

*Approches Microscopiques
en Physique Nucléaire*

Cours de Master 2

Nouveaux États de la Matière
Noyaux Exotiques, Agrégats, Nanostructures

Cédric Simenel

*CEA, Irfu, Service de Physique Nucléaire,
Centre de Saclay, F-91191 Gif-sur-Yvette, France.*

2008-2009

Résumé

Ce cours introduit certaines approches microscopiques en physique nucléaire avec pour objectif de décrire au mieux la structure quantique des noyaux atomiques et leurs collisions à basse énergie. En particulier, nous présentons le formalisme de la théorie de champ moyen Hartree-Fock (HF) basée sur l'approximation de particules indépendantes. Nous nous intéressons à son application dans le cas particulier de la physique nucléaire. La théorie Hartree-Fock statique permet une relativement bonne description des états fondamentaux des noyaux. Nous abordons aussi la version "dépendante du temps" de cette théorie qui sert à étudier la dynamique nucléaire, comme la vibration des noyaux ou leur collision.

Table des matières

1	Introduction : Problème à N-corps quantique en physique nucléaire	5
1.1	Généralités	5
1.2	Pourquoi une approche microscopique?	5
1.3	Pourquoi la mécanique quantique?	7
1.4	Et pourquoi pas relativiste?	8
1.5	Quelles énergies pour sonder le noyau?	8
1.6	Collisions entre noyaux	9
2	Équation de Schrödinger	10
2.1	Dualité onde-corpuscule	10
2.2	Analogie mécanique-optique	10
2.3	Équation d'évolution d'ondes planes de matière	10
2.4	Interprétation physique de la fonction d'onde	11
2.5	Discussion	11
2.6	Écriture moderne de l'équation de Schrödinger	12
3	État quantique du noyau atomique	13
3.1	États à un nucléon	13
3.2	États à deux nucléons	15
3.3	États à N nucléons	18
4	Symétries et corrélations	21
4.1	Exemple de problème : le deuton libre	21
4.2	Inclusion de corrélations par brisure de symétries	21
4.3	Exemples de la déformation et de l'appariement	22
4.4	Quelques remarques	23
4.5	Le modèle de Goeppert-Mayer et Jensen	23
5	Observables d'un système à N nucléons	27
5.1	Observables dans $\mathcal{H}^{(1)}$	27
5.1.1	Exemple 1 : position	27
5.1.2	Exemple 2 : impulsion	27
5.2	Observables à un corps dans $\mathcal{H}^{(N)}$	28
5.3	Valeur moyenne d'une observable à un corps	28
5.4	Matrice densité à un corps	30
5.5	Observables à deux corps	30
5.6	Généralisation à $M \leq N$ corps	31
5.7	Cas d'un état de particules indépendantes	31
5.8	Matrice des corrélations à deux corps	33
6	La méthode Hartree-Fock en physique nucléaire	34
6.1	Introduction	34
6.2	Principe variationnel de Ritz	34
6.3	Minimisation sous contrainte : la méthode de Lagrange	35
6.4	Équations Hartree-Fock	35
6.5	hamiltonien Hartree-Fock	37

6.6	Le problème du cœur dure en physique nucléaire	40
6.7	Approche de Brueckner	43
6.8	Interactions effectives phénoménologiques	43
6.9	Résolution de l'équation HF : aspects pratiques	46
7	L'approche Hartree-Fock dépendant du temps	50
7.1	Évolution : théorème d'Erhenfest	50
7.2	Équation TDHF	50
7.3	Résolution pratique des équations TDHF	52
7.4	Étude de vibrations avec TDHF	53
7.5	Calculs de collisions avec la théorie TDHF	54
7.5.1	construction de l'état à deux noyaux	55
7.5.2	mise en mouvement des noyaux	55

1 Introduction : Problème à N -corps quantique en physique nucléaire

1.1 Généralités

Les accélérateurs d'ions lourds ont permis l'étude des réactions nucléaires avec des noyaux stables. Les mesures expérimentales, de plus en plus précises, ont mis l'accent sur l'influence de la structure des noyaux sur les mécanismes de réaction. C'est le cas par exemple de la fusion à basse énergie où les sections efficaces sont fortement affectées par la forme des noyaux et leur modes de vibration et de rotation. L'avènement des faisceaux radioactifs, notamment aux basses énergies typiques de SPIRAL2 au GANIL, ouvre des perspectives intéressantes pour l'étude de l'influence de nouvelles structures sur les réactions autour de la barrière.

Notre objectif, d'un point de vue théorique, est donc de décrire à la fois la structure des noyaux et leurs collisions dans un même formalisme.

1.2 Pourquoi une approche microscopique ?

Expérimentalement, la structure des noyaux est accessible par diffusion de particules (électron, nucléon, deuton, alpha...). Les particules sont détectées après la réaction dans des détecteurs autour de la cible. La figure 1 illustre le principe d'une expérience de diffusion en cinématique directe (l'objet étudié est la cible tandis que la sonde est le faisceau). Un exemple de résultat

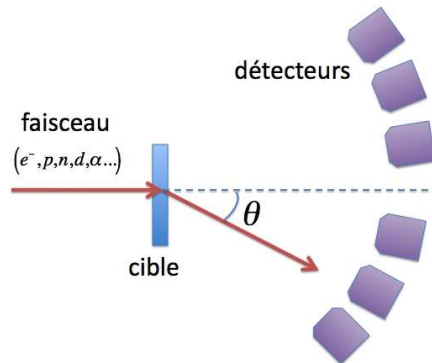


FIGURE 1 – Schéma de dispositif expérimental utilisé pour étudier la structure des noyaux par diffusion de particules en cinématique directe.

obtenu par diffusion élastique (c'est à dire sans excitation du noyau) d'électrons sur différents noyaux est donné sur la figure 2. L'ordonnée représente la section efficace différentielle (proportionnelle au nombre d'électrons mesurés) en fonction de l'angle de diffusion θ . La figure obtenue présente des interférences destructives analogues à celles que l'on obtient en optique. C'est une manifestation de la dualité onde-corpuscule de la particule diffusée postulée par Louis de Broglie. Ici c'est l'électron du faisceau qui se comporte comme une onde, mais des interférences se manifestent aussi avec d'autres sondes telles que les nucléons.

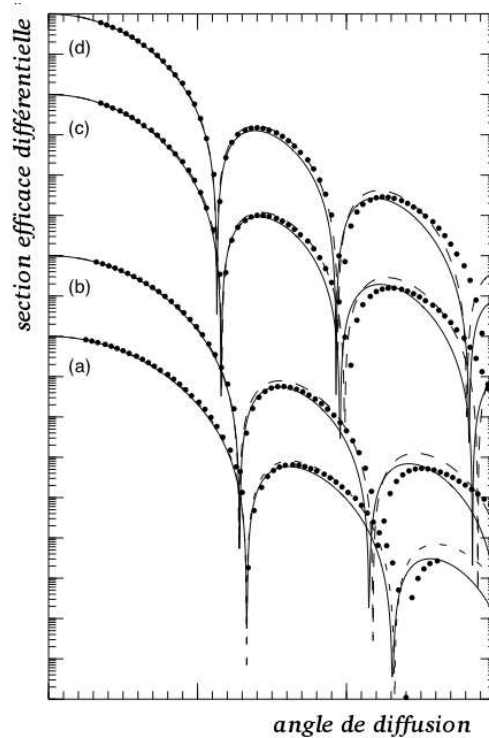


FIGURE 2 – Section efficace différentielle de diffusion élastique d’électrons sur différents noyaux en unité arbitraire.

La théorie de la diffusion¹ permet alors d’interpréter ces résultats et de remonter à la structure du noyau, en particulier la distribution spatiale de la densité des nucléons. La figure 3 donne des exemples de densités radiales de protons obtenues par diffusion d’électron sur différents noyaux. C’est ainsi que l’on obtient une mesure de la taille des noyaux de l’ordre de quelques fermis. On observe tout d’abord que la densité est diffuse à la surface des noyaux. Le noyau est donc un objet plus complexe qu’une goutte liquide à bords durs comme on peut l’imaginer en première approximation en étudiant la table des masses (modèle de la goutte liquide de Bethe et Weiszäker²). On observe aussi sur la figure 3 un comportement au centre des noyaux non uniforme d’un noyau à l’autre. C’est ce que l’on peut voir de même sur la figure 4 qui montre la densité proton du ^{206}Hg et du ^{208}Pb le long d’un axe passant par le centre des noyaux. On voit que l’ajout de deux protons peut modifier notablement la densité au centre des noyaux. Cet exemple montre qu’il est illusoire d’espérer décrire précisément la structure des noyaux avec un modèle macroscopique, c’est à dire qui traite les nucléons dans leur globalité comme dans le modèle de la goutte liquide. Il est donc nécessaire d’avoir une approche microscopique, c’est à dire en décrivant tous les nucléons individuellement.

Il ne s’agit là que d’un exemple montrant la nécessité d’une approche microscopique. Il en existe bien d’autres comme, par exemple, le fait que la forme des noyaux soit rarement sphérique, le fait qu’ils soient plus liés pour certains nombres de protons et de neutrons (nombres ”magiques”) ou encore le changement brutal de distribution de charge des fragments de fission dans une même chaîne isotopique (figure 5). Enfin, nous avons besoin de plus en plus de

¹La théorie de la diffusion n’est pas au programme de ce cours. Pour une introduction, voir par exemple le chapitre 8 de *Mécanique Quantique*, C. Cohen-Tanoudji, B. Diu et F. Laloë.

²Voir par exemple *Le Monde Subatomique* de Luc Valentin.

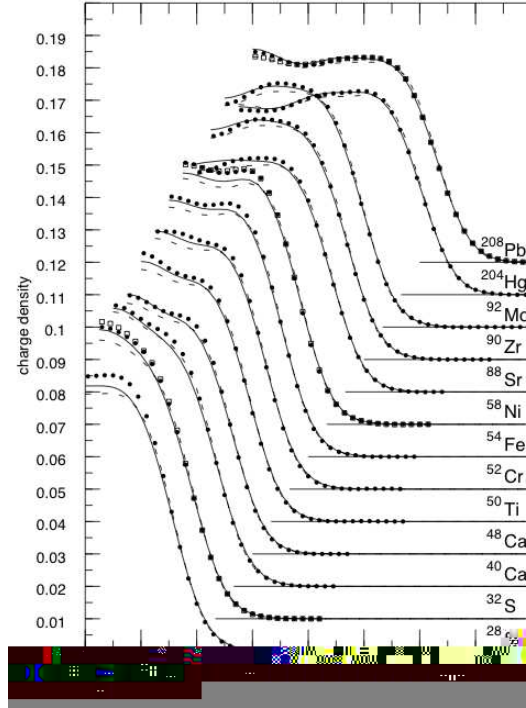


FIGURE 3 – Densités radiales de protons (distribution de charge) obtenues dans différents noyaux par diffusion élastique d'électrons.

théories prédictives pour explorer la "terra incognita" de la charte des noyaux (noyaux exotiques éloignés de la vallée de stabilité, noyaux super-lourds... voir figure 6). Il faut alors diminuer le nombre de paramètres libres des modèles pour augmenter leur prédictivité. C'est ce que se proposent de faire les théories entièrement microscopiques en n'ayant pour paramètres que ceux de l'interaction entre les nucléons ou encore ceux de la fonctionnelle de la densité (dépendance de l'énergie du système en fonction de sa densité).

