille avec une interaction effective $\hat{V}$ dépendant de la densité.

Annexes

Annexe A

Comparaison de déterminants de Slater

Contenu du chapitre

A.1 Convention d'écriture
A.2 Quelques définitions
A.3 Calcul de φ_{ij}
A.4 Expression finale du facteur de phase
A.4.1 Cas général
A.4.2 Cas où $|\Phi_j\rangle = |\Phi_i\rangle$: vérification
A.4.3 Cas de la conservation du nombre de neutrons et du nombre de protons

A.1 Convention d'écriture

Lorsque l'on considère plusieurs déterminants de Slater qui sont des excitations de quasi-particules de type particule-trou par rapport à un même quasi-vide $|\Phi_0\rangle$, il est utile de pouvoir les comparer afin de calculer l'élément d'un opérateur donné entre eux. Il s'agit donc d'exprimer l'un de ces états comme une excitation particule-trou par rapport à l'autre.

Cependant il n'existe pas de façon unique d'exprimer un état $|\Phi_j\rangle$ comme une excitation np-n'h d'un état $|\Phi_i\rangle$. L'écriture sera toujours définie à une phase près provenant de la possibilité d'anti-commuter des opérateurs de création ou d'annihilation suivant $\{\hat{\mathrm{a}}_i^\dagger, \hat{\mathrm{a}}_j\} = \delta_{ij}$:

$$|\Phi_j\rangle = \varphi_{ij} \prod_{\ell=1}^{n} \hat{\mathrm{a}}_{\gamma_\ell}^\dagger \prod_{\ell=n'}^{1} \hat{\mathrm{a}}_{c_\ell} |\Phi_i\rangle \tag{A.1}$$

Une convention pour l'ordre d'apparition de ces opérateurs doit alors être choisie. La convention que l'on va choisir dans ce travail est la suivante. On classera d'abord tous les opérateurs de création, puis tous ceux d'annihilation. Au sein de l'ensemble des opérateurs de création, on suit la convention suivante :

1. On classe les états individuels par ordre décroissant de leur valeur propre d'isospin τ (i.e. d'abord les neutrons, ensuite les protons).
2. Pour chaque espèce de particule, on les classe par énergie croissante.
3. Enfin, si deux états sont dégénérés de Kramers, on les classe par ordre décroissant de leur valeur propre de $\hat{j}_z = \hat{l}_z + \hat{s}_z$.

La convention exactement inverse sera appliquée aux opérateurs d'annihilation.

Symétrie de φ_{ij} dans l'échange de i et j

De manière similaire à (A.1), on peut exprimer l'état $|\Phi_i\rangle$ comme une excitation n'p-nh de $|\Phi_j\rangle$ comme

$$|\Phi_i\rangle = \varphi_{ji} \prod_{\ell=1}^{n'} \hat{a}^\dagger_{\delta_\ell} \prod_{\ell=n}^{1} \hat{a}_{d_\ell} |\Phi_j\rangle \,, \tag{A.2}$$

l'ordre des opérateurs apparaissant ici devant bien sûr respecter notre convention.

Or, à partir de (A.1), on peut exprimer $|\Phi_i\rangle$ comme

$$|\Phi_i\rangle = \frac{1}{\varphi_{ij}} \prod_{\ell=1}^{n'} \hat{a}^\dagger_{c_\ell} \prod_{\ell=n}^{1} \hat{a}_{\gamma_\ell} |\Phi_j\rangle \,. \tag{A.3}$$

L'ordre des opérateurs de création et d'annihilation apparaissant ici étant inversé par rapport à leur classement dans (A.1), ils se retrouvent donc tous ordonnés selon la convention choisie. On peut alors identifier directement les phases comme

$$\varphi_{ji} = \frac{1}{\varphi_{ij}} = \varphi_{ij} \,. \tag{A.4}$$

Le facteur de phase que nous cherchons à évaluer ici devra donc être symétrique dans l'échange de i et j.

A.2 Quelques définitions

Soient deux déterminants de Slater $|\Phi_i\rangle$ et $|\Phi_j\rangle$ construits sur le même vide de référence $|\Phi_0\rangle$. Pour être tout à fait général nous n'allons pas tenir compte de la conservation du nombre de neutrons ni du nombre de protons dans la définition de ces deux déterminants de Slater :

$$|\Phi_i\rangle = \epsilon_i \prod_{\ell=1}^{n_i} \hat{a}^\dagger_{\alpha_\ell} \prod_{\ell=n'_i}^{1} \hat{a}_{a_\ell} |\Phi_0\rangle \tag{A.5a}$$

$$|\Phi_j\rangle = \epsilon_j \prod_{\ell=1}^{n_j} \hat{a}^\dagger_{\beta_\ell} \prod_{\ell=n'_j}^{1} \hat{a}_{b_\ell} |\Phi_0\rangle \,. \tag{A.5b}$$

On suppose que les opérateurs de création et d'annihilation intervenant ici sont déja complètement ordonnés selon notre convention. De plus on notera ν_i (resp. ν'_i, ν_j, ν'_j) le nombre de neutrons parmi les n_i états (resp. n'_i, n_j, n'_j) apparaissant dans (A.5). On notera également π_i (resp. π'_i, π_j, π'_j) le nombre de protons parmi ces mêmes n_i (resp. n'_i, n_j, n'_j) états. Tous ces nombres sont reliés par les relations

$$\begin{aligned} n_i &= \pi_i + \nu_i \,, & n'_i &= \pi'_i + \nu'_i \,, \\ n_j &= \pi_j + \nu_j \,, & n'_j &= \pi'_j + \nu'_j \,. \end{aligned}$$

D'après (A.5), $|\Phi_j\rangle$ peut être réécrit en fonction de $|\Phi_i\rangle$ comme

$$|\Phi_j\rangle = \epsilon_j \, \epsilon_i \prod_{\ell=1}^{n_j} \hat{a}^\dagger_{\beta_\ell} \prod_{\ell=n'_j}^{1} \hat{a}_{b_\ell} \prod_{\ell=1}^{n'_i} \hat{a}^\dagger_{a_\ell} \prod_{\ell=n_i}^{1} \hat{a}_{\alpha_\ell} |\Phi_i\rangle \,. \tag{A.6}$$

Il reste maintenant à rétablir l'ordre des opérateurs afin de déterminer la phase φ_{ij}. Pour cela quelques définitions subsidiaires sont nécessaires.

Notons par $\mathcal{P}$ l'ensemble des états de particule de $|\Phi_0\rangle$ qui sont occupés à la fois dans $|\Phi_i\rangle$ et dans $|\Phi_j\rangle$. En notant $P_i = \{\alpha_\ell \ ; \ \ell = 1, ..., n_i\}$, l'ensemble des états de particule de $|\Phi_0\rangle$ occupés dans $|\Phi_i\rangle$ et $P_j = \{\beta_\ell \ ; \ \ell = 1, ..., n_j\}$, celui des états de particule de $|\Phi_0\rangle$ occupés dans $|\Phi_j\rangle$, cela revient à définir $\mathcal{P}$ par

$$\mathcal{P} = P_i \cap P_j = \{\beta_{p'_\ell} = \alpha_{p_\ell} \,|\, \ell = 1, ..., N_p\} \, . \tag{A.7}$$

Le nombre N_p d'éléments de $\mathcal{P}$ comptera, par définition, N_p^ν états de neutrons et N_p^π états de protons.

On définit de la même façon l'ensemble $\mathcal{H}$ des états de trou de $|\Phi_0\rangle$ qui sont inoccupés à la fois dans $|\Phi_i\rangle$ et dans $|\Phi_j\rangle$. De façon similaire on notera $H_i = \{a_\ell \ ; \ \ell = 1, ..., n'_i\}$, l'ensemble des états de trou de $|\Phi_0\rangle$ inoccupés dans $|\Phi_i\rangle$ et $H_j = \{b_\ell \ ; \ \ell = 1, ..., n'_j\}$, celui des états de trou de $|\Phi_0\rangle$ inoccupés dans $|\Phi_j\rangle$ et ainsi

$$\mathcal{H} = H_i \cap H_j = \{b_{h'_\ell} = a_{h_\ell} \ ; \ \ell = 1, \ldots, N_h\} \, . \tag{A.8}$$

Le nombre N_h d'éléments de $\mathcal{H}$ comptera, par définition, N_h^ν états de neutrons et N_h^π états de protons.

N.B. : Les ensembles qui ont été définis ci-dessus sont tous ordonnés selon notre convention.

Enfin, on notera par $\mathcal{N}$ le nombre total d'états individuels dans $\mathcal{P}$ et $\mathcal{H}$ réunis

$$\mathcal{N} = \mathrm{card}(\mathcal{P} \cup \mathcal{H}) = N_p + N_h \, . \tag{A.9}$$

A.3 Calcul de φ_{ij}

Afin de calculer la phase φ_{ij}, nous allons procéder par étapes.

Étape 1 : Lors de cette première étape, nous allons éliminer deux à deux les opérateurs de création et d'annihilation dans (A.6) portant sur les mêmes états individuels :

$$\prod_{\ell=1}^{n_j} \hat{\mathrm{a}}^\dagger_{\beta_\ell} \prod_{\ell=n'_j}^{1} \hat{\mathrm{a}}_{b_\ell} \prod_{\ell=1}^{n'_i} \hat{\mathrm{a}}^\dagger_{a_\ell} \prod_{\ell=n_i}^{1} \hat{\mathrm{a}}_{\alpha_\ell} = \varphi_1 \prod_{\substack{\ell=1 \\ \beta_\ell \notin \mathcal{P}}}^{n_j} \hat{\mathrm{a}}^\dagger_{\beta_\ell} \prod_{\substack{\ell=n'_j \\ b_\ell \notin \mathcal{H}}}^{1} \hat{\mathrm{a}}_{b_\ell} \prod_{\substack{\ell=1 \\ a_\ell \notin \mathcal{H}}}^{n'_i} \hat{\mathrm{a}}^\dagger_{a_\ell} \prod_{\substack{\ell=n_i \\ \alpha_\ell \notin \mathcal{P}}}^{1} \hat{\mathrm{a}}_{\alpha_\ell} \, . \tag{A.10}$$

Ce calcul introduit une phase φ_1 telle que

$$\varphi_1 = (-)^{X_1} \quad \text{avec} \quad X_1 = N_p(n_i + n'_i + n_j + n'_j) - N_h(N_h + 1) - \sum_{\ell=1}^{N_p}(p'_\ell + p_\ell) + \sum_{\ell=1}^{N_h}(h'_\ell + h_\ell) \, , \tag{A.11}$$

les nombres p_ℓ, p'_ℓ, h_ℓ et h'_ℓ faisant référence aux expressions (A.7) et (A.8).

Étape 2 : Nous allons maintenant regrouper les opérateurs de création d'une part et d'annihilation d'autre part :

$$\prod_{\substack{\ell=1 \\ \beta_\ell \notin \mathcal{P}}}^{n_j} \hat{\mathrm{a}}^\dagger_{\beta_\ell} \prod_{\substack{\ell=n'_j \\ b_\ell \notin \mathcal{H}}}^{1} \hat{\mathrm{a}}_{b_\ell} \prod_{\substack{\ell=1 \\ a_\ell \notin \mathcal{H}}}^{n'_i} \hat{\mathrm{a}}^\dagger_{a_\ell} \prod_{\substack{\ell=n_i \\ \alpha_\ell \notin \mathcal{P}}}^{1} \hat{\mathrm{a}}_{\alpha_\ell} = \varphi_2 \prod_{\substack{\ell=1 \\ \beta_\ell \notin \mathcal{P}}}^{n_j} \hat{\mathrm{a}}^\dagger_{\beta_\ell} \prod_{\substack{\ell=1 \\ a_\ell \notin \mathcal{H}}}^{n'_i} \hat{\mathrm{a}}^\dagger_{a_\ell} \prod_{\substack{\ell=n'_j \\ b_\ell \notin \mathcal{H}}}^{1} \hat{\mathrm{a}}_{b_\ell} \prod_{\substack{\ell=n_i \\ \alpha_\ell \notin \mathcal{P}}}^{1} \hat{\mathrm{a}}_{\alpha_\ell} \, . \tag{A.12}$$

Cette opération nous donne une phase φ_2 telle que

$$\varphi_2 = (-)^{X_2} \quad \text{avec} \quad X_2 = (n'_i - N_h)(n'_j - N_h)\,. \tag{A.13}$$

Il est alors intéressant de remarquer que l'ordre d'apparition des opérateurs $\hat{\mathrm{a}}^\dagger_{a_\ell}$ dans (A.12) est inversé par rapport au classement des $\hat{\mathrm{a}}_{a_\ell}$ de (A.5a). Ce classement des $\hat{\mathrm{a}}^\dagger_{a_\ell}$ respecte alors complètement notre convention. Pour les mêmes raisons, le classement des $\hat{\mathrm{a}}_{\alpha_\ell}$ de (A.12) respecte également cette convention.

Pour déterminer le facteur de phase total, il ne reste alors plus qu'à réordonner les opérateurs de création d'une part et d'annihilation d'aute part.

Étape 3 : Ici nous ne nous occuperons que des opérateurs de création.

$$\underbrace{\prod_{\substack{\ell=1\\ \beta_\ell\notin\mathcal{P}}}^{n_j} \hat{\mathrm{a}}^\dagger_{\beta_\ell} \prod_{\substack{\ell=1\\ a_\ell\notin\mathcal{H}}}^{n'_i} \hat{\mathrm{a}}^\dagger_{a_\ell} \prod_{\substack{\ell=n'_j\\ b_\ell\notin\mathcal{H}}}^{1} \hat{\mathrm{a}}_{b_\ell} \prod_{\substack{\ell=n_i\\ \alpha_\ell\notin\mathcal{P}}}^{1} \hat{\mathrm{a}}_{\alpha_\ell}}_{(*)} = \varphi_3 \prod_{\substack{\ell=1\\ \gamma_\ell\notin\{\mathcal{H}\cup\mathcal{P}\}}}^{n} \hat{\mathrm{a}}^\dagger_{\gamma_\ell} \prod_{\substack{\ell=n'_j\\ b_\ell\notin\mathcal{H}}}^{1} \hat{\mathrm{a}}_{b_\ell} \prod_{\substack{\ell=n_i\\ \alpha_\ell\notin\mathcal{P}}}^{1} \hat{\mathrm{a}}_{\alpha_\ell}\,, \tag{A.14}$$

où les γ_ℓ regroupent les β_ℓ et les a_ℓ de façon ordonnée.

Le terme noté ci-dessus par le symbole $(*)$ peut être explicitement écrit comme

$$(*) = \underbrace{\hat{\mathrm{n}}^\dagger_{\beta_1}\cdots\hat{\mathrm{n}}^\dagger_{\beta_{\nu_j}}}_{\substack{(\nu_j-N_p^\nu)\\ neutrons}} \underbrace{\hat{\mathrm{p}}^\dagger_{\beta_{\nu_j+1}}\cdots\hat{\mathrm{p}}^\dagger_{\beta_{n_j}}}_{\substack{(\pi_j-N_p^\pi)\\ protons}} \underbrace{\hat{\mathrm{n}}^\dagger_{a_1}\cdots\hat{\mathrm{n}}^\dagger_{a_{\nu'_i}}}_{\substack{(\nu'_i-N_h^\nu)\\ neutrons}} \underbrace{\hat{\mathrm{p}}^\dagger_{a_{\nu'_i+1}}\cdots\hat{\mathrm{p}}^\dagger_{a_{n'_i}}}_{\substack{(\pi'_i-N_h^\pi)\\ protons}}\,, \tag{A.15}$$

où les opérateurs $\hat{\mathrm{n}}^\dagger_i$ sont des $\hat{\mathrm{a}}^\dagger_i$ agissant sur des états de neutrons (i.e. $\tau_i = \frac{1}{2}$) et les opérateurs $\hat{\mathrm{p}}^\dagger_i$ sont des $\hat{\mathrm{a}}^\dagger_i$ agissant sur des états de protons (i.e. $\tau_i = -\frac{1}{2}$).