1.3 Pourquoi la mécanique quantique ?

Tout objet, microscopique ou macroscopique, obéit à la **relation d'incertitude de Heisenberg**

$$\Delta x \Delta p \geq \hbar$$

à cause de la dualité onde-corpuscule. C'est vrai, par exemple, pour un grain de poussière. Cependant, pour ce dernier, il n'existe pas d'appareil mesurant la position x et l'impulsion p assez précisément pour le vérifier. Ainsi, la mécanique classique suffit pour décrire le mouvement d'un grain de poussière.

Dans le noyau, les nucléons ont une énergie cinétique d'environ $\frac{p^2}{2m} \sim 20$ MeV. Les noyaux ont un diamètre de l'ordre de $d \sim 10$ fm. Supposons qu'ils obéissent à la mécanique classique, c'est à dire

$$\Delta x \ll d \quad \text{et} \quad \Delta p \ll p \quad \Rightarrow \quad \hbar \leq \Delta x \Delta p \ll p d \quad \Rightarrow \quad p d / \hbar \gg 1.$$

On a $\hbar = 197.3$ MeV.fm/c et la masse du nucléon de l'ordre de 1 GeV/c². On a donc $p d / \hbar \sim 10$ et la relation précédente, valable uniquement à la limite classique, n'est pas respectée. On

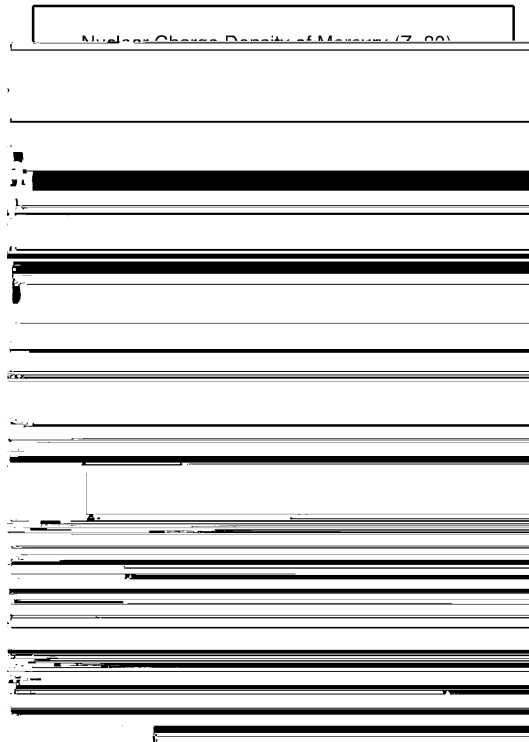


FIGURE 4 – Densités proton du ^{208}Pb et du ^{206}Hg .

s'attend donc à des effets quantiques non négligeables en physique nucléaire.

1.4 Et pourquoi pas relativiste ?

Avec une énergie cinétique de 20 MeV, le nucléon a une vitesse telle que $(v/c)^2 \sim 0.04$. Cette valeur étant petite devant 1, on peut, en première approximation, négliger les effets relativistes dans la dynamique des nucléons.

1.5 Quelles énergies pour sonder le noyau ?

La longueur d'onde de de Broglie $\lambda = 2\pi\hbar/p$ de la sonde doit être inférieure à la taille d de l'objet sondé. Si la sonde est un nucléon, cela implique qu'il ait une énergie $E = \frac{p^2}{2m} \geq \frac{2\pi^2\hbar^2}{md^2} \sim 8$ MeV. Les énergies typiques en physique nucléaire sont effectivement de quelques MeV à quelques 10 MeV par nucléon, ce qui est la gamme en énergie couverte au GANIL.

À ces énergies, on ne sonde pas encore la structure interne des nucléons en quarks et en gluons (domaine de la physique hadronique obéissant à la chromodynamique quantique). On peut donc considérer qu'il y a un découplage entre les degrés de liberté internes du nucléon et son mouvement globale. Cette hypothèse est à la base des modèles microscopiques de physique nucléaire et permet d'écrire l'état d'un nucléon comme une fonction d'onde ne dépendant que de la position (on peut aussi choisir l'impulsion), le spin (de projection sur un axe $s = \pm 1/2$) et l'isospin $q = \pm 1/2$ indiquant s'il s'agit d'un neutron ou d'un proton.

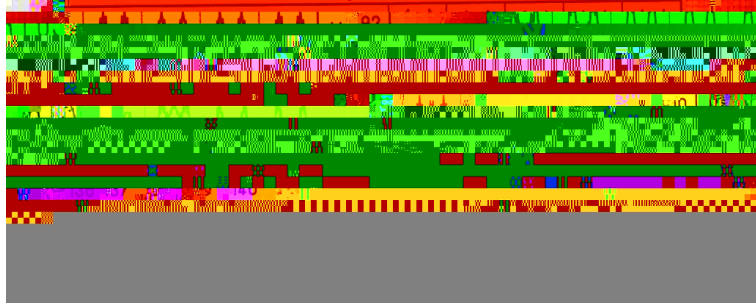


FIGURE 5 – Distribution en charge de fragments de photo-fission.

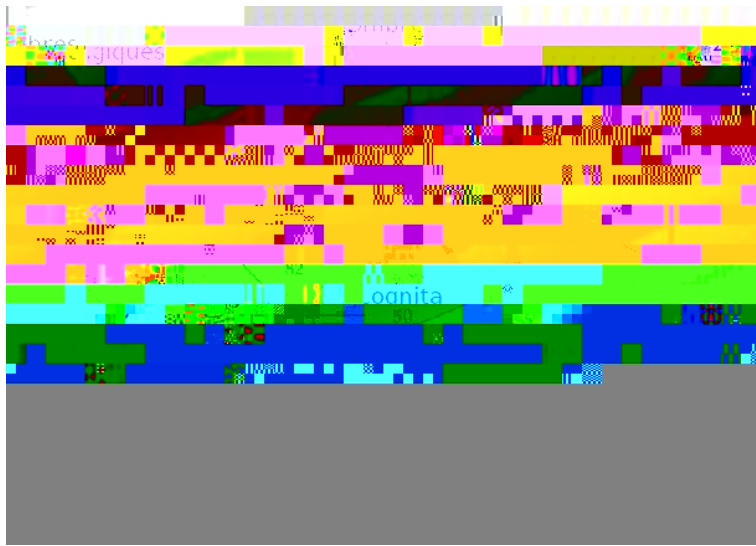


FIGURE 6 – Table des noyaux.

1.6 Collisions entre noyaux

Les mécanismes de fusion, transfert, diffusion inélastique, cassure, etc, entre deux noyaux peuvent aussi être décrits dans le cadre de théories microscopiques. Décrire la dynamique nucléaire nécessite en général d'employer des approches dépendantes du temps. C'est ce que nous verrons en abordant la théorie Hartree-Fock dépendant du temps (TDHF). Celle ci permet par exemple de prédire les barrières de fusion des noyaux issues de la compétition entre la répulsion coulombienne et l'attraction nucléaire. De plus, l'utilisation de théories dépendant explicitement du temps donne accès aux temps caractéristiques des mécanismes de collision entre noyaux. Les figures 7 et 8 donnent des exemples d'évolutions de densités lors de collisions d'ions lourds issues de calculs TDHF.

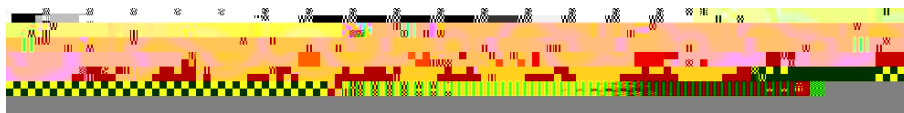


FIGURE 7 – Évolution de la densité lors de la collision $^{208}\text{Pb}+^{16}\text{O}$ à la barrière coulombienne.



FIGURE 8 – Évolution d'une isodensité lors d'une collision $^{238}\text{U} + ^{238}\text{U}$.

2 Équation de Schrödinger

La dynamique d'un système quantique non relativiste est donnée par l'équation de Schrödinger dépendante du temps

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + V\Psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi. \quad (1)$$

Nous discutons ici cette équation ainsi que son origine.

2.1 Dualité onde-corpuscule

En 1924, Louis de Broglie généralise la dualité onde-corpuscule de la lumière (Einstein, 1905) aux particules massiques. Une particule de masse m a ainsi une énergie

$$\begin{aligned} E &= \frac{p^2}{2m} + V \quad \rightarrow \text{corpuscule} \\ &= \hbar\omega \quad \rightarrow \text{onde} \end{aligned}$$

et une impulsion

$$\begin{aligned} \mathbf{p} &= m \mathbf{v} \quad \rightarrow \text{corpuscule} \\ &= \hbar \mathbf{k} \quad \rightarrow \text{onde.} \end{aligned}$$

2.2 Analogie mécanique-optique

En 1926, Schrödinger exprime la loi de la dynamique de l'onde $\Psi(\mathbf{r}, t)$ associée à une particule massique en se fondant sur l'analogie entre l'optique géométrique et l'équation de Hamilton de la mécanique classique, tout en s'inspirant de la démonstration qui permet de retrouver l'optique géométrique à partir de l'optique ondulatoire (voire schéma de la figure 9).

2.3 Équation d'évolution d'ondes planes de matière

Nous présentons succinctement une manière d'obtenir l'équation de Schrödinger à partir de l'énergie classique et de la dualité onde-corpuscule. Soit une onde plane $\Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi_0 e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)}$. On a alors

- $\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -i\omega \Psi \quad \Rightarrow \quad E\Psi = \hbar\omega \Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$
- $\nabla \Psi = i\mathbf{k}\Psi \quad \Rightarrow \quad \mathbf{p}\Psi = \hbar\mathbf{k}\Psi = -i\hbar \nabla \Psi \quad \Rightarrow \quad \mathbf{p}^2 \Psi = -\hbar^2 \Delta \Psi$
- $E\Psi = \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V \right) \Psi \quad \Rightarrow \quad \boxed{i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + V\Psi}.$

Cette dernière équation est l'équation de Schrödinger dépendante du temps.

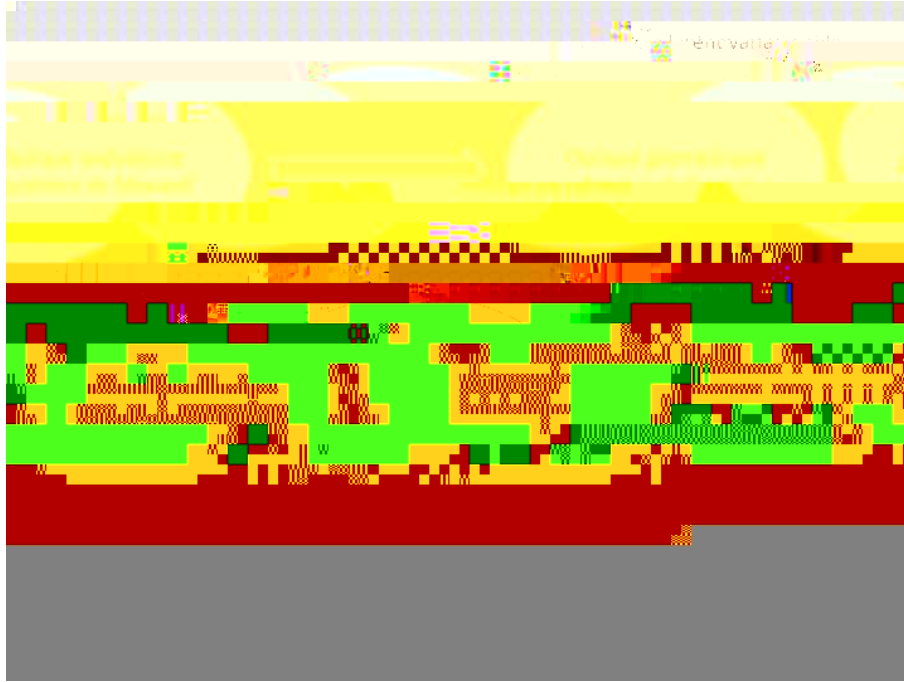


FIGURE 9 – Analogie optique/mécanique.

L'onde plane est une idéalisation. En réalité, l'aspect ondulatoire des particules est décrit par des paquets d'ondes qui peuvent être construits comme des superpositions d'ondes planes. Or, l'équation de Schrödinger est une équation différentielle linéaire. Elle est ainsi valable pour toute somme d'onde plane et donc pour un paquet d'onde réaliste.

2.4 Interprétation physique de la fonction d'onde

Une fonction d'onde est interprétée comme une **amplitude de probabilité** de présence : $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3r$ est la probabilité que la particule soit dans un volume élémentaire d^3r autour de \mathbf{r} à l'instant t . Cette interprétation en terme de probabilité implique que Ψ soit normée

$$\int d^3r |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 = 1. \quad (2)$$

2.5 Discussion

- L'interprétation probabiliste a ses détracteurs, comme Einstein pour qui " *Dieu ne joue pas au dés* ". Elle est toujours discutée à l'heure actuelle³.
- L'aspect ondulatoire de la matière implique la présence d'interférences. À l'échelle macroscopique, sans phénomène de décohérence⁴, elles sont présentes mais souvent négligeables, justifiant l'utilisation de la mécanique classique pour les objets macroscopiques. L'évolution

³Voir le dossier de *La Recherche* n°418, avril 2008.

⁴La décohérence est un concept important en mécanique quantique, discuté, par exemple, dans la seconde édition de *Physique Quantique* de M. Le Bellac ainsi que dans un article du même auteur, *Existe-t-il une frontière classique/quantique ?*, paru dans "Reflets de la Physique", journal édité par la Société Française de Physique.

des observables se retrouve en négligeant les termes d'ordre \hbar^2 (**principe de correspondance**⁵, que l'on appelle souvent abusivement "limite quand $\hbar \rightarrow 0$ ", comme sur la figure 9). La mécanique classique apparaît donc comme une limite de la mécanique quantique qui est plus fondamentale.

- Schrödinger a obtenu les premiers succès de son modèle en l'appliquant à l'atome d'hydrogène. En effet, à la limite stationnaire, c'est à dire lorsque la fonction d'onde ne dépend du temps qu'à travers une phase triviale $e^{i\omega t}$, on obtient l'équation de Schrödinger indépendante du temps

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + V\Psi = E\Psi. \quad (3)$$

Pour l'atome d'hydrogène, $V = -e^2/r$ où r est la distance de l'électron au centre du noyau. La résolution de cette équation différentielle permet d'obtenir le spectre en énergies accessibles au système. Pour les états liés, on obtient un **spectre discret** qui permet d'interpréter les raies spectroscopiques de l'atome d'hydrogène (séries de Lyman, Balmer, Paschen, Bracket et Pfund) comme des transitions de l'électron entre différents états d'énergies discrètes accompagnées de l'émission ou de l'absorption d'un photon emmenant la différence d'énergie.

2.6 Écriture moderne de l'équation de Schrödinger

L'équation de Schrödinger s'écrit dans l'espace de Hilbert

$$\hat{H}|\psi\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle \quad (4)$$

où $\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + \hat{V}$ est le **hamiltonien** du système et $|\psi\rangle$ un "ket", c'est à dire un vecteur de cet espace représentant l'état du système. Les **opérateurs** agissent sur les kets pour éventuellement les modifier.

Exemples d'opérateurs :

- le hamiltonien \hat{H} ,
- l'énergie cinétique $\hat{T} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m}$,
- l'énergie potentielle \hat{V} ,
- la position d'une particule $\hat{\mathbf{r}} = \hat{X}\mathbf{e}_x + \hat{Y}\mathbf{e}_y + \hat{Z}\mathbf{e}_z$,
- son impulsion $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\hat{\nabla}$
- le moment cinétique orbital $\hat{\mathbf{l}} = \hat{\mathbf{r}} \wedge \hat{\mathbf{p}}\dots$

⁵Cependant il existe des quantités sans correspondance classique comme le spin.

3 État quantique du noyau atomique

Un noyau est composé de N neutrons + Z protons. Il faut donc construire un état quantique de $N + Z$ particules. La structure de cet état est a priori similaire pour un système de nucléons ou d'électrons puisque les deux obéissent à l'équation de Schrödinger. La différence est qu'il y a deux espèces de fermions dans un noyau : protons et neutrons. Cependant, le fait qu'ils aient approximativement la même masse $m \simeq 939 \text{ MeV}/c^2$ et que l'interaction forte soit **indépendante de charge**⁶ permet de traiter le proton et le neutron comme deux états d'une même particule : le nucléon. Cela se traduit par l'utilisation d'un nombre quantique supplémentaire par rapport aux systèmes d'électrons : l'**isospin**. Le nom *isospin* provient du fait que l'algèbre associée est similaire à celle du spin. Elle est décrite, cependant, dans un espace abstrait qui lui est propre. On a donc $A = N + Z$ nucléons en interaction. Cependant, il est d'usage, en mécanique quantique, d'utiliser la lettre N pour le nombre de particules⁷ (qu'il ne faut alors pas confondre avec le nombre de neutrons).

Nous explicitons le cas d'un état à un, puis deux nucléons, avant de généraliser au cas à N nucléons.

3.1 États à un nucléon

L'état d'un nucléon est représenté par un vecteur d'état $|\varphi\rangle$ de l'espace de Hilbert à une particule $\mathcal{H}^{(1)}$.

Base de $\mathcal{H}^{(1)}$

On rappelle qu'on ne prend pas en compte la structure interne du nucléon en termes de quarks et de gluons. Les degrés de liberté d'un nucléon sont donc :

- sa position \mathbf{r} dans l'espace euclidien,
- son moment cinétique intrinsèque (**spin**) $\frac{1}{2}$ de projection $s = \pm\frac{1}{2}$ sur l'axe z de l'espace euclidien⁸,
- son **isospin** $\frac{1}{2}$ de projection $q = -\frac{1}{2}$ pour les protons et $q = +\frac{1}{2}$ pour les neutrons sur l'axe z de l'espace d'**isospin**.

Rappelons que l'espace d'isospin est différent de l'espace euclidien. La convention ($q = -\frac{1}{2}$ pour les protons) est inversée en physique des particules où il est plus simple d'avoir un isospin de même signe que la charge électrique. En physique nucléaire, les noyaux ont souvent plus de neutrons que de protons et choisir $q = +\frac{1}{2}$ pour les neutrons permet d'avoir un isospin total positif pour de tels noyaux.

Les états de $\mathcal{H}^{(1)}$ s'écrivent donc

$$|\mathbf{r}\rangle \left| \frac{1}{2}s \right\rangle \left| \frac{1}{2}q \right\rangle = |\mathbf{r} \frac{1}{2}s \frac{1}{2}q\rangle \equiv |\mathbf{r}sq\rangle$$

⁶L'indépendance de charge stipule que l'interaction entre deux protons est la même que l'interaction entre deux neutrons. Dans une certaine mesure, cette interaction est la même entre un proton et un neutron. Cependant, certains états de deux protons ou deux neutrons interdits par le principe de Pauli ne le sont plus dans le cas d'un proton et un neutron. Pour ces derniers états, l'interaction est différente. Cela se manifeste, par exemple, dans le fait que le deuton soit lié alors que le di-neutron ne l'est pas.

⁷Il est plus aisé de prononcer *état à N particules* que *état à A particules*.

⁸Le choix de l'axe z est une convention.

L'ensemble des états $\{|rsq\rangle\}$ constituent une base de $\mathcal{H}^{(1)}$. Le produit scalaire de deux états de cette base s'écrit

$$\langle rsq|\mathbf{r}'s'q'\rangle = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta_{ss'} \delta_{qq'} \quad (5)$$

où $\langle rsq|$ est l'état conjugué de $|rsq\rangle$, appelé vecteur **bra** de $\mathcal{H}^{(1)}$. Un ket peut être vu comme un vecteur colonne de l'espace de Hilbert et un bra comme un vecteur ligne.

Exercice 1 :

Quelle est la dimension de $\langle rsq|\mathbf{r}'s'q'\rangle$? On rappelle que $\delta(\mathbf{r})$ est une distribution de Dirac en trois dimensions telle que $\int d^3r \delta(\mathbf{r}) = 1$ et $\delta(\mathbf{r})$ est nulle en tout point sauf en 0, et δ_{ij} est le symbole de Kroenecker : $\delta_{ij} = 1$ si $i = j$ et 0 sinon.

Décomposition de $|\varphi\rangle$ dans $|rsq\rangle$: lien avec la fonction d'onde

L'état $|\varphi\rangle$ s'écrit dans la base $\{|rsq\rangle\}$ comme

$$|\varphi\rangle = \sum_{sq} \int d^3r \varphi(\mathbf{r}sq) |rsq\rangle. \quad (6)$$

On notera $\sum_{sq} \equiv \sum_{s=-1/2}^{1/2} \sum_{q=-1/2}^{1/2}$ et φ est la fonction d'onde à un nucléon.

L'état conjugué de $|\varphi\rangle$ est le bra $\langle\varphi|$ et s'écrit

$$\langle\varphi| = \sum_{sq} \int d^3r \varphi^*(\mathbf{r}sq) \langle rsq|. \quad (7)$$

L'état décrivant une particule doit être normé, c'est à dire

$$\sum_{sq} \int d^3r |\varphi(\mathbf{r}sq)|^2 = 1. \quad (8)$$

Exercice 2 :

Quelle est la dimension de $\varphi(\mathbf{r}sq)$?

Exercice 3 :

Montrer que $\langle\varphi|\varphi\rangle = 1$.

Relation de fermeture de $\mathcal{H}^{(1)}$

L'opérateur identité (relation de fermeture) dans $\mathcal{H}^{(1)}$ s'écrit

$$\hat{1} = \sum_{sq} \int d^3r |rsq\rangle \langle rsq|. \quad (9)$$

Il a les propriétés : $\hat{1}^2 = \hat{1}$, $\hat{1}|\varphi\rangle = |\varphi\rangle$ et $\hat{1}\hat{O} = \hat{O}\hat{1} = \hat{O}$ où \hat{O} est une observable quelconque.