En déplaçant les $(\nu'_i - N_h^\nu)$ opérateurs $\hat{\mathrm{n}}^\dagger$ de (A.15) devant tous les autres, et sans changer leur ordre relatif, l'ensemble des opérateurs $\hat{\mathrm{n}}^\dagger$ se retrouve ordonné car les états individuels a_l sont des états de trou de $|\Phi_0\rangle$ et ont donc une énergie moins élevée que les états de particule β_l de $|\Phi_0\rangle$. On répète l'opération pour les protons en permutant les deux groupes d'opérateurs $\hat{\mathrm{p}}^\dagger$ de (A.15). Cette manipulation engendre une phase φ_3 telle que

$$\varphi_3 = (-)^{X_3} \quad \text{avec} \quad X_3 = (n_j - N_p)(\nu'_i - N_h^\nu) + (\pi_j - N_p^\pi)(\pi'_i - N_h^\pi)\,. \tag{A.16}$$

Étape 4 : Enfin, nous nous occupons des opérateurs d'annihilation :

$$\prod_{\substack{\ell=1\\ \gamma_\ell\notin\{\mathcal{H}\cup\mathcal{P}\}}}^{n} \hat{\mathrm{a}}^\dagger_{\gamma_\ell} \underbrace{\prod_{\substack{\ell=n'_j\\ b_\ell\notin\mathcal{H}}}^{1} \hat{\mathrm{a}}_{b_\ell} \prod_{\substack{\ell=n_i\\ \alpha_\ell\notin\mathcal{P}}}^{1} \hat{\mathrm{a}}_{\alpha_\ell}}_{(**)} = \varphi_4 \prod_{\substack{\ell=1\\ \gamma_\ell\notin\{\mathcal{H}\cup\mathcal{P}\}}}^{n} \hat{\mathrm{a}}^\dagger_{\gamma_\ell} \prod_{\substack{\ell=n'\\ c_\ell\notin\{\mathcal{H}\cup\mathcal{P}\}}}^{1} \hat{\mathrm{a}}_{c_\ell}\,, \tag{A.17}$$

où les c_ℓ regroupent les α_ℓ et les b_ℓ de façon ordonnée.

Le terme noté ci-dessus par le symbole $(**)$ peut être explicitement écrit comme

$$(**) = \underbrace{\hat{\mathrm{p}}_{b_{n'_j}}\cdots\hat{\mathrm{p}}_{b_{\nu'_j+1}}}_{\substack{(\pi'_j-N_h^\pi)\\ protons}} \underbrace{\hat{\mathrm{n}}_{b_{\nu'_j}}\cdots\hat{\mathrm{n}}_{b_1}}_{\substack{(\nu'_j-N_h^\nu)\\ neutrons}} \underbrace{\hat{\mathrm{p}}_{\alpha_{n_i}}\cdots\hat{\mathrm{p}}_{\alpha_{\nu_i+1}}}_{\substack{(\pi_i-N_p^\pi)\\ protons}} \underbrace{\hat{\mathrm{n}}_{\alpha_{\nu_i}}\cdots\hat{\mathrm{n}}_{\alpha_1}}_{\substack{(\nu_i-N_p^\nu)\\ neutrons}}\,, \tag{A.18}$$

où les opérateurs $\hat{\mathrm{n}}_i$ sont des $\hat{\mathrm{a}}_i$ agissant sur des états de neutrons et les opérateurs $\hat{\mathrm{p}}_i$ sont des $\hat{\mathrm{a}}_i$ agissant sur des états de protons.

Pour rétablir l'ordre de notre convention, on effectue une manipulation similaire à celle de l'étape précédente. On déplace d'abord les $(\pi_i - N_p^\pi)$ opérateurs $\hat{\mathrm{p}}$ de (A.18) devant tout le reste puis on permute les deux groupes d'opérateurs $\hat{\mathrm{n}}$. Cette opération introduit une phase φ_4 telle que

$$\varphi_4 = (-)^{X_4} \quad \text{avec} \quad X_4 = (\pi_i - N_p^\pi)(n'_j - N_h) + (\nu_i - N_p^\nu)(\nu'_j - N_h^\nu)\,. \tag{A.19}$$

Expression finale de $|\Phi_j\rangle$ en fonction de $|\Phi_i\rangle$

Finalement, le déterminant de Slater $|\Phi_j\rangle$ va s'exprimer comme une excitation np-n'h par rapport à $|\Phi_i\rangle$ selon le relation très générale

$$|\Phi_j\rangle = \epsilon_j\,\epsilon_i\,\varphi_{ij} \prod_{\substack{\ell=1 \\ \gamma_\ell \notin \{\mathcal{H}\cup\mathcal{P}\}}}^{n} \hat{\mathrm{a}}^\dagger_{\gamma_\ell} \prod_{\substack{\ell=n' \\ c_\ell \notin \{\mathcal{H}\cup\mathcal{P}\}}}^{1} \hat{\mathrm{a}}_{c_\ell} |\Phi_i\rangle\,. \tag{A.20}$$

Plus précisement, on peut détailler (A.20) pour obtenir explicitement

$$|\Phi_j\rangle = \epsilon_j\,\epsilon_i\,\varphi_{ij} \left(\prod_{\substack{\ell=1 \\ a_\ell \notin \mathcal{H}}}^{\nu'_i} \hat{\mathrm{n}}^\dagger_{a_\ell} \prod_{\substack{\ell=1 \\ \beta_\ell \notin \mathcal{P}}}^{\nu_j} \hat{\mathrm{n}}^\dagger_{\beta_\ell} \prod_{\substack{\ell=\nu'_i+1 \\ a_\ell \notin \mathcal{H}}}^{n'_i} \hat{\mathrm{p}}^\dagger_{a_\ell} \prod_{\substack{\ell=\nu_j+1 \\ \beta_\ell \notin \mathcal{P}}}^{n_j} \hat{\mathrm{p}}^\dagger_{\beta_\ell} \right) \left(\prod_{\substack{\ell=n_i \\ \alpha_\ell \notin \mathcal{P}}}^{\nu_i+1} \hat{\mathrm{p}}_{\alpha_\ell} \prod_{\substack{\ell=n'_j \\ b_\ell \notin \mathcal{H}}}^{\nu'_j+1} \hat{\mathrm{p}}_{b_\ell} \prod_{\substack{\ell=\nu_i \\ \alpha_\ell \notin \mathcal{P}}}^{1} \hat{\mathrm{n}}_{\alpha_\ell} \prod_{\substack{\ell=\nu'_j \\ b_\ell \notin \mathcal{H}}}^{1} \hat{\mathrm{n}}_{b_\ell} \right) |\Phi_i\rangle\,, \tag{A.21}$$

où l'on peut identifier n et n' à

$$n = n'_i + n_j - \mathcal{N} \quad \text{et} \quad n' = n_i + n'_j - \mathcal{N}\,. \tag{A.22}$$

A.4 Expression finale du facteur de phase

Le facteur de phase total se déduit des phases de chaque étape par

$$\varphi_{ij} = \prod_{\ell=1}^{4} \varphi_\ell = (-)^X \quad \text{avec} \quad X = \sum_{\ell=1}^{4} X_\ell\,. \tag{A.23}$$

A.4.1 Cas général

Lorsque l'on écrit qu'une phase φ est donnée par $(-)^a$, alors a est toujours défini à un nombre pair près et au signe près. Ainsi, en oubliant les termes pairs, le nombre X définissant la phase (A.23), peut s'exprimer comme la somme suivante de termes positifs

$$\begin{aligned} X = &\sum_{\ell=1}^{N_p} (p'_\ell + p_\ell) + \sum_{\ell=1}^{N_h} (h'_\ell + h_\ell) + N_h + \mathcal{N}(n_i + n_j + n'_i + n'_j) \\ &+ N_p^\nu(\pi'_i + \pi'_j) + N_h^\pi(\nu_i + \nu_j) + N_p(n'_i + n'_j) \\ &+ (n_i + n'_i)(n_j + n'_j) + n_i n_j + \nu_i \pi'_j + \nu_j \pi'_i\,. \end{aligned}$$

N.B. : On peut alors remarquer que X (et donc φ_{ij}) est symétrique dans l'échange de i et j.

A.4.2 Cas où $|\Phi_j\rangle = |\Phi_i\rangle$: vérification

Une vérification simple de l'expression de X consiste à considérer le cas trivial où $|\Phi_j\rangle = |\Phi_i\rangle$ et pour lequel la phase doit être toujours égale à 1.

Si $i = j$, les égalités suivantes sont alors vérifiées :

$$N_h = n'_i \quad , \quad p'_\ell = p_\ell \quad \text{et} \quad h'_\ell = h_\ell \quad \forall\, \ell \tag{A.24}$$

Dans ces conditions, on a

$$\begin{aligned} X_{i=j} &= 2\sum_{\ell=1}^{N_p} p_\ell + 2\sum_{\ell=1}^{N_h} h_\ell + n'_i + 2\mathcal{N}(n_i + n'_i) + 2\pi'_i N_p^\nu + 2\nu_i N_h^\pi + 2n'_i N_p \\ &\quad + (n_i + n'_i)^2 + n_i^2 + 2\nu_i\pi'_i \\ &\equiv n'_i + n_i^2 + n_i'^2 + 2n_i n'_i + n_i^2 \quad [2] \\ &\equiv n'_i(n'_i + 1) \quad [2] \\ X_{i=j} &= 2k\,,\ k \in \mathbb{Z}\,, \end{aligned}$$

ce qui nous donne bien une phase $\varphi_{ii} = 1$.

A.4.3 Cas de la conservation du nombre de neutrons et du nombre de protons

Dans le cadre de notre étude, les excitations de $|\Phi_0\rangle$ considérées conservent toujours le nombre de neutrons et le nombre de protons et par conséquent le nombre total de nucléons. Il convient donc de donner l'expression du nombre X dans ce cas particulier :

$$\begin{aligned} X \equiv &\sum_{\ell=1}^{N_p}(p'_\ell + p_\ell) + \sum_{\ell=1}^{N_h}(h'_\ell + h_\ell) + N_h + N_p(n_i + n_j) \\ &+ N_p^\nu(\pi_i + \pi_j) + N_h^\pi(\nu_i + \nu_j) + \nu_i\nu_j + \pi_i\pi_j \quad [2]\,. \end{aligned} \tag{A.25}$$

Annexe B

Calcul d'éléments de matrice à N corps

Contenu du chapitre

B.1 Éléments de matrice d'opérateurs à p corps : cas général

B.1.1 Définitions

- ◦ Opérateurs à p corps
- ◦ États de fermions indépendants et antisymétriseur
- ◦ Excitation n-particules–n-trous : notation

B.1.2 Élément de matrice d'un opérateur à p corps entre $|\Phi\rangle$ et $|\Phi'\rangle$

- ◦ Cas général

B.2 Éléments de matrice de produits normaux d'opérateurs

B.2.1 Produit normal d'opérateur à 1 corps

- ◦ Cas où $|\Phi'\rangle = |\Phi\rangle$
- ◦ Cas où $|\Phi'\rangle = |\Phi_1\rangle$

B.2.2 Produit normal d'opérateur à 2 corps

- ◦ Cas où $|\Phi'\rangle = |\Phi\rangle$
- ◦ Cas où $|\Phi'\rangle = |\Phi_1\rangle$
- ◦ Cas où $|\Phi'\rangle = |\Phi_2\rangle$

B.1 Éléments de matrice d'opérateurs à p corps : cas général

B.1.1 Définitions

◦ Opérateurs à p corps

On appelle opérateur à p corps (avec $p \geqslant 1$), un opérateur du sous-espace de Fock à N particules, $S(N)$, s'écrivant comme la somme d'opérateurs agissant dans $S(p)$

$$\hat{\mathcal{O}}^{(p)} = \frac{1}{p!} \underbrace{\sum_{i_1} \sum_{i_2} \cdots \sum_{i_p}}_{i_1 \neq i_2 \neq \cdots \neq i_p} \hat{o}_{\{i_\ell | \ell = 1,p\}} = \frac{1}{p!} \sum_{\substack{\{i_\ell | \ell = 1,p\} \\ i_\ell \neq i_{\ell'}}} \hat{o}_{\{i_\ell | \ell = 1,p\}} \,. \tag{B.1}$$

L'opérateur $\hat{o}_{\{i_\ell | \ell = 1,p\}}$ agira de la même façon sur les variables dynamiques de chacune des p particules dans $S(p)$. Il commutera donc avec toute permutation $\hat{P}$ de ces p indices.

Exemples :

$$\hat{\mathcal{O}}^{(1)} = \sum_i \hat{o}_i \quad ; \quad \hat{\mathcal{O}}^{(2)} = \frac{1}{2}\sum_{i\neq j} \hat{o}_{ij} \quad ; \quad \hat{\mathcal{O}}^{(3)} = \frac{1}{6}\sum_{i\neq j\neq k} \hat{o}_{ijk} \quad \text{etc}\ldots \tag{B.2}$$

Remarque : Dans ce qui suivra (et par souci de simplicité) un opérateur à p corps agissant dans $S(p)$ sera noté $\hat{o}_p$.