Exercice 4 :

Montrer les deux premières propriétés ci-dessus.

Exercice 5 :

Montrer que $\varphi(\mathbf{rsq}) = \langle \mathbf{rsq} | \varphi \rangle$.

Exercice 6 :

Peut-on avoir $|\varphi\rangle = |\mathbf{rsq}\rangle$?

3.2 États à deux nucléons

On introduit dans cette partie des concepts importants en mécanique quantique comme l'indiscernabilité, le principe de Pauli et les corrélations. Dans le cours, on notera φ pour les états à une particule, Ψ pour les états de particules corrélées et Φ pour les états de particules indépendantes.

Deux particules indépendantes et discernables

On entend par **indépendantes** le fait que l'état de l'une des deux particules n'est pas affecté par l'état de l'autre, par opposition à **corrélées**. La connaissance de l'état de l'une des particule n'apporte aucune information sur l'état de l'autre. L'état de l'une est *indépendant* de l'état de l'autre.

On entend par **discernables** le fait qu'on puisse numéroter les particules. Par exemple, un atome d'hydrogène a deux particules discernables : un proton, auquel on peut donner le numéro 1, et un électron, numéro 2. Si le proton est dans l'état $|\varphi\rangle$ et l'électron dans l'état $|\chi\rangle$, l'état total peut alors s'écrire⁹ $|1 : \varphi, 2 : \chi\rangle$. Les états $|\varphi\rangle$ et $|\chi\rangle$ sont des états de deux espaces $\mathcal{H}^{(1)}$ différents, l'un associé aux degrés de liberté du proton, l'autre à ceux de l'électron.

De manière générale, pour des particules discernables, on appelle $|1 : \varphi, 2 : \chi\rangle$ un **état de particules indépendantes** car il sert à décrire un système de particules indépendantes, au sens défini ci-dessus. Dans le cas de deux particules libres, par exemple, φ et χ peuvent être des ondes planes sans aucune corrélations entre elles. La dénomination "état de particules indépendantes" prête cependant à confusion car on peut *aussi* utiliser la forme $|1 : \varphi, 2 : \chi\rangle$ pour décrire un système comportant certaines corrélations. L'exemple précédent de l'atome d'hydrogène illustre, en effet, un cas de système corrélé. En particulier, si la fonction d'onde φ décrivant l'état du proton est localisée spatialement, alors la fonction d'onde χ décrivant l'électron ne peut pas s'étendre à plus de quelques Angströms au delà de l'extension de $|\varphi\rangle$. Un état de particules indépendantes peut donc servir à décrire un système comportant certaines corrélations. Il s'agit d'une propriété très importante à la base de la description microscopique des noyaux que nous allons aborder dans ce cours. Nous reviendrons sur cette propriété au chapitre 4 traitant du lien entre symétries et corrélations.

Notons enfin que le produit scalaire s'écrit

$$\langle 1 : \varphi, 2 : \chi | 1 : \varphi', 2 : \chi' \rangle = \langle \varphi | \varphi \rangle \langle \chi | \chi' \rangle. \quad (10)$$

⁹On voit parfois noté $|1 : \varphi, 2 : \chi\rangle \equiv |\varphi\rangle |\chi\rangle$.

Cas de deux nucléons indépendants

Les nucléons sont des particules identiques, même si leurs états quantiques peuvent être différents (position, spin, isospin). En mécanique quantique, les particules identiques sont indiscernables (on ne peut pas les numérotter). C'est le **postulat d'indiscernabilité** des particules identiques. On ne peut donc pas faire la différence entre $|1 : \varphi, 2 : \chi\rangle$ et $|1 : \chi, 2 : \varphi\rangle$. L'état du système à deux nucléons indépendants est donc un mélange de ces deux états avec les mêmes probabilités¹⁰.

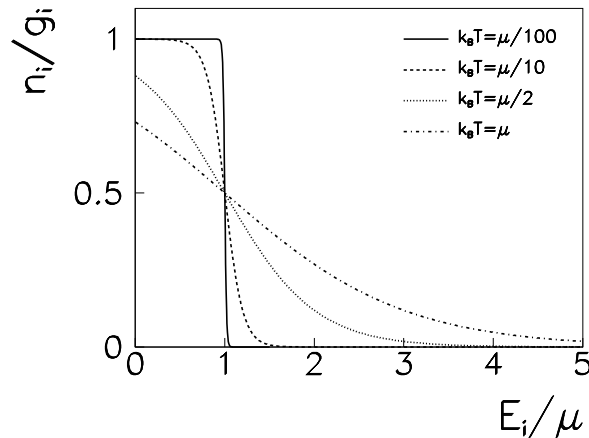


FIGURE 10 – Distribution statistique de Fermi-Dirac à différentes températures.

Rappelons aussi qu'un gaz de particules identiques (sans interaction) peut être de deux types : composé de **fermions**, il obéit alors à la statistique de Fermi-Dirac (voir figure 10)

$$n_i = \frac{g_i}{\exp\left(\frac{E_i - \mu}{k_B T}\right) + 1} \quad (11)$$

ou de **bosons**, obéissant à celle de Bose-Einstein

$$n_i = \frac{g_i}{\exp\left(\frac{E_i - \mu}{k_B T}\right) - 1} \quad (12)$$

où n_i est le nombre de particules occupant l'état $|i\rangle$ d'énergie E_i et de dégénérescence g_i , pour un système à température T avec un potentiel chimique μ . En particulier, la statistique de Fermi-Dirac prend en compte le **principe d'exclusion de Pauli** qui stipule que *deux fermions identiques ne peuvent être dans le même état quantique*, contrairement aux bosons qui ont l'*instinct grégaire*.

Le **théorème spin-statistique** stipule que les fermions sont des particules de **spin demi-entier** (électron, quark, neutrino...) alors que les bosons sont de **spin entier** (photon, pion, gluon, boson de Higgs...). Ce théorème se démontre en théorie quantique des champs relativistes¹¹.

¹⁰On voit bien la différence avec l'exemple de l'hydrogène que nous avons utilisé précédemment pour illustrer le cas de deux particules discernables. En effet, inverser la fonction d'onde du proton avec celle de l'électron dans un atome d'hydrogène donne un état totalement différent!

¹¹Hors programme.

Ainsi, les nucléons ayant un spin $1/2$, ce sont des fermions devant respecter le principe de Pauli. Pour se faire, il suffit d'imposer que l'état du système soit antisymétrique par échange des numéros des particules. Un état de deux nucléons indépendants $|\Phi\rangle$ où les nucléons occupent les états $|\varphi\rangle$ et $|\chi\rangle$ de $\mathcal{H}^{(1)}$ s'écrit ainsi

$$|\Phi\rangle = |\varphi\chi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1 : \varphi, 2 : \chi\rangle - |1 : \chi, 2 : \varphi\rangle). \quad (13)$$

Le facteur $1/\sqrt{2}$ est un facteur de normalisation.

Exercice 7 :

Montrer que l'état $|\Phi\rangle$ est bien normé.

L'état $|\Phi\rangle$ est un état de l'espace de Hilbert à deux nucléons $\mathcal{H}^{(2)}$. En fait, il est possible de montrer que l'ensemble des états de deux nucléons indépendants $|\Phi\rangle$ constitue une base de $\mathcal{H}^{(2)}$. D'autre part, on vérifie bien que $|\Phi\rangle$ s'annule pour $|\varphi\rangle = |\chi\rangle$. Cela signifie que **les états $|1 : \varphi, 2 : \varphi\rangle$ n'appartiennent pas à $\mathcal{H}^{(2)}$** . On dit parfois que le principe de Pauli induit des corrélations entre les particules puisqu'il leur interdit d'être dans le même état, et donc l'état de l'une n'est pas entièrement indépendant de l'état de l'autre. Cependant, en toute rigueur, ce n'est pas exact puisque les états où les deux nucléons sont dans le même état de $\mathcal{H}^{(1)}$ n'appartiennent pas à l'espace de Hilbert à 2 fermions $\mathcal{H}^{(2)}$.

Remarque : $|\varphi\chi\rangle = -|\chi\varphi\rangle$. Ces deux états sont identiques à une phase près. Ils décrivent donc le même état physique du système.

Exercice 8 :

*Montrer que le produit scalaire de deux états à deux particules indépendantes s'écrit comme le **déterminant** de la matrice des produits scalaires des états à une particule.*

L'exercice précédent illustre pourquoi les états de fermions indépendants sont souvent appelés **déterminants de Slater**.

État de deux nucléons corrélés

Deux nucléons sont **corrélés** si on peut affirmer ceci :

- si $|\varphi_1\rangle$ est occupé, alors $|\chi_1\rangle$ l'est aussi (et donc les autres états de $\mathcal{H}^{(1)}$ ne le sont pas),
- si $|\varphi_2\rangle$ est occupé, alors $|\chi_2\rangle$ l'est aussi
- ...

L'état d'un système corrélé s'écrit donc sous la forme générale

$$|\Psi\rangle = C_1 |\varphi_1\chi_1\rangle + C_2 |\varphi_2\chi_2\rangle + \dots = \sum_n C_n |\varphi_n\chi_n\rangle. \quad (14)$$

En fait, on peut aussi écrire un état de particules indépendantes sous cette forme si la base de $\mathcal{H}^{(2)}$ choisie n'est pas uniquement constituée d'états entièrement occupés ou inoccupés. On dit donc d'un état $|\Psi\rangle$ qu'il est corrélé *s'il n'existe pas de base de $\mathcal{H}^{(2)}$ qui permette d'écrire $|\Psi\rangle$ comme un simple état de particules indépendantes $|\Phi\rangle = |\varphi\chi\rangle$.*

Exemple :

Un deuteron est un noyau constitué d'un proton et d'un neutron. Donc, si le proton est en \mathbf{r} , alors le neutron est en $\mathbf{r}' \sim \mathbf{r}$ (et pas à l'autre bout de la pièce). Cette information signifie que le système est corrélé.

Base de $\mathcal{H}^{(2)}$

Exercice 9 :

Montrer que si $\{|\varphi_i\rangle\}$ est une base de $\mathcal{H}^{(1)}$, alors $\{|\varphi_i\varphi_{j>i}\rangle\}$ est une base de $\mathcal{H}^{(2)}$ (on ne montrera pas la complétude de la base).

Cet exercice montre qu'une base de déterminants de Slater est une base de $\mathcal{H}^{(2)}$. La condition $j > i$ évite le double comptage des états de la base et donc d'avoir une base surcomplète puisque $|\varphi_i\varphi_j\rangle$ et $|\varphi_j\varphi_i\rangle$ décrivent le même état physique. Cependant, on omet souvent cette condition dans la définition de la base pour alléger les notations. Une base possible de $\mathcal{H}^{(2)}$ est donc $\{|\mathbf{r}_i s_i q_i \mathbf{r}_j s_j q_j\rangle\}$. Par commodité, on note souvent $|\xi\rangle \equiv |\mathbf{r}sq\rangle$ et $\sum_{sq} \int d^3r = \int d\xi$ lorsqu'il n'y a pas d'ambiguïté.

Fonction d'onde à deux nucléons

La fonction d'onde de deux nucléons s'écrit

$$\Psi(\xi_1\xi_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\langle\xi_1\xi_2|\Psi\rangle \quad (15)$$

où $|\xi_1\xi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1 : \xi_1, 2 : \xi_2\rangle - |1 : \xi_2, 2 : \xi_1\rangle)$ est un état de la base de $\mathcal{H}^{(2)}$.

Exercice 10 :

Soit $|\Phi\rangle = |\varphi_1\varphi_2\rangle$. Montrer que $\Phi(\xi_1\xi_2)$ est normée.

Relation de fermeture de $\mathcal{H}^{(2)}$

L'opérateur identité dans $\mathcal{H}^{(2)}$ s'écrit

$$\hat{1} = \frac{1}{2} \int d\xi_1 d\xi_2 |\xi_1\xi_2\rangle \langle\xi_1\xi_2|. \quad (16)$$

Exercice 11 :

Montrer que cet opérateur possède les mêmes propriétés que dans $\mathcal{H}^{(1)}$.

3.3 États à N nucléons

Nous généralisons maintenant les expressions obtenues dans le cas de deux nucléons au cas d'un système de N nucléons.

Opérateur d'antisymétrisation

L'opérateur d'antisymétrisation

$$\hat{\mathcal{A}} = \frac{1}{N!} \sum_{\text{permutation } \mathcal{P}} \text{sign}(\mathcal{P}) \hat{\mathcal{P}} \quad (17)$$

permet de construire un état à N fermions (donc antisymétrique par rapport à l'échange des numéros des particules) à partir d'un état de particules discernables. Cet opérateur génère une somme sur toutes les permutations possibles des états à une particule, pondérées par le signe de la permutation (+1 si le nombre de permutations deux à deux est paire, -1 sinon).

Par exemple, pour deux nucléons, on a

$$\hat{\mathcal{A}} |1 : \varphi_1, 2 : \varphi_2\rangle = \frac{1}{2!} (|1 : \varphi_1, 2 : \varphi_2\rangle - |1 : \varphi_2, 2 : \varphi_1\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} |\varphi_1 \varphi_2\rangle. \quad (18)$$

Exercice 12 :

Expliciter $\hat{\mathcal{A}} |1 : \varphi_1, 2 : \varphi_2, 3 : \varphi_3\rangle$.

L'opérateur d'antisymétrisation $\hat{\mathcal{A}}$ se comporte comme un projecteur¹² dans l'espace des états antisymétrisés. En particulier, comme tous les projecteurs, il possède la propriété $\hat{\mathcal{A}}^2 = \hat{\mathcal{A}}$.

Exercice 13 :

Montrer en particulier que $\hat{\mathcal{A}}^2 |1 : \varphi_1, 2 : \varphi_2\rangle = \hat{\mathcal{A}} |1 : \varphi_1, 2 : \varphi_2\rangle$.

États de N nucléons indépendants

Notons $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_N$ les N états occupés. L'état du système s'écrit alors comme

$$|\Phi\rangle = |\varphi_1 \dots \varphi_N\rangle = \sqrt{N!} \hat{\mathcal{A}} |1 : \varphi_1, \dots, N : \varphi_N\rangle. \quad (19)$$

Produit scalaire de deux états de particules indépendantes

Par généralisation du résultat de l'exercice 8 à $\mathcal{H}^{(N)}$, le produit scalaire de deux états de particules indépendantes s'écrit comme le déterminant de la matrice des recouvrements (produits scalaires) des états à une particule

$$\langle \varphi_1 \dots \varphi_N | \chi_1 \dots \chi_N \rangle = \begin{vmatrix} \langle \varphi_1 | \chi_1 \rangle & \cdots & \langle \varphi_1 | \chi_N \rangle \\ \vdots & & \vdots \\ \langle \varphi_N | \chi_1 \rangle & \cdots & \langle \varphi_N | \chi_N \rangle \end{vmatrix}. \quad (20)$$

Base de $\mathcal{H}^{(N)}$

Les états de nucléons indépendants constituent une base de $\mathcal{H}^{(N)}$, par exemple $\{|\varphi_1 \dots \varphi_N\rangle\}$ ou encore $\{|\mathbf{r}_1 s_1 q_1 \dots \mathbf{r}_N s_N q_N\rangle\}$.

¹²Attention, dans certains livres, une autre convention est utilisée pour définir $\hat{\mathcal{A}}$ où $N!$ est remplacé par $\sqrt{N!}$. Dans ce cas, \mathcal{A} n'est plus un projecteur.

États corrélés

Les états corrélés de $\mathcal{H}^{(N)}$ s'écrivent

$$|\Psi\rangle = \sum_{i_1 \dots i_N} C_{i_1 \dots i_N} |\varphi_{i_1} \dots \varphi_{i_N}\rangle. \quad (21)$$

Fonction d'onde à N nucléons

La fonction d'onde d'un état à N nucléons $|\Psi\rangle$ s'écrit en développant $|\Psi\rangle$ sur la base $\{|\xi_1 \dots \xi_N\rangle\}$ (rappel $|\xi\rangle \equiv |\mathbf{r}sq\rangle$)

$$\Psi(\xi_1 \dots \xi_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \langle \xi_1 \dots \xi_N | \Psi \rangle. \quad (22)$$

Dans le cas de N nucléons indépendants, la fonction d'onde prend la forme d'un déterminant de Slater

$$\Phi(\xi_1 \dots \xi_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \varphi_1(\xi_1) & \dots & \varphi_1(\xi_N) \\ \vdots & & \vdots \\ \varphi_N(\xi_1) & \dots & \varphi_N(\xi_N) \end{vmatrix}. \quad (23)$$

Elles sont normées

$$\int d\xi_1 \dots d\xi_N |\Phi(\xi_1 \dots \xi_N)|^2 = 1. \quad (24)$$

Relation de fermeture de $\mathcal{H}^{(N)}$

L'opérateur identité dans $\mathcal{H}^{(N)}$ s'écrit

$$\hat{1} = \frac{1}{N!} \int d\xi_1 \dots d\xi_N |\xi_1 \dots \xi_N\rangle \langle \xi_1 \dots \xi_N|. \quad (25)$$

4 Symétries et corrélations

Dans l'équation de Schrödinger, toutes les données physiques sont contenues dans le hamiltonien \hat{H} , en particulier les **symétries** du système. Elles sont très importantes car elles peuvent générer des **invariants**¹³ (énergie, impulsion, moment cinétique...), c'est à dire des constantes du mouvement.

4.1 Exemple de problème : le deuton libre

On veut décrire un deuton libre, c'est à dire un neutron et un proton liés entre eux mais ne baignant dans aucun potentiel extérieur. Bien sûr, les deux nucléons étant liés, on a $\mathbf{r}_N \simeq \mathbf{r}_P$.

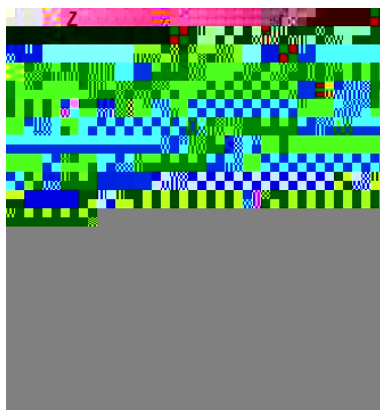


FIGURE 11 – Représentation des coordonnées spatiales du deuton.

Par contre, le centre de masse $\mathbf{R} = (\mathbf{r}_N + \mathbf{r}_P)/2$ du deuton peut-être n'importe où (le deuton est libre). Ce système est **corrélé** car on peut dire :

- si $\mathbf{r}_P = \mathbf{r}$, alors $\mathbf{r}_N \simeq \mathbf{r}$
- si $\mathbf{r}_P = \mathbf{r}'$, alors $\mathbf{r}_N \simeq \mathbf{r}'$
- ...

Il est donc a priori impossible de décrire le deuton libre à l'aide d'un état de particules indépendantes (déterminant de Slater), notamment si on veut que l'état respecte les symétries du problème. Ici, il s'agit notamment de l'invariance par translation qui impose d'avoir une probabilité identique de trouver le deuton n'importe où dans l'espace.

4.2 Inclusion de corrélations par brisure de symétries

Une technique couramment employée en physique nucléaire est de briser les symétries de \hat{H} afin d'inclure des corrélations dans l'état décrivant le système, tout en conservant la simplicité d'un déterminant de Slater.

Dans le cas du deuton, cela revient à considérer que les deux particules sont indépendantes mais localisées dans l'espace à l'aide d'un potentiel extérieur qui brise l'invariance par translation de \hat{H} et qui remplace l'interaction entre les deux nucléons. On obtient donc un état de

¹³Voir le théorème de Noether.

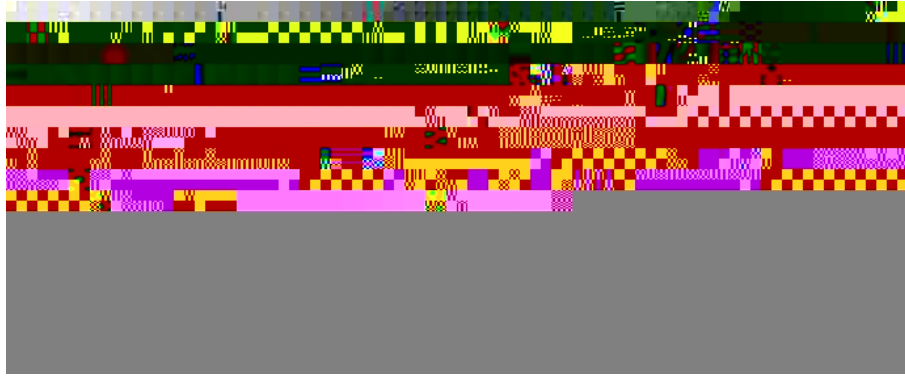


FIGURE 12 – Schéma de principe de la technique de brisure de symétrie.

particules indépendantes contenant des corrélations spatiales mais n'étant pas invariant par translation.

Cette technique se généralise à d'autres types de corrélations. À chaque fois, on brise des symétries du problème dans un état de particules indépendantes pour y inclure des corrélations.

4.3 Exemples de la déformation et de l'appariement

Description des noyaux déformés

La plupart des noyaux non magiques sont déformés dans leur référentiel intrinsèque¹⁴. Expérimentalement, cela se traduit par des bandes rotationnelles dans les spectres énergétiques des noyaux ($E \sim J(J + 1)$). Or, en mécanique quantique, pour qu'un système puisse tourner, il faut qu'il soit déformé¹⁵.