◦ <u>États de fermions indépendants et antisymétriseur</u>

Un état physique de N fermions indépendants est un déterminant de Slater, noté $|\Phi\rangle$,

$$|\Phi\rangle = \sqrt{N!}\,\hat{\mathcal{A}}\,|\phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_P \varepsilon(P)\,\hat{P}\,|\phi_1\phi_2\cdots\phi_N\rangle \tag{B.3}$$

où $\hat{\mathcal{A}}$ est l'antisymétriseur agissant sur l'état produit des N particules $|\phi\rangle = |\phi_1\phi_2\cdots\phi_N\rangle$. Cet opérateur additionne tous les états produits résultant des permutations P des coordonnées des N particules en les affectant d'un coefficient $\varepsilon(P)$ qui est la signature de la permutation P. Par la suite, on notera un tel état antisymétrisé $|\phi_1\widetilde{\phi_2\cdots\phi_N}\rangle$,

$$|\phi_1\widetilde{\phi_2\cdots\phi_N}\rangle = \sum_P \varepsilon(P)\,\hat{P}\,|\phi_1\phi_2\cdots\phi_N\rangle = N!\,\hat{\mathcal{A}}\,|\phi_1\phi_2\cdots\phi_N\rangle\,. \tag{B.4}$$

Considérons une permutation particulière P_0 parmi les $N!$ permutations possibles de notre ensemble de N états à une particule. On a alors,

$$\hat{P}_0\,\hat{\mathcal{A}} = \hat{\mathcal{A}}\,\hat{P}_0 = \varepsilon(P_0)\,\hat{\mathcal{A}}\,. \tag{B.5}$$

De plus, le symétriseur est un projecteur, donc

$$\hat{\mathcal{A}}^\dagger = \hat{\mathcal{A}} \quad \text{et} \quad \hat{\mathcal{A}}^2 = \hat{\mathcal{A}}\,. \tag{B.6}$$

◦ <u>Excitation n-particules–n-trous : notation</u>

Soit un nouvel état de fermions indépendants $|\Phi'\rangle$ différant de $|\Phi\rangle$ par une excitation n-particules–n-trous (npnh). Cela veut dire qu'un sous-ensemble de n particules, initialement dans des états ϕ_{a_1}, $\phi_{a_2}\ldots\phi_{a_n}$ dans l'état produit $|\phi\rangle$ vont se retrouver dans des états ϕ_{α_1}, $\phi_{\alpha_2}\ldots\phi_{\alpha_n}$ dans l'état produit $|\phi'\rangle$ définissant $|\Phi'\rangle$

$$|\Phi'\rangle = \sqrt{N!}\,\hat{\mathcal{A}}\,|\phi'\rangle\,. \tag{B.7}$$

De même que $|\phi\rangle = |\phi_1\phi_2\phi_3\cdots\phi_N\rangle$, on a $|\phi'\rangle = |\phi'_1\phi'_2\phi'_3\cdots\phi'_N\rangle$ avec

$$|\phi'_k\rangle = |\phi_k\rangle \quad \forall\, k \notin \{a_\ell\,|\,\ell = 1,n\} \quad \text{et} \tag{B.8}$$

$$|\phi'_k\rangle = |\phi_{\alpha_\ell}\rangle \quad \text{si} \quad |\phi_k\rangle = |\phi_{a_\ell}\rangle \quad \forall\,\ell = 1,n\,. \tag{B.9}$$

En seconde quantification, une telle excitation est notée (voir annexe A)

$$|\Phi'\rangle = \varphi \prod_{\ell=1}^{n} \hat{\mathrm{a}}^\dagger_{\alpha_\ell} \prod_{\ell=n}^{1} \hat{\mathrm{a}}^\dagger_{a_\ell} |\Phi\rangle\,. \tag{B.10}$$

B.1.2 Élément de matrice d'un opérateur à p corps entre $|\Phi\rangle$ et $|\Phi'\rangle$

Dans cette section, on s'intéresse à l'expression générale d'un éléments de matrice d'un opérateur à p corps (avec $p \geqslant 1$) entre deux états de fermions indépendants différant d'une excitations $npnh$ avec $p \geqslant n \geqslant 0$. L'expression ainsi obtenue sera ensuite appliquée dans différents cas simples où l'on retrouvera les réultats du théorème de Wick faible. Par soucis de simplicité de l'exposé, on ne tiendra pas compte ici de la phase relative φ issue de la comparaison des deux déterminants de Slater. Le calcul de cette phase fait l'objet de l'annexe A.

◦ Cas général

$$\langle\Phi|\hat{\mathcal{O}}^{(p)}|\Phi'\rangle = N!\langle\phi|\hat{\mathcal{A}}^\dagger\hat{\mathcal{O}}^{(p)}\hat{\mathcal{A}}|\phi'\rangle = N!\langle\phi|\hat{\mathcal{O}}^{(p)}\hat{\mathcal{A}}|\phi'\rangle \tag{B.11}$$

Pour obtenir le troisième membre de (B.11) on a utilisé les propriétés (B.6) ainsi que le fait que $\hat{\mathcal{A}}$ commute avec $\hat{\mathcal{O}}^{(p)}$.

Explicitant l'expression de l'antisymétriseur et utilisant la définition de l'opérateur à p corps, on obtient

$$\langle\Phi|\hat{\mathcal{O}}^{(p)}|\Phi'\rangle = \frac{1}{p!}\sum_P \varepsilon(P) \sum_{\substack{\{i_\ell|\ell=1,p\}\\ i_\ell\neq i_{\ell'}}} \langle\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_p}|\hat{o}_p|\phi'_{P(i_1)}\cdots\phi'_{P(i_p)}\rangle \prod_{j\notin\{i_1,\ldots,i_p\}} \langle\phi_j|\phi'_{P(j)}\rangle \tag{B.12}$$

Examinons maintenant quelles sont les contributions non nulles à l'élément de matrice (B.12). Tout d'abord, si l'un des états $|\phi_{a_\ell}\rangle$ apparaît dans le produit de recouvrements placé en fin de l'expression (B.12), celui-ci sera nul car chacun des $|\phi_{a_\ell}\rangle$ est orthogonal à tous les autres états à une particule occupés dans $|\Phi\rangle$ et est différent des états $|\phi_{\alpha_\ell}\rangle$ par hypothèse. Les seules contributions non nulles seront donc à chercher parmi celles pour lesquelles ces états $|\phi_{a_\ell}\rangle$ et $|\phi_{\alpha_\ell}\rangle$ sont tous présents simultanément dans l'élément de matrice de l'opérateur $\hat{o}_p$ agissant dans l'espace des p particules. Ainsi,

$$\langle\Phi|\hat{\mathcal{O}}^{(p)}|\Phi'\rangle = \frac{1}{p!}\sum_P \varepsilon(P) \underbrace{\sum_{j_1=1}^{p}\sum_{j_2=1}^{p}\cdots\sum_{j_n=1}^{p}}_{j_k\neq j_{k'}} \sum_{\substack{\{i_\ell|\ell=1,p\}\\ \ell\notin\{j_k|k=1,n\}\\ i_\ell\neq i_{\ell'}}} \prod_{\substack{j\neq i_\ell\\ \ell\in\{1,p\}}} \langle\phi_j|\phi_{P(j)}\rangle \times$$
$$\langle\phi_{i_1}\cdots\phi_{a_1}\cdots\phi_{a_2}\cdots\phi_{a_n}\cdots\phi_{i_p}|\hat{o}_p|\phi_{P(i_1)}\cdots\phi_{P(\alpha_1)}\cdots\phi_{P(\alpha_2)}\cdots\phi_{P(\alpha_n)}\cdots\phi_{P(i_p)}\rangle\,. \tag{B.13}$$

Dans (B.13) les indices i_{j_k} sont fixes et désignent les positions des états $|\phi_{a_\ell}\rangle$ dans le bra et $|\phi_{\alpha_\ell}\rangle$ dans le ket de l'élément de matrice de $\hat{o}_p$. Ainsi, $|\phi_{a_1}\rangle$ et $|\phi_{\alpha_1}\rangle$ sont à la position i_{j_1} etc...

Il est clair que seules les permutations autorisées ici (i.e. correspondant à une contribution non nulle à l'élément de matrice) sont celles qui laisseront invariants les états n'apparaissant pas dans l'élément de matrice de $\hat{o}_p$. En effet, dans le cas contraire, il existera alors au moins un état $|\phi_{P(j)}\rangle \neq |\phi_j\rangle$ annulant leur recouvrement.

Pour cet ensemble de permutations autorisées, le produit des recouvrements sera alors toujours égal à 1 et on aura,

$$\langle\Phi|\hat{\mathcal{O}}^{(p)}|\Phi'\rangle = \frac{1}{p!}\sum_{\{j_1\neq\cdots\neq j_n\}=1}^{p} \sum_{\substack{\{i_\ell|\ell=1,p\}\\ \ell\notin\{j_k|k=1,n\}\\ i_\ell\neq i_{\ell'}}} \langle\phi_{i_1}\cdots\phi_{a_1}\cdots\phi_{a_n}\cdots\phi_{i_p}|\hat{o}_p|\phi_{i_1}\cdots\widetilde{\phi_{\alpha_1}\cdots\phi_{\alpha_n}}\cdots\phi_{i_p}\rangle\,. \tag{B.14}$$

Finalement, comme l'opérateur $\hat{o}_p$ commute avec toute les permutations de ses indices, on peut écrire tous les éléments de matrices de (B.14) sous la même forme, par exemple, en rangeant tous les

états $|\phi_{a_\ell}\rangle$ et $|\phi_{\alpha_\ell}\rangle$ à la fin du bra et du ket. Ces éléments de matrice deviennent alors indépendants des indices j_k et se factorisent. La somme multiple sur les indices j_k comprenant $p(p-1)(p-2)\cdots(p-n+1)$ termes, on obtient

$$\boxed{\langle\Phi|\hat{\mathcal{O}}^{(p)}|\Phi'\rangle = \frac{1}{(p-n)!}\sum_{\substack{\{i_\ell|\ell=1,p-n\}\\ i_\ell\neq i_{\ell'}}}\langle\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_{p-n}}\phi_{a_1}\cdots\phi_{a_n}|\hat{o}_p|\phi_{i_1}\cdots\widetilde{\phi_{i_{p-n}}\phi_{\alpha_1}}\cdots\phi_{\alpha_n}\rangle}\,. \tag{B.15}$$

L'opérateur $\hat{o}_p$ étant invariant par permutation de ses p indices, on peut dériver une expression analogue où les sommes portent sur des indices ordonnés. On obtient alors $(p-n)!$ termes identiques se factorisant,

$$\boxed{\langle\Phi|\hat{\mathcal{O}}^{(p)}|\Phi'\rangle = \sum_{i_1<i_2<\cdots<i_{p-n}}\langle\phi_{i_1}\cdots\phi_{i_{p-n}}\phi_{a_1}\cdots\phi_{a_n}|\hat{o}_p|\phi_{i_1}\cdots\widetilde{\phi_{i_{p-n}}\phi_{\alpha_1}}\cdots\phi_{\alpha_n}\rangle}\,. \tag{B.16}$$

Exemples de cas simples Dans cette partie, on désignera par $|\Phi\rangle$ notre état de référence de N fermions indépendants et par $|\Phi_1\rangle, |\Phi_2\rangle\ldots|\Phi_n\rangle$ différents états résultants d'excitations 1p1h, 2p2h...npnh,

$$|\Phi_1\rangle = \hat{a}^\dagger_\alpha\hat{a}_a|\Phi\rangle\,, \tag{B.17}$$
$$|\Phi_2\rangle = \hat{a}^\dagger_\alpha\hat{a}^\dagger_\beta\hat{a}_b\hat{a}_a|\Phi\rangle\,, \tag{B.18}$$
$$|\Phi_3\rangle = \hat{a}^\dagger_\alpha\hat{a}^\dagger_\beta\hat{a}^\dagger_\gamma\hat{a}_c\hat{a}_b\hat{a}_a|\Phi\rangle\,, \tag{B.19}$$
$$|\Phi_4\rangle = \hat{a}^\dagger_\alpha\hat{a}^\dagger_\beta\hat{a}^\dagger_\gamma\hat{a}^\dagger_\delta\hat{a}_d\hat{a}_c\hat{a}_b\hat{a}_a|\Phi\rangle\,. \tag{B.20}$$

On notera également un état produit $|\phi\rangle$ de façon simplifiée afin d'alléger les expressions,

$$|\phi\rangle = |\phi_1\phi_2\phi_3\cdots\phi_N\rangle \equiv |123\cdots N\rangle\,. \tag{B.21}$$

Par application des formules générales (B.15) et (B.16) aux éléments de matrice d'opérateur à p corps entre $|\Phi\rangle$ et les excitations $|\Phi_i\rangle$, nous allons retrouver les résultats bien connus du théorème de Wick [120] faible.

Opérateur à 1 corps

$$\langle\Phi|\hat{\mathcal{O}}^{(1)}|\Phi\rangle = \sum_{i\in\Phi}\langle i|\hat{o}_1|i\rangle \tag{B.22}$$
$$\langle\Phi|\hat{\mathcal{O}}^{(1)}|\Phi_1\rangle = \langle a|\hat{o}_1|\alpha\rangle \tag{B.23}$$

Opérateur à 2 corps

$$\langle\Phi|\hat{\mathcal{O}}^{(2)}|\Phi\rangle = \frac{1}{2}\sum_{(i\neq j)\in\Phi}\langle ij|\hat{o}_2|\widetilde{ij}\rangle = \sum_{(i<j)\in\Phi}\langle ij|\hat{o}_2|\widetilde{ij}\rangle \tag{B.24}$$
$$\langle\Phi|\hat{\mathcal{O}}^{(2)}|\Phi_1\rangle = \sum_{i\in\Phi}\langle ia|\hat{o}_2|\widetilde{i\alpha}\rangle \tag{B.25}$$
$$\langle\Phi|\hat{\mathcal{O}}^{(2)}|\Phi_2\rangle = \langle ab|\hat{o}_2|\widetilde{\alpha\beta}\rangle \tag{B.26}$$

Opérateur à 3 corps

$$\langle\Phi|\hat{\mathcal{O}}^{(3)}|\Phi\rangle = \frac{1}{6}\sum_{(i\neq j\neq k)\in\Phi}\langle ijk|\hat{o}_3|\widetilde{ijk}\rangle = \sum_{(i<j<k)\in\Phi}\langle ijk|\hat{o}_3|\widetilde{ijk}\rangle \tag{B.27}$$

$$\langle\Phi|\hat{\mathcal{O}}^{(3)}|\Phi_1\rangle = \frac{1}{2}\sum_{(i\neq j)\in\Phi}\langle ija|\hat{o}_3|\widetilde{ij\alpha}\rangle = \sum_{(i<j)\in\Phi}\langle ija|\hat{o}_3|\widetilde{ij\alpha}\rangle \tag{B.28}$$

$$\langle\Phi|\hat{\mathcal{O}}^{(3)}|\Phi_2\rangle = \sum_{i\in\Phi}\langle iab|\hat{o}_3|\widetilde{i\alpha\beta}\rangle \tag{B.29}$$

$$\langle\Phi|\hat{\mathcal{O}}^{(3)}|\Phi_3\rangle = \langle abc|\hat{o}_3|\widetilde{\alpha\beta\gamma}\rangle \tag{B.30}$$

Opérateur à 4 corps

$$\langle\Phi|\hat{\mathcal{O}}^{(4)}|\Phi\rangle = \frac{1}{24}\sum_{(i\neq j\neq k\neq\ell)\in\Phi}\langle ijk\ell|\hat{o}_4|\widetilde{ijk\ell}\rangle = \sum_{(i<j<k<\ell)\in\Phi}\langle ijk\ell|\hat{o}_4|\widetilde{ijk\ell}\rangle \tag{B.31}$$

$$\langle\Phi|\hat{\mathcal{O}}^{(4)}|\Phi_1\rangle = \frac{1}{6}\sum_{(i\neq j\neq k)\in\Phi}\langle ijka|\hat{o}_4|\widetilde{ijk\alpha}\rangle = \sum_{(i<j<k)\in\Phi}\langle ijka|\hat{o}_4|\widetilde{ijk\alpha}\rangle \tag{B.32}$$

$$\langle\Phi|\hat{\mathcal{O}}^{(4)}|\Phi_2\rangle = \frac{1}{2}\sum_{(i\neq j)\in\Phi}\langle ijab|\hat{o}_4|\widetilde{ij\alpha\beta}\rangle = \sum_{(i<j)\in\Phi}\langle ijab|\hat{o}_4|\widetilde{ij\alpha\beta}\rangle \tag{B.33}$$

$$\langle\Phi|\hat{\mathcal{O}}^{(4)}|\Phi_3\rangle = \sum_{i\in\Phi}\langle iabc|\hat{o}_4|\widetilde{i\alpha\beta\gamma}\rangle \tag{B.34}$$

$$\langle\Phi|\hat{\mathcal{O}}^{(4)}|\Phi_4\rangle = \langle abcd|\hat{o}_4|\widetilde{\alpha\beta\gamma\delta}\rangle \tag{B.35}$$

B.2 Éléments de matrice de produits normaux d'opérateurs

Dans cette section, nous nous proposons d'utiliser les résultats de la section précédente afin de calculer les éléments de matrice à N corps d'opérateurs particuliers. Il s'agit de produits normaux d'opérateurs à un ou deux corps pour un état de référence donné $|\Phi_0\rangle$.