On peut décrire un noyau déformé avec un état de particules indépendantes en considérant un potentiel extérieur déformé. On inclut ainsi des corrélations spatiales supplémentaires. En



effet, on peut dire que si on trouve une particule en A , alors il y a de grandes chances qu'on en trouve une en B et pas en C . Ces corrélations sont dites quadrupolaires (le noyau prend

¹⁴Un nucléon au sein du noyau le "voit" déformé car, pour lui, le repère naturel est le *repère intrinsèque* au noyau. Par contre, un observateur extérieur au noyau (et qui n'interagit pas avec lui) le voit sphérique. Pour lui, le repère naturel est le *repère du laboratoire*. Le hamiltonien nucléaire étant invariant par rotation, le système est naturellement vu comme sphérique. Cette sphéricité est "restaurée" par un *mouvement de point zéro*, analogue à celui de l'état fondamental d'un oscillateur harmonique par exemple, qui "moyenne" toutes les orientations possible du noyau déformé.

¹⁵Effectuer une rotation d'un état sphérique donne le même état à une phase près, décrivant donc le même état physique. Un système sphérique ne peut donc pas tourner en mécanique quantique.

la forme d'un quadrupole ou "ballon de rugby"). Elles font partie d'une classe de corrélations dites **statiques** et à **longues portées** (elles corrélerent des nucléons aux extrémités du noyau).

Corrélations d'appariement

Elles sont obtenues en brisant l'invariance de jauge du groupe de symétrie $U(1)$ associée à la conservation du nombre de particules. L'état du système n'a a priori plus un *bon* nombre de particules, c'est à dire qu'il n'est pas état propre de l'opérateur \hat{N} mesurant le nombre de particules. En fait, l'état utilisé pour inclure les corrélations d'appariement n'est pas un état de particules indépendantes, mais un état de quasi-particules indépendantes. Ces corrélations sont importantes en physique nucléaire. Elles sont responsables d'une **phase superfluide** dans les noyaux. Leur traitement est similaire à celui de la supraconductivité en matière condensée. En se limitant à un appariement entre états symétriques par renversement du temps, cela donne lieu à la théorie BCS (Bardeen-Cooper-Schrieffer), qui ont ainsi été les premiers à proposer une interprétation microscopique de la supraconductivité. En considérant des quasi-particules plus générales, on aboutit à la théorie Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB).

4.4 Quelques remarques

- Toutes les corrélations ne peuvent pas être incluses par la technique de brisure de symétrie.
- D'autres techniques permettent d'inclure d'autres types de corrélations. C'est le cas, par exemple, de la technique des **projections** sur des bons nombres quantiques pour restaurer les symétries brisées, ainsi que la **méthode des coordonnées génératrices** (GCM). Cependant, dans ces approches, le noyau n'est plus décrit par un état de particules indépendantes.
- D'autres corrélations sont aussi directement incluses en modifiant l'interaction entre les nucléons. C'est ce que nous verrons dans le chapitre sur la théorie Hartree-Fock.
- Le choix du potentiel extérieur est crucial pour avoir une bonne description des noyaux. On verra que le potentiel optimum est obtenu dans le cadre des théories de champ moyen auto-cohérent (cas de la théorie Hartree-Fock), c'est à dire qui dépend de l'état du système.

4.5 Le modèle de Goeppert-Mayer et Jensen

Développé en 1948, ce modèle, dit "à une particule" a valu le prix Nobel à ses auteurs, Axel Jensen et Maria Goeppert-Mayer (deuxième et dernière femme à avoir obtenu le prix Nobel de physique après Marie Curie). Il a permis d'expliquer les **nombres magiques** dans les noyaux (surplus d'énergie associé à un certain nombre de neutrons ou de protons). Ils sont ainsi interprétés comme un **gap** en énergie dans les spectres des énergies à une particule.

Dans ce modèle, l'interaction entre les nucléons est remplacée par un **champ moyen**. Chaque nucléon **évolue librement** dans ce champ moyen. Le champ moyen est simulé par un potentiel de Woods-Saxon

$$V_0(r) = \frac{-V_0}{1 + \exp\left(\frac{r-R}{a}\right)} \quad (26)$$

où $R = r_0 A^{1/3}$ est le rayon du potentiel, V_0 sa profondeur et a son épaisseur de surface (voir figure 13). Chaque nucléon est supposé indépendant, avec la contrainte que le principe de

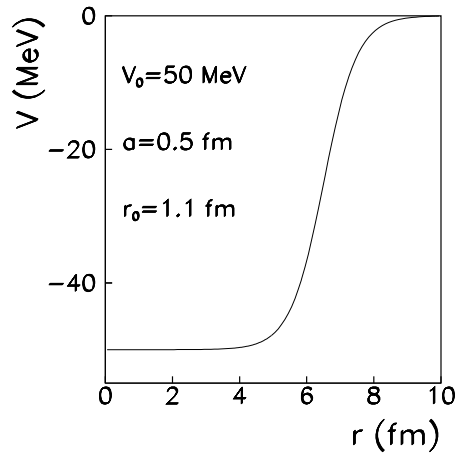


FIGURE 13 – Représentation du potentiel de Woods-Saxon pour un ^{208}Pb .

Pauli interdit d'en mettre deux dans le même état quantique. L'état fondamental est donc un déterminant de Slater construit à partir des N états à une particule ayant les énergies les plus basses (voir figure 14).

On peut aussi décrire certains états excités dits "1-particule 1-trou" du noyau en promouvant un nucléons sur des états d'énergies supérieures à l'énergie de Fermi (voir la figure 15). De même, on peut promouvoir 2 nucléons, donnant lieu à un état "2-particules 2-trous", etc. En notant e_i l'énergie à une particule du niveau de départ et e_f celle d'arrivée, l'énergie d'excitation de l'état à une particule-un trou s'écrit $E^* = e_f - e_i$.

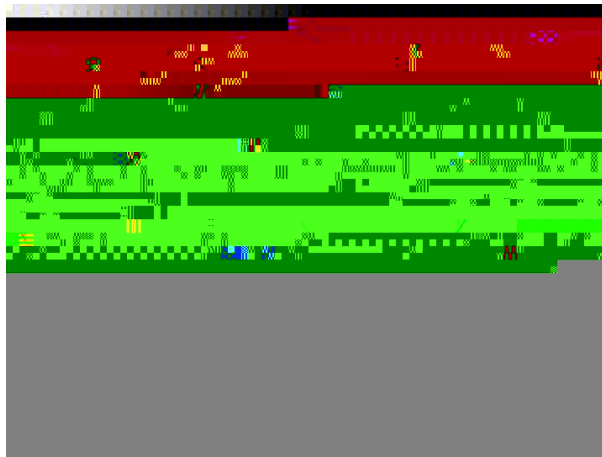


FIGURE 14 – Remplissage des couches jusqu'au niveau de Fermi.

On note que le potentiel de Woods-Saxon localise le noyau et donc brise l'invariance par translation. On a vu que c'était le prix à payer pour corrélérer spatialement les nucléons tout en gardant une description en termes de particules indépendantes.

Deux "écoles" se sont attachées à améliorer la description du noyau en partant de ce modèle. La première est celle du **modèle en couche** qui se contente d'un potentiel extérieur simple (en général un oscillateur harmonique car les propriétés analytiques de ses états propres simplifient les calculs) comme champ moyen mais qui inclut des corrélations en "ajoutant" une



FIGURE 15 – Excitation une particule-un trou.

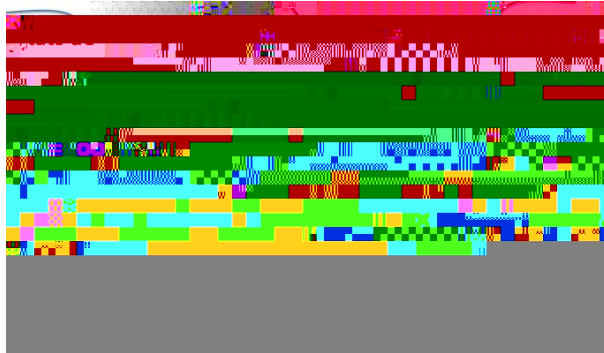


FIGURE 16 – Cœur, espace de valence, et états exclus de la base dans le cadre du modèle en couche.

interaction entre les nucléons ajustée pour reproduire les données expérimentales de spectroscopie des noyaux (les énergies et nombres quantiques des états excités). Dans le modèle en couche, on construit une base de déterminants de Slater en considérant toutes les excitations particules-trous possibles. On exprime alors le hamiltonien dans cette base (appelée espace des configurations). On obtient une matrice à diagonaliser pour obtenir les états propres et valeurs propres du hamiltonien. Le modèle en couche est souvent lourd à mettre en œuvre numériquement à cause de la taille des matrices à diagonaliser. Il ne s'applique "intégralement" qu'aux noyaux légers (typiquement jusqu'à l' ^{16}O) et partiellement aux noyaux plus lourds. Dans ce dernier cas, l'espace de diagonalisation est tronqué en supposant un **cœur inerte** d'états les plus liés ne participant pas aux excitations particule-trou (voir figure 16). Seuls les états les moins liés, appartenant à l'**espace de valence** sont utilisés pour générer des excitations particules-trous.

Exercice 14 :

Soit deux nucléons dans un espace de valence comprenant deux niveaux d'énergie à une particule 0 et $+e > 0$ et de dégénérescence 2 (on peut mettre au maximum deux nucléons par niveau). La base des états à deux nucléons dans l'espace de valence est donc constituée de trois états correspondant aux configurations suivantes (figure 17)

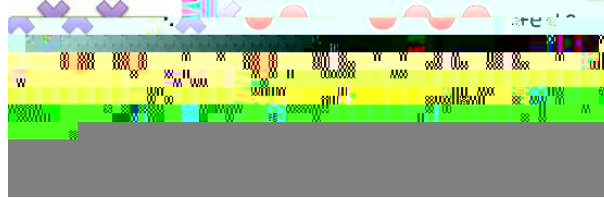


FIGURE 17 –

Soit \hat{H}_0 le hamiltonien de particules indépendantes. Écrire la matrice représentant \hat{H}_0 dans la base $\{|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle\}$.

Soit une interaction supplémentaire qui autorise les paires de nucléons à "diffuser" d'un niveau à l'autre. Par exemple, si le système est initialement en $|0\rangle$, il aura, au cours du temps, une probabilité non nulle d'être en $|2\rangle$ (et vice versa). On écrit cette interaction

$$\hat{V} = \Delta (|0\rangle\langle 2| + |2\rangle\langle 0|) \quad \text{avec } \Delta \text{ réel.}$$

Écrire la matrice représentant $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$.

Trouver ses vecteurs propres et ses valeurs propres.

Représenter les schémas de niveaux de \hat{H}_0 et \hat{H} en supposant $\Delta > 0$ et que \hat{V} est une perturbation de \hat{H}_0 , c'est à dire $\Delta \ll e$.

L'autre piste consiste à améliorer le champ moyen lui même en dépassant la paramétrisation de Woods-Saxon. On cherche alors à inclure dans l'état de particules indépendantes baignant dans le champ moyen un maximum de corrélations en brisant des symétries du champ moyen. C'est l'école du champ moyen, très implantée en France. Le principale avantage de ce genre de technique est que le temps de calcul ne croît que (à peu près) linéairement avec le nombre de nucléons du système¹⁶.