Nous donnerons ici les éléments de matrice de ces opérateurs entre un état $|\Phi\rangle$ et un état $|\Phi'\rangle$ s'écrivant comme une excitation particule-trou sur $|\Phi\rangle$ (telle que $|\Phi_1\rangle$ et $|\Phi_2\rangle$ définis à la section précédente. De plus, dans tout ce qui suit, on supposera que l'état $|\Phi\rangle$ s'exprime, par rapport à $|\Phi_0\rangle$, comme

$$|\Phi\rangle = \prod_{\ell=1}^{n}\hat{\mathrm{a}}^{\dagger}_{\mu_\ell}\prod_{\ell=n}^{1}\hat{\mathrm{a}}_{m_\ell}|\Phi_0\rangle\,. \tag{B.36}$$

B.2.1 Produit normal d'opérateur à 1 corps

Le produit normal d'un opérateur à un corps $\hat{\mathcal{O}}^{(1)}$ pour les opérateurs de quasi-particules défini par rapport à vide $|\Phi_0\rangle$ peut s'écrire comme

$$:\hat{\mathcal{O}}^{(1)}:_{\Phi_0} = \hat{\mathcal{O}}^{(1)} - \langle\Phi_0|\hat{\mathcal{O}}^{(1)}|\Phi_0\rangle\,. \tag{B.37}$$

Par la suite, afin de ne pas alourdir les notations, nous omettrons la référence à $|\Phi_0\rangle$ en indice du porduit normal.

◦ Cas où $|\Phi'\rangle = |\Phi\rangle$

$$\langle\Phi| :\hat{\mathcal{O}}^{(1)}: |\Phi\rangle = \langle\Phi|\hat{\mathcal{O}}^{(1)}|\Phi\rangle - \langle\Phi_0|\hat{\mathcal{O}}^{(1)}|\Phi_0\rangle = \sum_{i\in\mathcal{H}}\langle i|\hat{O}_1|i\rangle - \sum_{i\in\mathcal{H}_0}\langle i|\hat{O}_1|i\rangle \,, \tag{B.38}$$

où l'on désigne par $\mathcal{H}$ l'ensemble des états occupés de $|\Phi\rangle$ et par $\mathcal{H}_0$ ceux de $|\Phi_0\rangle$.

On écrit alors,

$$\mathcal{H} \equiv (\mathcal{H}\cap\mathcal{H}_0)\cup(\mathcal{H}\setminus\mathcal{H}_0) \,, \tag{B.39}$$
$$\mathcal{H}_0 \equiv (\mathcal{H}_0\cap\mathcal{H})\cup(\mathcal{H}_0\setminus\mathcal{H}) \,. \tag{B.40}$$

Ainsi,

$$\langle\Phi| :\hat{\mathcal{O}}^{(1)}: |\Phi\rangle = \sum_{i\in\mathcal{H}\setminus\mathcal{H}_0}\langle i|\hat{O}_1|i\rangle - \sum_{i\in\mathcal{H}_0\setminus\mathcal{H}}\langle i|\hat{O}_1|i\rangle \,. \tag{B.41}$$

En utilisant la forme (B.36) pour l'état $|\Phi\rangle$, on obtient finalement,

$$\langle\Phi| :\hat{\mathcal{O}}^{(1)}: |\Phi\rangle = \sum_{\ell=1}^{n}\langle\mu_\ell|\hat{O}_1|\mu_\ell\rangle - \sum_{\ell=1}^{n}\langle m_\ell|\hat{O}_1|m_\ell\rangle \,. \tag{B.42}$$

◦ Cas où $|\Phi'\rangle = |\Phi_1\rangle$

$$\langle\Phi| :\hat{\mathcal{O}}^{(1)}: |\Phi_1\rangle = \langle\Phi|\hat{\mathcal{O}}^{(1)}|\Phi_1\rangle = \langle a|\hat{O}_1|\alpha\rangle \tag{B.43}$$

B.2.2 Produit normal d'opérateur à 2 corps

Le produit normal d'un opérateur à deux corps $\hat{\mathcal{O}}^{(2)}$ pour les opérateurs de quasi-particules défini par rapport à vide $|\Phi_0\rangle$ peut s'écrire comme

$$:\hat{\mathcal{O}}^{(2)}:_{\Phi_0} = \hat{\mathcal{O}}^{(2)} - \overline{\hat{\mathcal{O}}^{(2)}} + \langle\Phi_0|\hat{\mathcal{O}}^{(2)}|\Phi_0\rangle \,, \tag{B.44}$$

où $\overline{\hat{\mathcal{O}}^{(2)}}$ désigne la réduction à un corps de $\hat{\mathcal{O}}^{(2)}$ pour $|\Phi_0\rangle$. Là encore, nous omettrons la référence à $|\Phi_0\rangle$ en indice du produit normal.

◦ Cas où $|\Phi'\rangle = |\Phi\rangle$

$$\langle\Phi| :\hat{\mathcal{O}}^{(2)}: |\Phi\rangle = \langle\Phi|\hat{\mathcal{O}}^{(2)} - \overline{\hat{\mathcal{O}}^{(2)}}|\Phi\rangle + \langle\Phi_0|\hat{\mathcal{O}}^{(2)}|\Phi_0\rangle \tag{B.45}$$
$$= \frac{1}{2}\sum_{i,j\in\mathcal{H}}\langle ij|\hat{O}_2|\widetilde{ij}\rangle - \sum_{i\in\mathcal{H}}\sum_{j\in\mathcal{H}_0}\langle ij|\hat{O}_2|\widetilde{ij}\rangle + \frac{1}{2}\sum_{i,j\in\mathcal{H}_0}\langle ij|\hat{O}_2|\widetilde{ij}\rangle \,. \tag{B.46}$$

En utilisant les expressions (B.39) et (B.40), on obtient,

$$\langle\Phi| :\hat{\mathcal{O}}^{(2)}: |\Phi\rangle = \frac{1}{2}\left(\sum_{i\in\mathcal{H}\setminus\mathcal{H}_0} - \sum_{i\in\mathcal{H}_0\setminus\mathcal{H}}\right)\left(\sum_{j\in\mathcal{H}\setminus\mathcal{H}_0} - \sum_{j\in\mathcal{H}_0\setminus\mathcal{H}}\right)\langle ij|\hat{O}_2|\widetilde{ij}\rangle \tag{B.47}$$

En utilisant la forme (B.36) pour l'état $|\Phi\rangle$, on obtient finalement,

$$\langle\Phi|:\hat{\mathcal{O}}^{(2)}:|\Phi\rangle = \sum_{k=1}^{n}\sum_{\ell=1}^{n}\left[\frac{1}{2}\langle\mu_k\mu_\ell|\hat{O}_2|\widetilde{\mu_k\mu_\ell}\rangle + \frac{1}{2}\langle m_k m_\ell|\hat{O}_2|\widetilde{m_k m_\ell}\rangle - \langle\mu_k m_\ell|\hat{O}_2|\widetilde{\mu_k m_\ell}\rangle\right] \tag{B.48}$$

$$= \sum_{k=1}^{n}\left[\sum_{\ell>k}\left(\langle\mu_k\mu_\ell|\hat{O}_2|\widetilde{\mu_k\mu_\ell}\rangle + \langle m_k m_\ell|\hat{O}_2|\widetilde{m_k m_\ell}\rangle\right) - \sum_{\ell=1}^{n}\langle\mu_k m_\ell|\hat{O}_2|\widetilde{\mu_k m_\ell}\rangle\right] . \tag{B.49}$$

Cette dernière forme suppose que l'on est capable d'ordonner les états m_ℓ et μ_ℓ selon une relation d'ordre.

◦ Cas où $|\Phi'\rangle = |\Phi_1\rangle$

$$\langle\Phi|:\hat{\mathcal{O}}^{(2)}:|\Phi_1\rangle = \langle\Phi|\hat{\mathcal{O}}^{(2)} - \overline{\hat{\mathcal{O}}^{(2)}}|\Phi'\rangle \tag{B.50}$$

$$= \sum_{i\in\mathcal{H}}\langle ia|\hat{O}_2|\widetilde{i\alpha}\rangle - \langle a|\overline{\hat{O}_2}|\alpha\rangle \tag{B.51}$$

$$\langle\Phi|:\hat{\mathcal{O}}^{(2)}:|\Phi_1\rangle = \sum_{i\in\mathcal{H}}\langle ia|\hat{O}_2|\widetilde{i\alpha}\rangle - \sum_{k\in\mathcal{H}_0}\langle ka|\hat{O}_2|\widetilde{k\alpha}\rangle . \tag{B.52}$$

De même, en utilisant la forme (B.36) de $|\Phi\rangle$, (B.52) devient

$$\langle\Phi|:\hat{\mathcal{O}}^{(2)}:|\Phi_1\rangle = \sum_{\ell=1}^{n}\left[\langle\mu_\ell a|O_2|\widetilde{\mu_\ell\alpha}\rangle - \langle m_\ell a|O_2|\widetilde{m_\ell\alpha}\rangle\right] . \tag{B.53}$$

◦ Cas où $|\Phi'\rangle = |\Phi_2\rangle$

L'opérateur $\overline{\hat{\mathcal{O}}^{(2)}}$ étant un opérateur à un corps, seul $\hat{\mathcal{O}}^{(2)}$ contribuera à l'élément de matrice du produit normal :

$$\langle\Phi|:\hat{\mathcal{O}}^{(2)}:|\Phi_2\rangle = \langle\Phi|\mathcal{O}^{(2)}|\Phi_2\rangle = \langle ab|\hat{O}_2|\widetilde{\alpha\beta}\rangle . \tag{B.54}$$

Annexe C

Représentation des états individuels HF

Contenu du chapitre

C.1 La base B.O.H.S.A.

C.2 Décomposition des états HF dans la B.O.H.S.A.

C.3 Propriétés de symétrie de $\Phi_i(\mathbf{r},\sigma)$ par renversement du temps

C.3.1 État individuel de fermion et renversement du sens du temps

C.3.2 Application aux fonctions $f_i^{\pm}(z,\rho)$

C.1 La base B.O.H.S.A.

Les noyaux atomiques étant des systèmes confinés, la décomposition des états individuels HF sur une base d'états d'oscillateur harmonique semble a priori adaptée à leur description.

La résolution des équations de HF dépend des symétries des solutions. Les noyaux que nous considérons ici présentent une symétrie de rotation autour de l'axe z et la symétrie de réflexion droite-gauche. Ces symétries entraînent que la parité (π) et la projection sur l'axe z (Ω), du moment angulaire total $\hat{j}_z$ sont de bons nombres quantiques.

Compte tenu de ces symétries, les états individuels HF seront développés sur une base de fonctions d'onde d'oscillateur harmonique à symétrie axiale (B.O.H.S.A.), fonctions propres de la parité, de j_z et du hamiltonien à un corps suivant

$$\hat{h}_{\mathrm{HO}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \frac{1}{2}m\left(\omega_\perp^2\rho^2 + \omega_z^2 z^2\right) . \tag{C.1}$$

Le formalisme de la base B.O.H.S.A., également connue sous le nom de base asymptotique, à été utilisé pour résoudre les équations de HF [30] avec l'interaction effective de Skyrme ou encore pour calculer les éléments de matrice de l'interaction coulombienne, toujours dans HF [36].

Un état propre du hamiltonien (C.1) s'écrit comme

$$|n_z, n_\perp, \Lambda, \Sigma\rangle \equiv |n_z, \alpha, \beta, \Sigma\rangle = (-)^\beta \frac{(a_z^\dagger)^{n_z}(b_\alpha^\dagger)^\alpha (b_\beta^\dagger)^\beta}{\sqrt{n_z!\,\alpha!\,\beta!}}|000\rangle \otimes |\Sigma\rangle , \tag{C.2}$$

où n_z et $n_\perp$ sont respectivement, le nombre de phonons dans la direction de l'axe de déformation z et dans la direction perpendiculaire, associés aux fréquences d'oscillateur ω_z et $\omega_\perp$ respectivement. Le

nombre quantique Λ est celui associé à l'opérateur de moment cinétique orbital $\hat{l}_z$ et Σ, celui associé à l'opérateur $\hat{s}_z$.

Les paramètres α et β sont des nombres de phonons définis en fonction de $n_\perp$ et Λ par

$$\alpha = \frac{n_\perp + \Lambda}{2} \qquad \text{et} \qquad \beta = \frac{n_\perp - \Lambda}{2} \,. \tag{C.3}$$

Les constantes d'oscillateur dans la direction z et la direction perpendiculaire associées à une telle base sont définies par

$$\beta_z = \sqrt{\frac{m\omega_z}{\hbar}} \qquad \text{et} \qquad \beta_\perp = \sqrt{\frac{m\omega_\perp}{\hbar}} \,, \tag{C.4}$$

satisfaisant la relation $\beta_z \beta_\perp^2 = \beta_0^3$ où

$$\beta_0 = \sqrt{\frac{m\omega_0}{\hbar}} \tag{C.5}$$

est la constante de l'oscillateur harmonique sphérique associée à la fréquence ω_0 telle que $\omega_0^3 = \omega_z \omega_\perp^2$.

Le paramètre β_0 (également noté b dans la littérature) fixe la longueur caractéristique d'oscillateur tandis que la déformation du potentiel est mesurée par le paramètre q défini par

$$q = \frac{\omega_\perp}{\omega_z} = \frac{\beta_\perp^2}{\beta_z^2} = \frac{\beta_\perp^6}{\beta_0^6} \,. \tag{C.6}$$

En représentation des coordonnées ($\mathbf{r} \equiv \{\rho, z, \varphi\}, \sigma$), une fonction d'onde propre du hamiltonien (C.1) prend la forme

$$\langle \mathbf{r}, \sigma | n_z, n_\perp, \Lambda, \Sigma \rangle \equiv \Upsilon_{n_z, n_\perp, \Lambda, \Sigma}(\mathbf{r}, \sigma) = (-)^{\frac{\Lambda - |\Lambda|}{2}} \, \psi_{n_r}^{\Lambda}(\rho) \, \psi_{n_z}(z) \, \psi_\Lambda(\varphi) \, \chi_\Sigma(\sigma) \,, \tag{C.7}$$

où,

$$\psi_{n_r}^{\Lambda}(\rho) = N_{n_r}^{\Lambda} \, \sqrt{2} \beta_\perp \, \eta^{|\Lambda|/2} \, e^{\eta/2} \, L_{n_r}^{|\Lambda|}(\eta) \,, \tag{C.8}$$

$$\psi_{n_z}(z) = N_{n_z} \, \sqrt{\beta_z} \, e^{-\xi^2/2} \, H_{n_z}(\xi) \,, \tag{C.9}$$

$$\psi_\Lambda(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\mathrm{i}\Lambda\varphi} \,, \tag{C.10}$$

$$\chi_\Sigma(\sigma) \text{ est le spineur représentant la dépendance en spin de } \varphi_{n_z, n_\perp, \Lambda, \Sigma}(\mathbf{r}, \sigma) \,, \tag{C.11}$$

$$\text{et } n_r = \frac{1}{2}\big[n_\perp - |\Lambda|\big] \,. \tag{C.12}$$

Les coefficients $N_{n_r}^{\Lambda}$ et N_{n_z} sont les constantes de normalisation des fonctions $\psi_{n_r}^{\Lambda}(\rho)$ et $\psi_{n_z}(z)$ et sont donnés par

$$N_{n_r}^{\Lambda} = \sqrt{\frac{n_r!}{(n_r + |\Lambda|)!}} \qquad \text{et} \qquad N_{n_z} = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}\, 2^{n_z} \, n_z!}} \,. \tag{C.13}$$

Les fonctions $\psi_{n_r}^{\Lambda}(\rho)$ et $\psi_{n_z}(z)$ sont exprimées en fonctions des *coordonnées étirées* sans dimensions ξ et η définies par

$$\xi = z\beta_z \qquad \text{et} \qquad \eta = \rho^2 \beta_\perp^2 \,. \tag{C.14}$$

Enfin, $L_{n_r}^{\Lambda}(\eta)$ et $H_{n_z}(\xi)$ désignent les polynômes de Laguerre et d'Hermite (dans sa forme *physique*, $H_n(x)$ [122]) respectivement.

C.2 Décomposition des états HF dans la B.O.H.S.A.

Les fonctions d'ondes individuelles HF, notées ici $\Phi_i(\mathbf{r},\sigma)$, sont des spineurs dont les composantes sont notées $\phi_i^{\pm}(\mathbf{r})$

$$\Phi_i(\mathbf{r},\sigma) = \begin{pmatrix} \phi_i^+(\mathbf{r}) \\ \phi_i^-(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = \phi_i^+(\mathbf{r})|+\rangle + \phi_i^-(\mathbf{r})|-\rangle \,. \tag{C.15}$$

Malgré la symétrie axiale mais compte tenu de la présence d'un terme spin-orbit dans le champ HF des noyaux considérés, ni Λ ni Σ ne sont pas de bons nombres quantiques pour les états individuels. Le bon nombre quantique en l'occurence est Ω, associé à l'opérateur $\hat{j}_z$, projection sur z du moment angulaire total. Le nombre quantique Λ aura une valeur bien déterminée en fonction de Ω et du spin $\sigma = \pm\frac{1}{2}$,

$$\Lambda^{\pm} = \Omega \mp \frac{1}{2} \,. \tag{C.16}$$

Ainsi, pour une composante donnée $\phi_i^{\pm}(\mathbf{r})$ du spineur $\Phi_i(\mathbf{r},\sigma)$, la valeur fixe de Λ sera notée $\Lambda_i^{\pm}$. Ces composantes $\phi_i^{\pm}(\mathbf{r})$ se décomposent alors dans la B.O.H.S.A. comme

$$\phi_i^{\pm}(\mathbf{r}) = (-)^{\frac{\Lambda_i^{\pm}-|\Lambda_i^{\pm}|}{2}}\, \psi_{\Lambda_i^{\pm}}(\varphi)\, \sqrt{2\beta_z}\, \beta_\perp\, \eta^{|\Lambda_i^{\pm}|/2}\, e^{-(\xi^2+\eta)/2} \sum_\alpha C_\alpha^{(i)} N_{n_r}^{\Lambda_i^{\pm}} N_{n_z}\, H_{n_z}(\xi)\, L_{n_r}^{|\Lambda_i^{\pm}|}(\eta) \tag{C.17}$$

$$= \psi_{\Lambda_i^{\pm}}(\varphi)\, f_i^{\pm}(z,\rho) \,. \tag{C.18}$$

La décomposition de $\phi_i^{\pm}(\mathbf{r})$ dans la B.O.H.S.A. se fait au moyen de coefficients de décomposition $C_\alpha^{(i)}$ où α est une notation allégée représentant n_z et n_r.

Les expressions (C.17) et (C.18) ne font pas apparaître explicitement le nombre quantique d'isospin. Les fonctions d'ondes HF sont en effet des fonctions propres des opérateurs d'isospin $\hat{\mathbf{t}}^2$ et $\hat{t}_z$. Ainsi, un état HF « complet » s'écrira

$$\Phi_i(\mathbf{r},\sigma,\tau) = \Phi_i(\mathbf{r},\sigma) \otimes |\tau\rangle \,, \tag{C.19}$$

où, τ est la valeur propre associée à l'opérateur $\hat{t}_z$ avec la convention habituelle en physique nucléaire $\tau = +\frac{1}{2}$ pour les neutrons et $-\frac{1}{2}$ pour les protons.

C.3 Propriétés de symétrie de $\Phi_i(\mathbf{r},\sigma)$ par renversement du temps

C.3.1 État individuel de fermion et renversement du sens du temps

Dans le cas d'un système composé d'un fermion, dans un état stationnaire, l'opérateur de renversement du sens du temps $\hat{\mathcal{T}}$ s'exprime (à une phase unimodulaire près) comme

$$\hat{\mathcal{T}} = -\mathrm{i}\hat{\sigma}_y \hat{\mathcal{K}} \,, \tag{C.20}$$

où $\hat{\sigma}_y$ est la matrice de spin de Pauli pour la direction y et $\hat{\mathcal{K}}$ est l'opérateur de conjugaison complexe des fonctions d'onde.

De plus, pour un tel système, l'opérateur de renversement du sens du temps vérifie la relation

$$\hat{\mathcal{T}}^2 = -\hat{\mathbb{1}} \,. \tag{C.21}$$

Supposons que le fermion soit décrit par le spineur (C.15). On cherche ici à déterminer l'état résultant de l'action de $\hat{\mathcal{T}}$ sur $\Phi(\mathbf{r},\sigma)$. Chaque composante du spineur vérifie la relation [121]

$$\hat{\mathcal{K}}\, \phi^{\pm}(\mathbf{r}) = (\phi^{\pm})^{\star}(\mathbf{r}) \,, \tag{C.22}$$

et l'action de l'opérateur $-\mathrm{i}\hat{\sigma}_y$ sur un spineur est donnée par,

$$-\mathrm{i}\hat{\sigma}_y\,|\pm\rangle = \pm|\mp\rangle\,. \tag{C.23}$$

Ainsi, on obtient

$$\hat{\mathcal{T}}\,\Phi(\mathbf{r},\sigma) = (\phi^+)^\star(\mathbf{r})|-\rangle - (\phi^-)^\star(\mathbf{r})|+\rangle = \begin{pmatrix} -(\phi^-)^\star(\mathbf{r}) \\ (\phi^+)^\star(\mathbf{r}) \end{pmatrix}. \tag{C.24}$$

C.3.2 Application aux fonctions $f_i^\pm(z,\rho)$

Compte tenu des relations générales concernant un état à un corps de fermion vis-à-vis du renversement du temps, il est possible d'établir une relation simple de symétrie pour $f_i^\pm(z,\rho)$ définissant la fonction d'onde $\Phi_i(\mathbf{r},\sigma)$ de l'état HF $|i\rangle$.

Cette relation de symétrie que l'on va exposer ici permettra de ne considérer, dans les calculs, que des *états positifs* $|i\rangle$ (i.e. associés à des nombres quantiques $\Omega_i > 0$, voir discussion du paragraphe 1.2.1). La fonction d'onde $\Phi_{\bar{i}}(\mathbf{r},\sigma)$ associée à l'état renversé de temps $|\bar{i}\rangle$ pourra ainsi être déduite de cette relation de symétrie.

D'après ce qui précède, l'état $|i\rangle$ a pour expression,

$$|i\rangle = \int d\mathbf{r}\left\{\Phi_i^+(\mathbf{r})|+\rangle + \Phi_i^-(\mathbf{r})|-\rangle\right\}\,. \tag{C.25}$$

Par conséquent, pour un *état positif* $|i\rangle$ et compte tenu du résultat (C.24), on a

$$|\bar{i}\rangle = \int d\mathbf{r}\left\{\phi_{\bar{i}}^+(\mathbf{r})|+\rangle + \phi_{\bar{i}}^-(\mathbf{r})|-\rangle\right\} \tag{C.26}$$

$$|\bar{i}\rangle = \int d\mathbf{r}\left\{(\phi_i^+)^\star(\mathbf{r})|-\rangle - (\phi_i^-)^\star(\mathbf{r})|+\rangle\right\}. \tag{C.27}$$

En se basant sur l'écriture (C.18) et en remarquant que $\Lambda_{\bar{i}}^\pm = -\Lambda_i^\mp$ (car $\Omega_{\bar{i}} = -\Omega_i$), on obtient pour $\phi_{\bar{i}}^\pm(\mathbf{r})$,

$$\phi_{\bar{i}}^\pm(\mathbf{r}) = \psi_{\Lambda_{\bar{i}}^\pm}(\varphi)\,f_{\bar{i}}^\pm(z,\rho) \quad \forall\; i>0\,, \tag{C.28}$$

avec

$$\psi_{\Lambda_{\bar{i}}^\pm}(\varphi) = \psi_{\Lambda_i^\mp}(-\varphi) = \psi^\star_{\Lambda_i^\mp}(\varphi) \quad \forall\; i>0\,. \tag{C.29}$$

D'autre part, on a

$$(\phi_i^\pm)^\star(\mathbf{r}) = \psi^\star_{\Lambda_i^\pm}(\varphi) f_i^{\pm\star}(z,\rho)\,. \tag{C.30}$$

Par conséquent, (C.26) et (C.27) deviennent (toujours pour « $i>0$ »),

$$|\bar{i}\rangle = \int d\mathbf{r}\left\{\psi^\star_{\Lambda_i^-}(\varphi)\,f_{\bar{i}}^+(z,\rho)|+\rangle + \psi^\star_{\Lambda_i^+}(\varphi)\,f_{\bar{i}}^-(z,\rho)|-\rangle\right\} \tag{C.31}$$

$$|\bar{i}\rangle = \int d\mathbf{r}\left\{\psi^\star_{\Lambda_i^+}(\varphi)\,f_i^{+\star}(z,\rho)|-\rangle - \psi^\star_{\Lambda_i^-}(\varphi)\,f_i^{-\star}(z,\rho)|+\rangle\right\}. \tag{C.32}$$

Par comparaison de ces deux expressions, on obtient la relation recherchée :

$$f_{\bar{i}}^\pm(z,\rho) = \mp f_i^{\mp\star}(z,\rho) \quad \forall\; i>0 \tag{C.33}$$

Le hamiltonien de HF étant pair par reversement du sens du temps, on peut se restreindre à des fonctions $f_i^\pm$ réelles. On a donc finalement,

$$\boxed{f_{\bar{i}}^\pm(z,\rho) = \mp f_i^\mp(z,\rho) \quad \forall\; i>0}\,. \tag{C.34}$$

Annexe D

Compléments sur l'isospin

D.1 Décomposition de $(\hat{T}_-\hat{T}_+)^k$ en puissances partagées

Dans cette section, on s'intéresse à la décomposition de l'opérateur $(\hat{T}_-\hat{T}_+)^k$ en termes de puissances distribuées sur $\hat{T}_-$ et $\hat{T}_+$ séparément. De façon générale, on écrira l'opérateur $(\hat{T}_-\hat{T}_+)^k$ comme

$$(\hat{T}_-\hat{T}_+)^k = \sum_{\ell=0}^{k} P_{k,\ell}(\hat{T}_z)\, \hat{T}_-^\ell \hat{T}_+^\ell \tag{D.1}$$

où les $P_{k,\ell}(\hat{T}_z)$ sont des polynômes de l'opérateur $\hat{T}_z$ à déterminer, dont le degré est au plus égal à $2(k-\ell)$. On posera également les conditions supplémentaires

$$P_{k,0}(\hat{T}_z) = \delta_{k0} \quad \text{et} \tag{D.2}$$

$$P_{k,\ell}(\hat{T}_z) = 0 \quad \text{si} \quad \ell > k\,. \tag{D.3}$$

En complément des relations (4.60), P. O. Löwdin [57] a montré que toute fonction polynomiale f de l'opérateur $\hat{T}_z$ satisfait les relations,

$$f(\hat{T}_z)\, \hat{T}_\pm^k = \hat{T}_\pm^k\, f(\hat{T}_z \pm k) \qquad \forall\, k \in \mathbb{N} \tag{D.4}$$

$$\hat{T}_\pm^k\, f(\hat{T}_z) = f(\hat{T}_z \mp k)\, \hat{T}_\pm^k \qquad \forall\, k \in \mathbb{N}\,, \tag{D.5}$$

où l'expression « $\hat{T}_z \pm k$ » désigne de façon allégée $\hat{T}_z \pm k\hat{\mathbb{1}}$. Par la suite, nous choisirons comme fonction f l'expression [1] $f(\hat{T}_z) = \hat{T}_-\hat{T}_+ = \hat{\mathbf{T}}^2 - \hat{T}_z(\hat{T}_z+1)$.

En explicitant l'expression de $(\hat{T}_-\hat{T}_+)^k$ en fonction de $(\hat{T}_-\hat{T}_+)^{k-1}$, on aboutit à des relations de récurrence pour les polynômes $P_{k,\ell}(\hat{T}_z)$. En effet,

$$(\hat{T}_-\hat{T}_+)^k = (\hat{T}_-\hat{T}_+)^{k-1}\,(\hat{T}_-\hat{T}_+) = (\hat{T}_-\hat{T}_+)^{k-1}\, f(\hat{T}_z) \tag{D.6}$$

$$= \sum_{\ell=0}^{k-1} P_{k-1,\ell}(\hat{T}_z)\; \hat{T}_-^\ell \hat{T}_+^\ell\; f(\hat{T}_z) \tag{D.7}$$

$$(\hat{T}_-\hat{T}_+)^k = \sum_{\ell=0}^{k-1} P_{k-1,\ell}(\hat{T}_z)\; \hat{T}_-^\ell\; f(\hat{T}_z - \ell)\; \hat{T}_+^\ell\,. \tag{D.8}$$

1. Comme $\hat{\mathbf{T}}^2$ commute avec $\hat{T}_+$ et $\hat{T}_-$, il peut être considéré comme un terme constant dans la fonction polynomiale $f(\hat{T}_z)$.