La théorie Hartree-Fock constitue la base de ces théories. Elle est appliquée dans de nombreux domaines de physique. Bien que la théorie Hartree-Fock date de la fin des années 1920, sa première application réaliste en physique nucléaire date de 1972 par Vautherin et Brink.

¹⁶Dans le cas du modèle en couche, le temps de calcul dépend du nombre d'états de la base qui est une combinatoire du nombre de nucléons à disposer dans les états à une particule.

5 Observables d'un système à N nucléons

On a déjà vu et manipulé un type d'observable : le hamiltonien. Il donne accès à l'énergie du système et a la particularité d'intervenir dans son équation d'évolution (l'équation de Schrödinger). Comme pour les états, on commence par aborder les observables dans l'espace de Hilbert à un nucléon $\mathcal{H}^{(1)}$ avant de généraliser à $\mathcal{H}^{(N)}$.

5.1 Observables dans $\mathcal{H}^{(1)}$

Elles s'écrivent dans la base $\{|\mathbf{r}sq\rangle\}$

$$\hat{f} = \sum_{ss'qq'} \int d^3r d^3r' |\mathbf{r}sq\rangle f(\mathbf{r}sq \mathbf{r}'s'q') \langle \mathbf{r}'s'q'| \quad (27)$$

avec les **éléments de matrice** de f

$$f(\mathbf{r}sq \mathbf{r}'s'q') = \langle \mathbf{r}sq | \hat{f} | \mathbf{r}'s'q' \rangle. \quad (28)$$

Exercice 15 :

Montrer cette écriture de \hat{f} en utilisant la relation de fermeture dans $\mathcal{H}^{(1)}$.

L'observation de \hat{f} dans l'état $|\varphi\rangle$ d'un nucléon donne en moyenne (au sens probabiliste)

$$\langle \hat{f} \rangle_\varphi \equiv \langle \varphi | \hat{f} | \varphi \rangle = \sum_{ss'qq'} \int d^3r d^3r' \varphi^*(\mathbf{r}sq) f(\mathbf{r}sq \mathbf{r}'s'q') \varphi(\mathbf{r}'s'q'). \quad (29)$$

5.1.1 Exemple 1 : position

La position moyenne sur l'axe x est donnée par $\langle \hat{X} \rangle_\varphi$ où

$$\hat{X} |\mathbf{r}sq\rangle = x |\mathbf{r}sq\rangle, \quad (30)$$

ce qui signifie que $|\mathbf{r}sq\rangle$ est état propre de \hat{X} avec la valeur propre x . On a donc

$$X(\mathbf{r}sq \mathbf{r}'s'q') = x \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta_{ss'} \delta_{qq'} \quad (31)$$

et

$$\langle \hat{X} \rangle_\varphi = \sum_{sq} \int d^3r |\varphi(\mathbf{r}sq)|^2 x. \quad (32)$$

5.1.2 Exemple 2 : impulsion

L'impulsion moyenne le long de l'axe x s'écrit $\langle \hat{p}_x \rangle$ où, comme on la vu au chapitre 2

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}. \quad (33)$$

Les éléments de matrice de p_x s'écrivent

$$p_x(\mathbf{r}sq \mathbf{r}'s'q') = -i\hbar \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta_{ss'} \delta_{qq'} \frac{\partial}{\partial x} \quad (34)$$

et donc

$$\langle \hat{p}_x \rangle = -i\hbar \sum_{sq} \int d^3r \varphi^*(\mathbf{r}sq) \left(\frac{\partial}{\partial x} \varphi(\mathbf{r}sq) \right). \quad (35)$$

5.2 Observables à un corps dans $\mathcal{H}^{(N)}$

On distingue plusieurs types d'observables en fonction du nombre de particules qu'elles corrént. Ce sont les observables à 1, 2... jusqu'à N corps. Nous commençons ici par les plus simples : les **observables à un corps**.

Définition

Les observables à un corp agissent dans $\mathcal{H}^{(N)}$. Il ne faut donc pas les confondre avec les observables à une particule qui agissent dans $\mathcal{H}^{(1)}$. Les observables à un corps agissent **indépendamment** sur chaque particule. Elles s'écrivent donc comme une somme sur chaque particule d'observables agissant dans l'espace $\mathcal{H}^{(1)}$ de la particule considérée

$$\hat{F} = \sum_{i=1}^N \hat{f}(i) \quad (36)$$

où $\hat{f}(i)$ agit dans l'espace $\mathcal{H}^{(1)}$ de la particule i .

Exemples

- Position du centre de masse : $\hat{\mathbf{R}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left(\hat{X}(i) \mathbf{e}_x + \hat{Y}(i) \mathbf{e}_y + \hat{Z}(i) \mathbf{e}_z \right) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \hat{\mathbf{r}}(i)$.
- Impulsion : $\hat{\mathbf{P}} = \sum_{i=1}^N \hat{\mathbf{p}}(i) = \sum_{i=1}^N (\hat{p}_x(i) \mathbf{e}_x + \hat{p}_y(i) \mathbf{e}_y + \hat{p}_z(i) \mathbf{e}_z)$.
- Énergie cinétique : $\hat{T} = \sum_{i=1}^N \frac{\hat{\mathbf{p}}(i)^2}{2m}$ où m est la masse d'une particule.
- Rayon carré moyen : $\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \hat{\mathbf{r}}(i)^2$.
- Moment cinétique orbital : $\hat{\mathbf{L}} = \sum_{i=1}^N \hat{\mathbf{p}}(i) \wedge \hat{\mathbf{r}}(i)$.

5.3 Valeur moyenne d'une observable à un corps

La valeur moyenne de \hat{F} sur un état $|\Psi\rangle$ quelconque (corrélé ou non) de $\mathcal{H}^{(N)}$ s'écrit

$$\langle \hat{F} \rangle_{\Psi} = \langle \Psi | \sum_{i=1}^N \hat{f}(i) | \Psi \rangle. \quad (37)$$

On insère la relation de fermeture dans $\mathcal{H}^{(N)}$ de l'équation (25) avant et après l'opérateur. En utilisant l'expression de la fonction d'onde à N nucléons $\Psi(\xi_1, \dots, \xi_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \langle \xi_1 \dots \xi_N | \Psi \rangle$, on obtient

$$\langle \hat{F} \rangle_{\Psi} = \frac{1}{N!} \int d\xi_1 \dots d\xi_N d\xi'_1 \dots d\xi'_N \Psi^*(\xi_1 \dots \xi_N) \sum_{i=1}^N \langle \xi_1 \dots \xi_N | \hat{f}(i) | \xi'_1 \dots \xi'_N \rangle \Psi(\xi'_1 \dots \xi'_N). \quad (38)$$

Or, l'action de $\hat{f}(i)$ sur un état de la base s'écrit¹⁷

$$\begin{aligned}
\hat{f}(i) |\xi_1 \dots \xi_N\rangle &= \hat{f}(i) \sqrt{N!} \hat{\mathcal{A}} |1 : \xi_1, \dots, N : \xi_N\rangle \\
&= \sqrt{N!} \hat{\mathcal{A}} \hat{f}(i) |1 : \xi_1, \dots, N : \xi_N\rangle \quad \text{car } [\hat{\mathcal{A}}, \hat{f}(i)] = 0 \quad \forall i \\
&= \sqrt{N!} \hat{\mathcal{A}} |1 : \xi_1, \dots, i : (\hat{f}\xi_i), \dots, N : \xi_N\rangle \quad \text{car } \hat{f}(i) \text{ n'agit que sur la particule } i \\
&= |\xi_1 \dots (\hat{f}\xi_i) \dots \xi_N\rangle.
\end{aligned} \tag{39}$$

D'autre part, en utilisant les résultats du paragraphe 3.3, on a

$$\begin{aligned}
\langle \xi_1 \dots \xi_N | \xi'_1 \dots (\hat{f}\xi'_i) \dots \xi'_N \rangle &= \begin{vmatrix} \langle \xi_1 | \xi'_1 \rangle & \dots & \langle \xi_1 | \hat{f} | \xi'_i \rangle & \dots & \langle \xi_1 | \xi'_N \rangle \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ \langle \xi_N | \xi'_1 \rangle & \dots & \langle \xi_N | \hat{f} | \xi'_i \rangle & \dots & \langle \xi_N | \xi'_N \rangle \end{vmatrix} \\
&= (-1)^{i+1} \sum_{j=1}^N (-1)^{j+1} \langle \xi_j | \hat{f} | \xi'_i \rangle \begin{vmatrix} \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \dots & \langle \xi_{j-1} | \xi'_{i-1} \rangle & \langle \xi_{j-1} | \xi'_{i+1} \rangle & \dots \\ \dots & \langle \xi_{j+1} | \xi'_{i-1} \rangle & \langle \xi_{j+1} | \xi'_{i+1} \rangle & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{vmatrix}
\end{aligned} \tag{40}$$

où on a fait "disparaître" la ligne j et la colonne i dans le déterminant. On en déduit

$$\langle \hat{F} \rangle_\Psi = \frac{1}{N!} \sum_{i,j=1}^N (-1)^{i+j} \int d\xi_1 \dots d\xi_N d\xi'_1 \dots d\xi'_N \Psi^*(\xi_1 \dots \xi_N) \langle \xi_j | \hat{f} | \xi'_i \rangle \Psi(\xi'_1 \dots \xi'_N) \begin{vmatrix} \dots & \dots \\ \dots & \dots \end{vmatrix} \tag{41}$$

or l'antisymétrie de Ψ implique un facteur $(-1)^{i-1}$ si on ramène la variable ξ'_i en première position

$$\Psi(\xi'_1 \dots \xi'_N) = (-1)^{i-1} \Psi(\xi'_i \xi'_1 \dots \xi'_{i-1} \xi'_{i+1} \dots \xi'_N), \tag{42}$$

de même pour Ψ^* avec la variable ξ_j . En procédant ainsi, on fait disparaître le facteur $(-1)^{i+j}$ dans l'expression de $\langle \hat{F} \rangle_\Psi$.

Renommons $\xi_j \rightarrow \xi$ et $\xi'_i \rightarrow \xi'$. On a aussi toujours le droit de changer le nom des variables muettes (celles qui sont à l'intérieur de l'intégrale) de telle sorte que ξ et ξ' remplacent ξ_1 et ξ'_1 dans chaque élément de la somme, c'est à dire

$$(\xi \xi_1 \dots \xi_{j-1} \xi_{j+1} \dots \xi_N) \rightarrow (\xi \xi_2 \dots \xi_N)$$

et

$$(\xi' \xi'_1 \dots \xi'_{i-1} \xi'_{i+1} \dots \xi'_N) \rightarrow (\xi' \xi'_2 \dots \xi'_N)$$

Ainsi, les indices i et j disparaissent et on a $\sum_{i,j=1}^N = N^2$. On obtient

$$\langle \hat{F} \rangle_\Psi = \frac{N^2}{N!} \int d\xi d\xi' d\xi_2 \dots d\xi_N d\xi'_2 \dots d\xi'_N \Psi^*(\xi \xi_2 \dots \xi_N) f(\xi \xi') \Psi(\xi' \xi'_2 \dots \xi'_N) \begin{vmatrix} \dots & \dots \\ \dots & \dots \end{vmatrix} \tag{43}$$

On peut se convaincre, en développant le déterminant qui ne contient que des éléments de type $\langle \xi | \xi' \rangle = \delta(\xi - \xi') \equiv \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta_{ss'} \delta_{qq'}$ et en utilisant l'antisymétrie de Ψ que les variables

¹⁷Rappelons la notation utilisée : les états $|\xi_1 \dots \xi_N\rangle$ sont antisymétrisés

$\xi_2 \dots \xi_N$ doivent être égales aux variables $\xi'_2 \dots \xi'_N$ et qu'un facteur $(N-1)!$ apparaît. On obtient finalement¹⁸

$$\langle \hat{F} \rangle_{\Psi} = N \int d\xi d\xi' d\xi_2 \dots d\xi_N \Psi^*(\xi \xi_2 \dots \xi_N) f(\xi \xi') \Psi(\xi' \xi'_2 \dots \xi'_N). \quad (44)$$

Exercice 16 :

Reprendre ce calcul de la valeur moyenne d'une observable à un corps dans le cas d'un état à deux nucléons.