En utilisant la relation (D.5), on peut alors montrer que

$$f(\hat{T}_z - \ell) = f(\hat{T}_z) + \ell(2\hat{T}_z - \ell + 1) \stackrel{\text{def}}{=} f(\hat{T}_z) + g_\ell(\hat{T}_z)\,. \tag{D.9}$$

Ainsi pour tout entier positif k,

$$(\hat{T}_-\hat{T}_+)^k = \sum_{\ell=0}^{k-1} P_{k-1,\ell}(\hat{T}_z)\ \hat{T}_-^\ell\ \Big[f(\hat{T}_z) + g_\ell(\hat{T}_z)\Big]\ \hat{T}_+^\ell \tag{D.10}$$

$$= \sum_{\ell=0}^{k-1} P_{k-1,\ell}(\hat{T}_z)\ \hat{T}_-^{\ell+1}\hat{T}_+^{\ell+1} + \sum_{\ell=0}^{k-1} P_{k-1,\ell}(\hat{T}_z)\ \hat{T}_-^\ell\ g_\ell(\hat{T}_z)\ \hat{T}_+^\ell \tag{D.11}$$

$$(\hat{T}_-\hat{T}_+)^k = \sum_{\ell=1}^{k} P_{k-1,\ell-1}(\hat{T}_z)\ \hat{T}_-^\ell\hat{T}_+^\ell + \sum_{\ell=0}^{k-1} P_{k-1,\ell}(\hat{T}_z)\ g_\ell(\hat{T}_z+\ell)\ \hat{T}_-^\ell\hat{T}_+^\ell\,. \tag{D.12}$$

Par la suite on désignera par $h_\ell(\hat{T}_z)$ la fonction

$$h_\ell(\hat{T}_z) \stackrel{\text{def}}{=} g_\ell(\hat{T}_z + \ell) = 2\ell\,\hat{T}_z + \ell(\ell+1)\,. \tag{D.13}$$

Ainsi, pour tout entier positif k, on a

$$\begin{aligned}(\hat{T}_-\hat{T}_+)^k = {} & P_{k-1,1}(\hat{T}_z)\ h_1(\hat{T}_z)\ \hat{T}_-\hat{T}_+ \\ & + \sum_{\ell=1}^{k-1}\Big[P_{k-1,\ell-1}(\hat{T}_z) + P_{k-1,\ell}(\hat{T}_z)\ h_\ell(\hat{T}_z)\Big]\ \hat{T}_-^\ell\hat{T}_+^\ell \\ & + P_{k-1,k-1}(\hat{T}_z)\ \hat{T}_-^k\hat{T}_+^k\,.\end{aligned} \tag{D.14}$$

En comparant ce résultat avec la définition générale (D.1) de $P_{k,\ell}(\hat{T}_z)$, on obtient les relations de récurrence attendues définissant ces polynômes.

$$\boxed{P_{k,\ell}(\hat{T}_z) = P_{k-1,\ell-1}(\hat{T}_z) + P_{k-1,\ell}(\hat{T}_z)\ h_\ell(\hat{T}_z) \quad \forall\ k,\ell \in \mathbb{N}_+} \tag{D.15}$$

Pour les valeurs extrêmes non nulles de ℓ, on obtient les expressions suivantes

$$P_{k,1}(\hat{T}_z) = h_1^{k-1}(\hat{T}_z) = 2^{k-1}(\hat{T}_z+1)^{k-1} \quad \forall\ k \in \mathbb{N} \tag{D.16}$$

$$\text{et} \qquad P_{k,k}(\hat{T}_z) = 1 \quad \forall\ k \in \mathbb{N}_+\,. \tag{D.17}$$

l'expression générale des polynômes $P_{k,\ell}(\hat{T}_z)$ est donnée par

$$P_{k,\ell}(\hat{T}_z) \equiv P_{k,\ell}\left(\{h_1, h_2, \cdots, h_\ell\}\right) = \sum_{\substack{\alpha_1,\alpha_2,\ldots,\alpha_\ell=0 \\ \alpha_1+\alpha_2+\ldots+\alpha_\ell=k-\ell}}^{k-\ell} \prod_{i=1}^{\ell} h_i^{\alpha_i}(\hat{T}_z) \qquad \forall\ k \in \mathbb{N} \tag{D.18}$$

Chaque polynôme $P_{k,\ell}(\hat{T}_z)$ est alors un polynôme symétrique élémentaire d'ordre $k-\ell$ des ℓ premières fonctions h. Leur expression en terme de ces fonctions h est données dans la table D.1.

$P_{k,\ell}$	$\ell=1$	$\ell=2$	$\ell=3$	$\ell=4$	$\ell=5$	$\ell=6$	$\cdots$
$k=1$	1						
$k=2$	h_1	1					
$k=3$	h_1^2	h_1+h_2	1				
$k=4$	h_1^3	$h_1^2+h_1h_2+h_2^2$	$h_1+h_2+h_3$	1			
$k=5$	h_1^4	$h_1^3+h_1^2h_2+h_1h_2^2+h_2^3$	$h_1^2+h_1h_2+h_2^2+h_1h_3$ $+h_2h_3+h_3^2$	$h_1+h_2+h_3+h_4$	1		
$k=6$	h_1^5	$h_1^4+h_1^3h_2+h_1^2h_2^2$ $+h_1h_2^3+h_2^4$	$h_1^3+h_1^2h_2+h_1h_2^2+h_2^3$ $+h_1^2h_3+h_1h_2h_3+h_2^2h_3$ $+h_1h_3^2+h_2h_3^2+h_3^3$	$h_1^2+h_1h_2+h_2^2+h_1h_3$ $+h_2h_3+h_3^2+h_1h_4+h_2h_4$ $+h_3h_4+h_4^2$	$h_1+h_2+h_3+h_4+h_5$	1	
$\vdots$							

TABLEAU D.1 – Tableau descriptif des premiers polynômes $P_{k,\ell}$ en termes des fonctions $h_\ell(\hat{T}_z)$.

D.2 Éléments de matrice de $\hat{T}_-\hat{T}_+$ et de $\hat{T}_-^2\hat{T}_+^2$ dans la base HTDA

Comme nous l'avons vu au chap. 4, la base HTDA est composée de déterminants de Slater représentant des excitations particule-trou contruites sur le vide de référence noté $|\Phi_0\rangle$. Toutes ces excitations conservent le nombre de particules et possèdent donc un nombre bien défini de neutrons, N, et de protons, Z (avec $N+Z=A$).

Chaque état $|\Phi\rangle$ de la base HTDA est alors état propre de l'opérateur $\hat{T}_z$ avec la valeur propre $(N-Z)/2$.

On se propose dans cette section de calculer les éléments de matrices des opérateurs $\hat{T}_-\hat{T}_+$ et $\hat{T}_-^2\hat{T}_+^2$ dans cette base par utilisation du théorème de Wick faible.

D.2.1 Éléments de matrice de $\hat{T}_-\hat{T}_+$

L'opérateur $\hat{T}_-\hat{T}_+$ étant un opérateur à deux corps, il ne pourra coupler que des déterminants de Slater différant au maximum d'une excitation $2p2h$.

☞ ***Éléments de matrices diagonaux :***

$$\langle\Phi|\hat{T}_-\hat{T}_+|\Phi\rangle = \langle\Phi|\hat{Z}|\Phi\rangle - \frac{1}{2}\sum_{i\neq j\in|\Phi\rangle}\Big[\langle ij|\hat{t}_-\otimes\hat{t}_+|ji\rangle + \langle ij|\hat{t}_+\otimes\hat{t}_-|ji\rangle\Big] \tag{D.19}$$

$$= Z - \frac{1}{2}\sum_{i\in|\Phi\rangle}\Big[\langle i|\hat{t}_-\hat{\rho}_\Phi\hat{t}_+|i\rangle + \langle i|\hat{t}_+\hat{\rho}_\Phi\hat{t}_-|i\rangle\Big] \tag{D.20}$$

$$= Z - \frac{1}{2}\langle\Phi|\hat{F}|\Phi\rangle\,, \tag{D.21}$$

où $\hat{\rho}_\Phi$ est la matrice densité réduite pour l'état $|\Phi\rangle$ et où l'on a posé $\hat{F} = \sum\big(\hat{t}_-\hat{\rho}_\Phi\hat{t}_+ + \hat{t}_+\hat{\rho}_\Phi\hat{t}_-\big)$. La valeur moyenne de cet opérateur dans $|\Phi\rangle$ peut s'écrire en termes de recouvrements des parties spatiale et de spin (noté $\langle\!\langle i|j\rangle\!\rangle$) d'état à un corps de neutrons et de protons occupés dans $|\Phi\rangle$ comme,

$$\langle\Phi|\hat{F}|\Phi\rangle = 2\,\mathcal{R}_\Phi = 2\sum_{n,p\in|\Phi\rangle}|\langle\!\langle n|p\rangle\!\rangle|^2\,, \tag{D.22}$$

ce qui définit la fonction $\mathcal{R}_\Phi$. Ainsi,

$$\boxed{\langle\Phi|\hat{T}_-\hat{T}_+|\Phi\rangle = Z - \mathcal{R}_\Phi}\,. \tag{D.23}$$

☞ ***Cas où $|\Phi_1\rangle = \hat{\mathbf{a}}_\alpha^\dagger\hat{\mathbf{a}}_a|\Phi\rangle$:***

$$\langle\Phi|\hat{T}_-\hat{T}_+|\Phi_1\rangle = -\sum_{i\in|\Phi\rangle}\Big[\langle ia|\hat{t}_-\otimes\hat{t}_+|\alpha i\rangle + \langle ia|\hat{t}_+\otimes\hat{t}_-|\alpha i\rangle\Big] \tag{D.24}$$

$$= -\langle a|\hat{F}|\alpha\rangle = -\mathcal{F}(a,\alpha) \tag{D.25}$$

$$\boxed{\langle\Phi|\hat{T}_-\hat{T}_+|\Phi_1\rangle = -\delta_{ap}\delta_{\alpha p}\sum_{n\in|\Phi\rangle}\langle\!\langle a|n\rangle\!\rangle\langle\!\langle n|\alpha\rangle\!\rangle - \delta_{an}\delta_{\alpha n}\sum_{p\in|\Phi\rangle}\langle\!\langle a|p\rangle\!\rangle\langle\!\langle p|\alpha\rangle\!\rangle}\,, \tag{D.26}$$

ce qui définit la fonction $\mathcal{F}(a,\alpha)$.

Afin de pas alourdir les notations nous représentons ici par δ_{iq} la condition que l'état à un corps $|i\rangle$ doit être de charge q (neutron ou proton) afin de contribuer de façon non nulle au résultat.

☞ ***Cas où*** $|\mathbf{\Phi_2}\rangle = \hat{\mathbf{a}}^\dagger_{\boldsymbol{\alpha}}\hat{\mathbf{a}}^\dagger_{\boldsymbol{\beta}}\hat{\mathbf{a}}_{\boldsymbol{b}}\hat{\mathbf{a}}_{\boldsymbol{a}}|\mathbf{\Phi}\rangle$ ***:***

$$\langle\Phi|\hat{T}_-\hat{T}_+|\Phi_2\rangle = \langle ab|\hat{t}_-\otimes\hat{t}_+|\widetilde{\alpha\beta}\rangle + \langle ab|\hat{t}_+\otimes\hat{t}_-|\widetilde{\alpha\beta}\rangle = \langle ab|\hat{G}|\widetilde{\alpha\beta}\rangle\,, \tag{D.27}$$

où l'opérateur à deux corps $\hat{G}$ a pour expression $\hat{t}_-\otimes\hat{t}_+ + \hat{t}_+\otimes\hat{t}_-$ et l'élément de matrice $\langle ab|\hat{G}|\widetilde{\alpha\beta}\rangle$ sera noté $\widetilde{\mathcal{G}}(a,b,\alpha,\beta)$ avec

$$\widetilde{\mathcal{G}}(a,b,\alpha,\beta) = \mathcal{G}(a,b,\alpha,\beta) - \mathcal{G}(a,b,\beta,\alpha) - \mathcal{G}(b,a,\alpha,\beta) + \mathcal{G}(b,a,\beta,\alpha)\,, \tag{D.28}$$

et avec

$$\mathcal{G}(i,j,k,\ell) = \delta_{ip}\delta_{jn}\delta_{kn}\delta_{\ell p}\,\langle\!\langle i|k\rangle\!\rangle\langle\!\langle j|\ell\rangle\!\rangle\,.$$

Ainsi,

$$\boxed{\langle\Phi|\hat{T}_-\hat{T}_+|\Phi_2\rangle = \widetilde{\mathcal{G}}(a,b,\alpha,\beta)}\,. \tag{D.29}$$

D.2.2 Éléments de matrice de $\hat{T}_-^2\hat{T}_+^2$

L'opérateur $\hat{T}_-^2\hat{T}_+^2$ étant un opérateur à quatre corps, il pourra coupler des déterminants de Slater différant au maximum d'une excitation $4p4h$.

☞ ***Éléments de matrices diagonaux :***

$$\begin{aligned}\langle\Phi|\hat{T}_-^2\hat{T}_+^2|\Phi\rangle = {} & 2\langle\Phi|\hat{Z}(\hat{Z}-1)|\Phi\rangle + \frac{2}{3}\sum_{\substack{i\neq j\neq k\\ \in|\Phi\rangle}}\langle\widetilde{ijk}|\hat{P}_\pi\otimes\hat{t}_-\otimes\hat{t}_+|\widetilde{ijk}\rangle \\ & + \frac{1}{24}\sum_{\substack{i\neq j\neq k\neq\ell\\ \in|\Phi\rangle}}\langle\widetilde{ijk\ell}|\hat{t}_-\otimes\hat{t}_+\otimes\hat{t}_-\otimes\hat{t}_+|\widetilde{ijk\ell}\rangle\end{aligned} \tag{D.30}$$

$$\langle\Phi|\hat{T}_-^2\hat{T}_+^2|\Phi\rangle = 2(Z-1)\Big[Z - \langle\Phi|\hat{F}|\Phi\rangle\Big] + \frac{1}{2}\Big[\langle\Phi|\hat{F}|\Phi\rangle^2 - 2\langle\Phi|\hat{F}\rho_\Phi\hat{F}|\Phi\rangle\Big]\,. \tag{D.31}$$

Dans cette expression, l'opérateur $\hat{F}\rho_\Phi\hat{F}$ est à un corps et est défini par

$$\hat{F}\rho_\Phi\hat{F} = \sum\left(\hat{t}_-\rho_\Phi\hat{t}_+\rho_\Phi\hat{t}_-\rho_\Phi\hat{t}_+ + \hat{t}_+\rho_\Phi\hat{t}_-\rho_\Phi\hat{t}_+\rho_\Phi\hat{t}_-\right)\,.$$

Sa valeur moyenne dans $|\Phi\rangle$ s'exprime en terme de recouvrements de neutrons et de protons occupés dans $|\Phi\rangle$ comme

$$\langle\Phi|\hat{F}\rho_\Phi\hat{F}|\Phi\rangle = 2\,\mathcal{R}'_\Phi = 2\sum_{\substack{n,n',p,p'\\ \in|\Phi\rangle}}\langle\!\langle p|n\rangle\!\rangle\langle\!\langle n|p'\rangle\!\rangle\langle\!\langle p'|n'\rangle\!\rangle\langle\!\langle n'|p\rangle\!\rangle\,, \tag{D.32}$$

ce qui définit la fonction $\mathcal{R}'_\Phi$. Ainsi,

$$\boxed{\langle\Phi|\hat{T}_-^2\hat{T}_+^2|\Phi\rangle = 2(Z-1)(Z-2\,\mathcal{R}_\Phi) + 2\left(\mathcal{R}_\Phi^2 - \mathcal{R}'_\Phi\right)}\,. \tag{D.33}$$

☞ ***Cas où*** $|\mathbf{\Phi_1}\rangle = \hat{\mathbf{a}}^\dagger_{\boldsymbol{\alpha}}\hat{\mathbf{a}}_{\boldsymbol{a}}|\mathbf{\Phi}\rangle$ ***:***

$$\begin{aligned}\langle\Phi|\hat{T}_-^2\hat{T}_+^2|\Phi_1\rangle = {} & 2\sum_{\substack{i\neq j\\ \in|\Phi\rangle}}\langle\widetilde{ija}|\hat{P}_\pi\otimes\hat{t}_-\otimes\hat{t}_+|\widetilde{ij\alpha}\rangle \\ & + \frac{1}{6}\sum_{\substack{i\neq j\neq k\\ \in|\Phi\rangle}}\langle\widetilde{ijka}|\hat{t}_-\otimes\hat{t}_+\otimes\hat{t}_-\otimes\hat{t}_+|\widetilde{ijk\alpha}\rangle\end{aligned} \tag{D.34}$$

$$\langle\Phi|\hat{T}_-^2\hat{T}_+^2|\Phi_1\rangle = 4\left[\left(\frac{1}{2}\langle\Phi|\hat{F}|\Phi\rangle - Z + 1\right)\langle a|\hat{F}|\alpha\rangle - \langle a|\hat{F}\rho_\Phi\hat{F}|\alpha\rangle\right]\,. \tag{D.35}$$

L'élément de matrice entre $|a\rangle$ et $|\alpha\rangle$ de l'opérateur $\hat{F}\rho_\Phi\hat{F}$ est donné par

$$\begin{aligned}\langle a|\hat{F}\rho_\Phi\hat{F}|\alpha\rangle = \mathcal{F}'(a,\alpha) = \delta_{ap}\delta_{\alpha p}\sum_{\substack{n,n',p\\ \in|\Phi\rangle}}\langle\!\langle a|n\rangle\!\rangle\langle\!\langle n|p\rangle\!\rangle\langle\!\langle p|n'\rangle\!\rangle\langle\!\langle n'|\alpha\rangle\!\rangle \\ + \delta_{an}\delta_{\alpha n}\sum_{\substack{n,p,p'\\ \in|\Phi\rangle}}\langle\!\langle a|p\rangle\!\rangle\langle\!\langle p|n\rangle\!\rangle\langle\!\langle n|p'\rangle\!\rangle\langle\!\langle p'|\alpha\rangle\!\rangle\,.\end{aligned}$$

Ainsi,

$$\boxed{\langle\Phi|\hat{T}_-^2\hat{T}_+^2|\Phi_1\rangle = 4\left[(\mathcal{R}_\Phi - Z + 1)\,\mathcal{F}(a,\alpha) - \mathcal{F}'(a,\alpha)\right]}\,. \tag{D.36}$$

☞ ***Cas où*** $|\mathbf{\Phi_2}\rangle = \hat{\mathbf{a}}^\dagger_{\boldsymbol{\alpha}}\hat{\mathbf{a}}^\dagger_{\boldsymbol{\beta}}\hat{\mathbf{a}}_{\boldsymbol{b}}\hat{\mathbf{a}}_{\boldsymbol{a}}|\mathbf{\Phi}\rangle$ *:*

$$\langle\Phi|\hat{T}_-^2\hat{T}_+^2|\Phi_2\rangle = 4\sum_{i\in|\Phi\rangle}\langle\widetilde{iab}|\hat{P}_\pi\otimes\hat{t}_-\otimes\hat{t}_+|\widetilde{i\alpha\beta}\rangle + \frac{1}{2}\langle\widetilde{ijab}|\hat{t}_-\otimes\hat{t}_+\otimes\hat{t}_-\otimes\hat{t}_+|\widetilde{ij\alpha\beta}\rangle \tag{D.37}$$

$$= 4\left[\left(Z - 1 - \frac{1}{2}\langle\Phi|\hat{F}|\Phi\rangle\right)\langle ab|\hat{G}|\widetilde{\alpha\beta}\rangle + \langle ab|\hat{F}\otimes\hat{F}|\widetilde{\alpha\beta}\rangle + \langle ab|\hat{F}\rho_\Phi.\hat{G}|\widetilde{\alpha\beta}\rangle\right]\,. \tag{D.38}$$

En utilisant la notation précédente définie en (D.25), on a

$$\langle ab|\hat{F}\otimes\hat{F}|\widetilde{\alpha\beta}\rangle = \mathcal{F}(a,\alpha)\mathcal{F}(b,\beta) - \mathcal{F}(a,\beta)\mathcal{F}(b,\alpha)\,.$$

De plus, l'opérateur $\hat{F}\rho_\Phi.\hat{G}$ est à deux corps et est défini par

$$\begin{aligned}\hat{F}\rho_\Phi.\hat{G} = (\hat{t}_-\rho_\Phi\hat{t}_+\rho_\Phi\hat{t}_-)\otimes\hat{t}_+ + \hat{t}_+\otimes(\hat{t}_-\rho_\Phi\hat{t}_+\rho_\Phi\hat{t}_-) \\ + (\hat{t}_+\rho_\Phi\hat{t}_-\rho_\Phi\hat{t}_+)\otimes\hat{t}_- + \hat{t}_-\otimes(\hat{t}_+\rho_\Phi\hat{t}_-\rho_\Phi\hat{t}_+)\,,\end{aligned}$$

et l'élément de matrice $\langle ab|\hat{F}\rho_\Phi.\hat{G}|\widetilde{\alpha\beta}\rangle$ sera noté $\widetilde{\mathcal{G}}'(a,b,\alpha,\beta)$ avec

$$\widetilde{\mathcal{G}}'(a,b,\alpha,\beta) = \mathcal{G}'(a,b,\alpha,\beta) - \mathcal{G}'(a,b,\beta,\alpha) - \mathcal{G}'(b,a,\alpha,\beta) + \mathcal{G}'(b,a,\beta,\alpha)\,,$$

et

$$\begin{aligned}\mathcal{G}'(i,j,k,\ell) = \delta_{in}\delta_{jp}\delta_{kp}\delta_{\ell n}\Big[\langle\!\langle j|\ell\rangle\!\rangle\sum_{n,p\in|\phi\rangle}\langle\!\langle i|p\rangle\!\rangle\langle\!\langle p|n\rangle\!\rangle\langle\!\langle n|k\rangle\!\rangle \\ + \langle\!\langle i|k\rangle\!\rangle\sum_{n,p\in|\phi\rangle}\langle\!\langle j|n\rangle\!\rangle\langle\!\langle n|p\rangle\!\rangle\langle\!\langle p|\ell\rangle\!\rangle\Big]\,.\end{aligned}$$

$$\boxed{\begin{aligned}\langle\Phi|\hat{T}_-^2\hat{T}_+^2|\Phi_2\rangle = 4\Big[(Z - 1 - \mathcal{R}_\Phi)\,\widetilde{\mathcal{G}}(a,b,\alpha,\beta) + \widetilde{\mathcal{G}}'(a,b,\alpha,\beta) \\ + \mathcal{F}(a,\alpha)\mathcal{F}(b,\beta) - \mathcal{F}(a,\beta)\mathcal{F}(b,\alpha)\Big]\end{aligned}}\,. \tag{D.39}$$

☞ ***Cas où*** $|\mathbf{\Phi_3}\rangle = \hat{\mathbf{a}}^\dagger_{\boldsymbol{\alpha}}\hat{\mathbf{a}}^\dagger_{\boldsymbol{\beta}}\hat{\mathbf{a}}^\dagger_{\boldsymbol{\gamma}}\hat{\mathbf{a}}_{\boldsymbol{c}}\hat{\mathbf{a}}_{\boldsymbol{b}}\hat{\mathbf{a}}_{\boldsymbol{a}}|\mathbf{\Phi}\rangle$ *:*

$$\langle\Phi|\hat{T}_-^2\hat{T}_+^2|\Phi_3\rangle = \sum_{i\in|\Phi\rangle}\langle\widetilde{iabc}|\hat{t}_-\otimes\hat{t}_+\otimes\hat{t}_-\otimes\hat{t}_+|\widetilde{i\alpha\beta\gamma}\rangle \tag{D.40}$$

$$= -4\langle\widetilde{abc}|\hat{F}\otimes\hat{t}_-\otimes\hat{t}_+|\widetilde{\alpha\beta\gamma}\rangle \tag{D.41}$$

$$\boxed{\begin{aligned}\langle\Phi|\hat{T}_-^2\hat{T}_+^2|\Phi_3\rangle = -4\Big\{\mathcal{F}(a,\alpha)\widetilde{\mathcal{G}}(b,c,\beta,\gamma) - \mathcal{F}(a,\beta)\widetilde{\mathcal{G}}(b,c,\alpha,\gamma) + \mathcal{F}(a,\gamma)\widetilde{\mathcal{G}}(b,c,\alpha,\beta) \\ -\mathcal{F}(b,\alpha)\widetilde{\mathcal{G}}(a,c,\beta,\gamma) + \mathcal{F}(b,\beta)\widetilde{\mathcal{G}}(a,c,\alpha,\gamma) - \mathcal{F}(b,\gamma)\widetilde{\mathcal{G}}(a,c,\alpha,\beta) \\ +\mathcal{F}(c,\alpha)\widetilde{\mathcal{G}}(a,b,\beta,\gamma) - \mathcal{F}(c,\beta)\widetilde{\mathcal{G}}(a,b,\alpha,\gamma) + \mathcal{F}(c,\gamma)\widetilde{\mathcal{G}}(a,b,\alpha,\beta)\Big\}\end{aligned}}\,. \tag{D.42}$$

☞ ***Cas où*** $|\mathbf{\Phi_4}\rangle = \hat{\mathbf{a}}^\dagger_{\boldsymbol{\alpha}}\hat{\mathbf{a}}^\dagger_{\boldsymbol{\beta}}\hat{\mathbf{a}}^\dagger_{\boldsymbol{\gamma}}\hat{\mathbf{a}}^\dagger_{\boldsymbol{\delta}}\hat{\mathbf{a}}_{\boldsymbol{d}}\hat{\mathbf{a}}_{\boldsymbol{c}}\hat{\mathbf{a}}_{\boldsymbol{b}}\hat{\mathbf{a}}_{\boldsymbol{a}}|\mathbf{\Phi}\rangle$ ***:***

$$\langle\Phi|\hat{T}_-^2\hat{T}_+^2|\Phi_4\rangle = \langle\widetilde{abcd}|\hat{t}_-\otimes\hat{t}_+\otimes\hat{t}_-\otimes\hat{t}_+|\widetilde{\alpha\beta\gamma\delta}\rangle \tag{D.43}$$

$$= 4\langle abcd|\hat{G}\otimes\hat{G} + (\hat{t}_-\otimes\hat{t}_-)\otimes(\hat{t}_+\otimes\hat{t}_+) + (\hat{t}_+\otimes\hat{t}_+)\otimes(\hat{t}_-\otimes\hat{t}_-)|\widetilde{\alpha\beta\gamma\delta}\rangle\ . \tag{D.44}$$

L'élément de matrice $\langle abcd|\hat{G}\otimes\hat{G}|\widetilde{\alpha\beta\gamma\delta}\rangle$ s'obtient en généralisant ce qui a été vu :

$$\langle abcd|\hat{G}\otimes\hat{G}|\widetilde{\alpha\beta\gamma\delta}\rangle = \sum_{P\in\mathcal{S}_4}\varepsilon(P)\,\widetilde{\mathcal{G}}(a,b,\lambda_{P(1)},\lambda_{P(2)})\widetilde{\mathcal{G}}(c,d,\lambda_{P(3)},\lambda_{P(4)})\ ,$$

où P est une permutation de quatre objets de signature $\varepsilon(P)$ et $\lambda_i \equiv \{\alpha,\beta,\gamma,\delta\}$. De plus, un élément de matrice $\langle ijkl|(\hat{t}_-\otimes\hat{t}_-)\otimes(\hat{t}_+\otimes\hat{t}_+)|i'j'k'l'\rangle$ pourra s'écrire en fonction de fonctions $\mathcal{G}$ comme

$$\langle ijkl|(\hat{t}_-\otimes\hat{t}_-)\otimes(\hat{t}_+\otimes\hat{t}_+)|i'j'k'l'\rangle = \mathcal{G}(i,k,i',k')\mathcal{G}(j,\ell,j',\ell')\ .$$

Ainsi, on obtient finalement,

$$\boxed{\begin{aligned}\langle\Phi|\hat{T}_-^2\hat{T}_+^2|\Phi_4\rangle = \sum_{P\in\mathcal{S}_4}\varepsilon(P)\Big\{&\widetilde{\mathcal{G}}(a,b,\lambda_{P(1)},\lambda_{P(2)})\widetilde{\mathcal{G}}(c,d,\lambda_{P(3)},\lambda_{P(4)})\\ &+\mathcal{G}(a,c,\lambda_{P(1)},\lambda_{P(3)})\mathcal{G}(b,d,\lambda_{P(2)},\lambda_{P(4)})\\ &+\mathcal{G}(c,a,\lambda_{P(3)},\lambda_{P(1)})\mathcal{G}(d,b,\lambda_{P(4)},\lambda_{P(2)})\Big\}\ ,\end{aligned}} \tag{D.45}$$

avec $\lambda_i \equiv \{\alpha,\beta,\gamma,\delta\}$.

Bibliographie

[1] P. Ring, P. Schuck, *The Nuclear Many-Boby Problem* (Springer, 1980).

[2] K. A. Brueckner, *Phys. Rev.* 97 (1955) 1353.

[3] H. A. Bethe, J. Goldstone, *Proc. Roy. Soc.* A238 (1957) 551.

[4] M. Lacombe, B. Loiseau, J. M. Richard, R. Vinh Mau, *Phys. Rev.* C 21 (1980) 861.

[5] R. Machleidt, K. Holinde, C. Elster, *Phys. Rep.* 149 (1987) 1.

[6] V. G. J. Stoks, R. A. M. Klomp, C. P. F. Terheggen, J. J. de Swart, *Phys. Rev.* C 49 (1994) 2950.

[7] R.B. Wiringa, V. G. J. Stoks, R. Schiavilla, *Phys. Rev.* C 51 (1995) 38.

[8] R. Machleidt, F. Sammarruca, Y. Song, *Phys. Rev.* C 53 (1996) 1483.

[9] R. Machleidt, *Phys. Rev.* C 63 (2001) 024001.

[10] H. Feldmeier, T. Neff, R. Roth, J. Schnack, *Nucl. Phys.* **A 632** (1998) 61.

[11] R. Roth, T. Neff, H. Feldmeier, *Prog. Part. Nucl. Phys.* 65 (2010) 50.

[12] S.K. Bogner, R.J. Furnstahl, A. Schwenk, *Prog. Part. Nucl. Phys.* 65 (2010) 94.

[13] S.K. Bogner, T.T.S. Kuo, A. Schwenk, D.R. Entem, R. Machleidt, *Phys. Lett.* B 576 (2003) 265.

[14] T. H. R. Skyrme, *Phil. Mag.* 1 (1956) 1043.

[15] T. H. R. Skyrme, *Nucl. Phys.* 9 (1959) 615.

[16] J. Dechargé, D. Gogny, *Phys. Rev.* C 21 (1980) 1568.

[17] D. Vautherin, D. M. Brink, *Phys. Rev.* C 5 (1972) 626.

[18] M. J. Giannoni, P. Quentin, *Phys. Rev.* C 21 (1980) 2076.

[19] B. D. Chang, *Phys. Lett.* B 56 (1975) 205.

[20] D. Vautherin, *Phys. Rev.* C 7 (1973) 296.

[21] M. Beiner, H. Flocard, Nguyen Van Giai, P. Quentin, *Nucl. Phys.* **A 238** (1975) 29.

[22] J. Bartel, P. Quentin, M. Brack, C. Guet, H. -B. Håkansson, *Nucl. Phys.* **A 386** (1982) 79.

[23] J. Dobaczewski, H. Flocard, J. Treiner, *Nucl. Phys.* **A 422** (1984) 103.

[24] E. Chabanat, E Bonche, E Haensel, J. Meyer, R. Schaeffer, *Nucl. Phys.* **A 627** (1997) 710.

[25] C. F. von Weizsäcker, *Z. Phys.* 96 (1935) 431.

[26] H. A. Bethe, R. F. Bacher, *Rev. Mod. Phys.* 8 (1936) 82.

[27] M. Bender, K. Rutz, P.-G. Reinhard, J. A. Maruhn, *Eur. Phys. J.* A 7 (2000) 467.

[28] J. Bardeen, L. N. Cooper, J. R. Schrieffer, *Phys. Rev.* 108 (1957) 1175.

[29] Å. Bohr, B. R. Mottelson, D. Pines, *Phys. Rev.* 110 (1958) 936.

[30] H. Flocard, P. Quentin, A. K. Kerman, D. Vautherin, *Nucl. Phys.* **A 203** (1973) 433.

[31] J. C. Slater, *Phys. Rev.* 81 (1951) 385.

[32] C. Titin-Schnaider, P. Quentin, *Phys. Lett.* B 49 (1974) 397.

[33] M. Anguiano, J. L. Egido, L. M. Robledo, *Nucl. Phys.* **A683** (2001) 227.

[34] J. Skalski, *Phys. Rev.* C 63 (2001) 024312.

[35] J. Le Bloas, Meng-Hock Koh, P. Quentin, L. Bonneau, J.I.A. Ithnin, *Phys. Rev.* C 84 (2011) 014310.

[36] P. Quentin, *J. Phys. France*, 33 (1972) 457.

[37] M. Moshinsky, *Nucl. Phys.* 13 (1959) 104.

[38] A.H. Wapstra, G. Audi, C. Thibault, *Nucl. Phys.* **A 729** (2003) 129 ; G. Audi, A.H. Wapstra, C. Thibault, *Nucl. Phys.* **A729** (2003) 337.

[39] N. Pillet, P. Quentin, J. Libert, *Nucl. Phys.* A 697 (2002) 141.

[40] T. L. Ha, *Thèse de Doctorat*, Université Bordeaux 1 (2004).

[41] P. Quentin, H. Laftchiev, D. Samsœn, I. N. Mikhailov, J. Libert, *Nucl. Phys.* A 734 (2004) 477.

[42] H. Laftchiev, J. Libert, P. Quentin, Ha Thuy Long, *Nuclear Physics* A 845 (2010) 33.

[43] K. Sieja, T. L. Ha, P. Quentin, A. Baran, *Int. J. Mod. Phys.* E 16 (2007) 289.

[44] H. Naïdja, P. Quentin, T. L. Hà, D. Samsœn, *Phys. Rev.* C 81 (2010) 044320.

[45] V. N. H. Tran, *Thèse de Doctorat*, Université Bordeaux 1 (2010).

[46] L. Bonneau, P. Quentin, K. Sieja, *Phys. Rev.* C 76 (2007) 014304.

[47] Å. Bohr, B. R. Mottelson, *Nuclear Structure, 2^{nd} ed.* (World Scientific, Singapore, 1998).

[48] N. Pillet, J.-F. Berger, E. Caurier, *Phys. Rev.* C 78 (2008) 024305.

[49] J. Chadwick, *Proc. Roy. Soc.*, **A136** (1932) 692-708.

[50] J. Chadwick, *Nature* 129 (1932) 312.

[51] W. Heisenberg, *Z. Phys.*, **77** (1932) 1.

[52] W. Heisenberg, *Z. Phys.*, **78** (1932) 156.

[53] S. Gales, Nguyen Van Giai, *Symétrie d'isospin et structure nucléaire*, Cours de l'École Joliot-Curie, France (1986).

[54] E. M. Henley, G. A. Miller, *Mesons in Nuclei, Vol. 1, chap. 10* (Rho & Wilkinson ed., 1979).

[55] E. Epelbaum, Ulf-G. Meißner, J. E. Palomar, *Phys. Rev.* C 71 (2005) 024001.

[56] D. A. Varshalovich, A. N. Moskalev, V. K. Khersonskii, *Quantum theory of angular momentum* (World Scientific, Singapore, 1988).

[57] P. O. Löwdin *Rev. Mod. Phys.* 36 (1964) 966.

[58] L. R. Turner, *NASA TN D-3547* (1966).

[59] H. Oruç, G. M. Philipps, *Linear Algebra Appl.* 315 (2000) 113-123.

[60] H. Oruç, *Appl. Math. Lett.* 20 (2007) 982-987.

[61] C. A. Engelbrecht, R. H. Lemmer, *Phys. Rev. Lett.* 24 (1970) 607.

[62] E. Caurier, A. Poves, A. Zuker, *Phys. Lett.* B 96 (1980) 11 ; E. Caurier, A. Poves, A. Zuker, *Phys. Lett.* B 96 (1980) 15.

[63] Å. Bohr, J. Damgård, B. R. Mottelson, *Nuclear structure* (Eds. A. Hossain, Harun-ar-Rashid et M. Islam, North Holland, Amsterdam, 1967).

[64] I. Hamamoto, H. Sagawa, *Phys. Rev.* C 48 (1993) R960.

[65] C. L. Cowan, Jr. F. Reines, F. B. Harrison, H. W. Kruse, A. D. McGuire, *Science* 124-3212 (1956) 103.

[66] E. Fermi, *Nuovo Cimento* 11 (1934) 1.

[67] E. Fermi, *Z. Phys.* 88 (1934) 161.

[68] S. Weinberg, *Phys. Rev. Lett.* 19 (1967) 1264.

[69] A. Salam, *Elementary Particle Theory, ed. N. Svartholm* (Almquist and Forlag, Stockholm, 1968).

[70] I. S. Towner, J. C. Hardy, *Rep. Prog. Phys.* 73 (2010) 046301.

[71] D. Pocanic *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* 93 (2004) 181803.

[72] N. Severijns, M. Beck, O. Naviliat-Cuncic, *Rev. Mod. Phys.* 78 (2006) 991.

[73] H. Abele, *Prog. Part. Nucl. Phys.* 60 (2008) 1.

[74] C. Amsler *et al.*, *Phys. Lett.* B 667 (2008) 1.

[75] O. Naviliat-Cuncic, N. Severijns, *Phys. Rev. Lett.* 102 (2009) 142302.

[76] J. D. Bjorken, S. D. Drell, *Relativistic Quantum Mechanics* (McGraw-Hill, 1964).

[77] W. Greiner, B. Müller, *Gauge Theory of Weak Interactions, fourth edition* (Springer, 2009).

[78] T. D. Lee, C. N. Yang, *Phys. Rev.* 104 (1956) 254.

[79] C. S. Wu, E. Ambler, E. W. Hayward, D. D. Hope, R. P. Hudson, *Phys. Rev.* 105 (1957) 1413.

[80] H. Abele *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* 88 (2002) 211801.

[81] M. Schumann *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* 100 (2008) 151801.

[82] K. Nakamura *et al.* (Particle Data Group), *J. Phys.* G 37 (2010) 075021.

[83] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloë, *Mécanique quantique, Tome II* (Hermann 1997).

[84] W. E. Burcham, M. Jobes, *Nuclear and Particle Physics* (Pearson Education – Longman Group 1995).

[85] B. Povh, K. Rith, C. Scholz, F. Zetsche, *Particles and Nuclei,* 6^{th} *edition* (Springer, 2008)

[86] N. Cabbibo, *Phys. Rev. Lett.* 10 (1963) 531.

[87] V. L. Fitch, R. F. Roth, J. S. Russ, W. Vernon, *Phys. Rev. Lett.* 15 (1965) 73.

[88] M. Kobayashi, T. Maskawa, *Prog. Theo. Phys.* 49 (1973) 652.

[89] S. S. Gerstein, J. B. Zeldovich, *Soviet Phys. JETP* 2 (1956) 576.

[90] R. P. Feynman, M. Gell-Mann, *Phys. Rev.* 109 (1958) 193.

[91] C. Volpe, *Description des processus faibles dans les noyaux*, Cours de l'École Joliot-Curie, France (2003).

[92] J. C. Hardy, I. S. Towner, *Nucl. Phys.* **A 844** (2010) 138c.

[93] D. H. Wilkinson, *Nucl. Phys.* **A 377** (1981) 474.

[94] W. J. Marciano, A. Sirlin, *Phys. Rev. Lett.* 56 (1986) 22.

[95] A. Sirlin, *Nuclear Physics* B 71 (1974) 29.

[96] W. Jaus, G. Rasche, *Phys. Rev.* D 41 (1990) 166.

[97] S. A. Brindhaban, P. H. Barker, *Phys. Rev.* C 49 (1994) 2401.

[98] G. Savard *et al.*, *Phys. Rev.* C 70 (2004) 042501(R).

[99] B. Blank *et al.*, *Eur. Phys. J.* A 44 (2010) 363.

[100] P. Delahaye, B. Blank, S. Sturm, *Nucl. Instrum. Methods* B 266 (2008) 4647.

[101] E. Hagberg *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* 73 (1994) 396.

[102] P. Finlay *et al.*, *Phys. Rev.* C 78 (2008) 025502.

[103] A. Bey *et al.*, *Eur. Phys. J.* A 36 (2008) 121.

[104] J. Le Bloas, L. Bonneau, P. Quentin, *Int. J. Mod. Phys.* E 20 (2011) 274.

[105] W. Satuła, J. Dobaczewski, W. Nazarewicz, M. Rafalski, *Phys. Rev. Lett.* 103 (2009) 012502.

[106] M. Rafalski, W. Satuła, J. Dobaczewski, *Int. J. Mod. Phys.* E 18 (2009) 958.

[107] W. Satuła, J. Dobaczewski, W. Nazarewicz, M. Rafalski, *Phys. Rev.* C 81 (2010) 054310.

[108] W. Satuła, J. Dobaczewski, W. Nazarewicz, M. Borucki, M. Rafalski, *Int. J. Mod. Phys.* E 20 (2011) 244.

[109] W. Satuła, J. Dobaczewski, W. Nazarewicz, M. Rafalski, *Phys. Rev. Lett.* 106 (2011) 132502.

[110] W. Satuła, J. Dobaczewski, W. Nazarewicz, M. Rafalski, *Acta Phys. Pol.* B 42 (2011) 415.

[111] P. Quentin, N. Minkov, L. Bonneau, D. Samsoen, dans *Fourth International Workshop on Nuclear Fission and Fission-Product Spectroscopy*, Cadarache (France), *AIP Conf. Proc.* **1175** (2010) 174.

[112] P. Quentin, L. Bonneau, N. Minkov, D. Samsoen, *Int. J. Mod. Phys.* E 19 (2010) 611.

[113] E. Caurier, A. Poves, *Nucl. Phys.* **A 385** (1982) 407.

[114] I. S. Towner, J. C. Hardy, *Phys. Rev.* C 82 (2010) 065501.

[115] J. Damgård, *Nucl. Phys.* **A 130** (1969) 233.

[116] W.E. Ormand, B.A. Brown, *Phys. Rev.* C **52** (1995) 2455.

[117] N. Auerbach, *Phys. Rev.* C 79 (2009) 035502.

[118] H. Sagawa, N. Van Giai, T. Suzuki, *Phys. Rev.* C 53 (1996) 2163.

[119] H. Liang, N. Van Giai, J. Meng, *Phys. Rev.* C 79 (2009) 064316.

[120] G. C. Wick, *Phys. Rev.* 80 (1950) 268.

[121] A. Messiah, *Mécanique quantique, tome 2, nouvelle éd.* (Dunod, Paris, 1995).

[122] M. Abramowitz, I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions, Withs Formulas, Graphs, and Mathematical Tables, 10^{th} edition* (Dover Publications, 1972).

Résumé

Dans ce travail, nous nous sommes intéressés à la brisure de la symétrie d'isospin dans les noyaux $N \approx Z$ et à son effet sur l'élément de matrice de transitions β de Fermi super-permises $0^+ \to 0^+$ dans le cas de la décroissance β^+ du ^{50}Mn. Dans le cadre de l'approche microscopique *Highly Truncated Diagonalization Approach* (HTDA), dédiée à la description des corrélations au-delà du champ moyen et conservant explicitement de nombre de particules, nous avons étudié (en particulier) le rôle joué par les corrélations d'appariement dans les mécanismes de brisure de la symétrie d'isospin dans l'état fondamental de noyaux $N \approx Z$. Une étude de sensibilité du degré de cette brisure, en fonction de l'intensité de l'interaction résiduelle décrivant l'appariement dans HTDA, a été menée et une interprétation des mécanismes recherchés a été proposée à l'aide d'une approximation développée dans ce travail. Cette étude a mis évidence toute la complexité d'un bon traitement de la symétrie d'isospin, tant au niveau de la description de la source de brisure qu'au niveau de la limitation des biais du modèle. Nous avons également montré la nécessité d'une description très fine des fonctions d'onde corrélées dans un tel problème. Plus précisément, nous avons obtenu une valeur de la correction δ_C de mélange d'isospin à l'élément de matrice de transition de Fermi de $(0.2 \pm 0.1)\%$. Cette valeur a été confrontée à celles obtenues dans d'autres approches. Compte tenu des effets négligés dans notre travail, notre valeur de δ_C est supposée représenter une borne minimum.

Mots-clés : mélange d'isospin, décroissance β, transition de Fermi, interaction coulombienne, calculs microscopiques, champ moyen, corrélations d'appariement, noyaux $N \approx Z$, approche HTDA.

Abstract

In this work, we are interested in the breaking of the isospin symmetry in the $N \approx Z$ nuclei and in its effect on the matrix element of super-allowed $0^+ \to 0^+$ Fermi β transitions in the case of the β^+ decay of the ^{50}Mn. Within the framework of the *Highly Truncated Diagonalization* microscopic *Approach*, dedicated to the descritption of correlations beyond the mean field and conserving explicitely the particle number, we have studied (in particular) the role played by pairing correlations in the breaking mechanisms of this symmetry in the ground state of $N \approx Z$ nuclei. A sensitivity study of the isospin mixing, as a function of the strength of the residual interaction decribing the pairing correlations in HTDA, has been carried out and an interpretation of the mechanims at work has been proposed in terms of an approximation developped in this work. This study has pointed out the complexity of a good treatment of the isospin symmetry, in the description of the breaking sources as well as in the reduction of model biases. We have also paid attention to the necessity of a very fine description of the correlated wave functions in such a problem. More precisely, we have obtained a value for the isospin mixing correction δ_C to the Fermi transition matrix element of $(0.2 \pm 0.1)\%$. This value has been compared to those obtained in other approaches. Taking account of the neglected effects in our work, our value of δ_C is expected to be a lower bound.

Keywords: isospin mixing, β decay, Fermi transition, Coulomb interaction, microscopic calculations, mean field, pairing correlations, $N \approx Z$ nuclei, HTDA approach.