5.4 Matrice densité à un corps

Les éléments de la **matrice densité à un corps** sont définis par

$$\rho(\xi \xi') = N \int d\xi_2 \dots \xi_N \Psi^*(\xi' \xi_2 \dots \xi_N) \Psi(\xi \xi_2 \dots \xi_N) \quad (45)$$

Elle permet de réécrire simplement la valeur moyenne d'une observable à un corp

$$\langle \hat{F} \rangle_{\Psi} = \int d\xi d\xi' f(\xi \xi') \rho(\xi' \xi) = \text{Tr}\{f\rho\} = \text{Tr}\{\rho f\}. \quad (46)$$

On dit que ρ contient **toute l'information à un corps** du système. C'est une partie de l'information contenue dans Ψ très utile puisqu'elle permet de calculer n'importe quelle valeur moyenne d'observable à un corps qui sont souvent les observables d'intérêt physique (position, taille, forme...). De plus, ρ est un objet mathématique beaucoup plus simple que Ψ puisqu'il s'agit d'une matrice.

Notons qu'il est souvent pratique d'écrire ρ comme un opérateur dans $\mathcal{H}^{(1)}$

$$\hat{\rho} = \int d\xi d\xi' \rho(\xi \xi') |\xi\rangle \langle \xi'|. \quad (47)$$

5.5 Observables à deux corps

Elles agissent sur chaque **couple** possible de nucléons numérotés (i, j) et s'écrivent¹⁹

$$\hat{F} = \sum_{i,j=1}^N \hat{f}(i, j) \quad (48)$$

où $\hat{f}(i, j)$ est un opérateur de $\mathcal{H}^{(2)}$ agissant sur les particules i et j . Par exemple, l'interaction nucléaire et donc le hamiltonien ont une composante à deux corps. L'opérateur \hat{f} est représenté dans la base $\{|\xi \xi'\rangle\}$ de $\mathcal{H}^{(2)}$ par $f(1, 2)$ où 1 et 2 indiquent les degrés de liberté

¹⁸Il n'aura échappé à personne que ce calcul est fastidieux et que le risque d'erreur est élevé. L'utilisation de la **seconde quantification**, hors programme, aurait été ici d'une grande utilité, rendant le calcul beaucoup plus direct.

¹⁹On prendra garde que cette notation implique un double comptage : la paire $(i, j) = (j, i)$ intervient deux fois dans la somme. C'est pourquoi on définit souvent un opérateur à deux corps par $\hat{F} = \sum_{i>j=1}^N \hat{f}(i, j) = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \hat{f}(i, j)$, comme pour l'interaction à deux corps (équation (90)).

des deux particules. Ses éléments s'écrivent en général en utilisant des états non antisymétrisés $f(\xi_1 \xi_2 \xi'_1 \xi'_2) = \langle 1 : \xi_1, 2 : \xi_2 | \hat{f}(1, 2) | 1 : \xi'_1, 2 : \xi'_2 \rangle$

On peut procéder comme précédemment pour calculer la valeur moyenne d'une observable à deux corps en introduisant la **matrice densité à deux corps** $\rho^{(2)} \equiv \rho(1, 2)$ telle que

$$\rho^{(2)}(\xi_1 \xi_2 \xi'_1 \xi'_2) = \frac{N(N-1)}{2} \int d\xi_3 \dots d\xi_N \Psi^*(\xi'_1 \xi'_2 \xi_3 \dots \xi_N) \Psi(\xi_1 \dots \xi_N). \quad (49)$$

La valeur moyenne de \hat{F} s'écrit alors

$$\langle \hat{F} \rangle_\Psi = \int d\xi_1 d\xi_2 d\xi'_1 d\xi'_2 \rho^{(2)}(\xi_1 \xi_2 \xi'_1 \xi'_2) f(\xi'_1 \xi'_2 \xi_1 \xi_2) = \text{Tr}_{12} \{ \rho(1, 2) f(1, 2) \}. \quad (50)$$

La trace est effectuée sur les degrés de liberté numérotés 1 et 2.

5.6 Généralisation à $M \leq N$ corps

$$\hat{F} = \sum_{i_1 < i_2 < \dots < i_M = 1}^N \hat{f}(i_1, i_2, \dots, i_M) \quad (51)$$

$$\begin{aligned} \langle \hat{F} \rangle &= \int d\xi_1 \dots \xi_M d\xi'_1 \dots d\xi'_M \rho^{(M)}(\xi_1 \dots \xi_M \xi'_1 \dots \xi'_M) f(\xi'_1 \dots \xi'_M \xi_1 \dots \xi_M) \\ &= \text{Tr}_{1 \dots M} \{ \rho(1, \dots, M) f(1, \dots, M) \}. \end{aligned} \quad (52)$$

Les éléments de $f(1, \dots, M)$ s'écrivent

$$f(\xi_1 \dots \xi_M \xi'_1 \dots \xi'_M) = \langle 1 : \xi_1, \dots, M : \xi_M | \hat{f}(1, \dots, M) | 1 : \xi'_1, \dots, \xi'_M \rangle \quad (53)$$

et ceux de la matrice densité à M corps $\rho^{(M)} \equiv \rho(1, \dots, M)$

$$\rho^{(M)}(\xi_1 \dots \xi_M \xi'_1 \dots \xi'_M) = \frac{N!}{M!(N-M)!} \int d\xi_{M+1} \dots d\xi_N \Psi^*(\xi'_1 \dots \xi'_M \xi_{M+1} \dots \xi_N) \Psi(\xi_1 \dots \xi_N). \quad (54)$$

5.7 Cas d'un état de particules indépendantes

Matrice densité à un corps

Les formules de calcul de valeurs moyennes de \hat{F} dans $\mathcal{H}^{(N)}$ sont valables pour n'importe quel état $|\Psi\rangle$ de $\mathcal{H}^{(N)}$, corrélé ou non. Dans le cas d'un déterminant de Slater $|\Phi\rangle$, les expressions des matrices densité prennent une forme simple. La démonstration "standard" utilise le théorème de Wick mais on peut aussi écrire explicitement les déterminants de Slater dans l'expression de ρ

$$\begin{aligned} \rho(\xi \xi') &= N \int d\xi_2 \dots d\xi_N \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \varphi_1^*(\xi') & \varphi_1^*(\xi_2) & \dots & \varphi_1^*(\xi_N) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \varphi_N^*(\xi') & \varphi_N^*(\xi_2) & \dots & \varphi_N^*(\xi_N) \end{vmatrix} \\ &\times \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \varphi_1(\xi) & \varphi_1(\xi_2) & \dots & \varphi_1(\xi_N) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \varphi_N(\xi) & \varphi_N(\xi_2) & \dots & \varphi_N(\xi_N) \end{vmatrix}. \end{aligned} \quad (55)$$

En développant les déterminants et en utilisant l'orthogonalité des φ , on obtient

$$\rho(\xi\xi') = \frac{N}{N!} \int d\xi_2 \dots d\xi_N \sum_{\text{permutation } \mathcal{P}} \hat{\mathcal{P}} \{ [\varphi_1^*(\xi') \varphi_1(\xi)] [\varphi_2^*(\xi_2) \varphi_2(\xi_2)] \dots [\varphi_N^*(\xi_N) \varphi_N(\xi_N)] \} \quad (56)$$

où les permutations \mathcal{P} sont faites sur les indices des produits $[\varphi^* \varphi]$. On peut sortir de l'intégrale les variables ξ et ξ' .

$$\begin{aligned} \rho(\xi\xi') &= \frac{N}{N!} \sum_{i=1}^N \varphi_i^*(\xi') \varphi_i(\xi) \\ &\times \int d\xi_2 \dots d\xi_N \sum_{\text{permutation } \mathcal{P}} \hat{\mathcal{P}} \{ \dots [\varphi_{i-1}^*(\xi_i) \varphi_{i-1}(\xi_i)] [\varphi_{i+1}^*(\xi_{i+1}) \varphi_{i+1}(\xi_{i+1})] \dots \} \end{aligned} \quad (57)$$

L'intégrale vaut $(N-1)!$ car les φ sont normés et il y a $(N-1)!$ permutations possibles. On obtient donc

$$\rho(\xi\xi') = \sum_{i=1}^N \varphi_i^*(\xi') \varphi_i(\xi) \quad (58)$$

On voit que dans le cas d'un état de particules indépendantes, la matrice densité à un corps prend une forme très simple.

Exercice 17 :

Reprendre ce calcul des éléments de la matrice densité à un corps dans le cas d'un état à deux nucléons indépendants.

Remarque :

Dans un calcul numérique, on a intérêt à suivre directement les N fonctions d'onde des états à une particule occupés plutôt que les éléments de ρ . Par exemple, pour décrire la collision $^{16}\text{O} + ^{208}\text{Pb}$ de la figure 7, il faut environ 250000 états dans la base $\{|\mathbf{r}sq\rangle\}$ en trois dimensions. En suivant les φ , on stocke ainsi $250000 \times (208 + 16)$ valeurs contre 250000^2 si on suit ρ .

Écrivons enfin l'opérateur dans $\mathcal{H}^{(1)}$ représenté par la matrice ρ

$$\hat{\rho} = \sum_{i=1}^N |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i| \quad (59)$$

où les $|\varphi_i\rangle$ sont les états occupés. On retrouve bien

$$\rho(\xi\xi') = \langle \xi | \hat{\rho} | \xi' \rangle = \sum_{i=1}^N \langle \xi | \varphi_i \rangle \langle \varphi_i | \xi' \rangle = \sum_{i=1}^N \varphi_i(\xi) \varphi_i^*(\xi'). \quad (60)$$

Valeur moyenne d'une observable à un corps

La valeur moyenne d'une observable à un corps dans un état de particules indépendantes $|\Phi\rangle$ s'écrit

$$\begin{aligned}
\langle \hat{F} \rangle_{\Phi} &= \text{Tr}\{\rho f\} = \sum_{i=1}^N \int d\xi d\xi' \langle \xi | \hat{f} | \xi' \rangle \langle \xi' | \varphi_i \rangle \langle \varphi_i | \xi \rangle \\
&= \sum_{i=1}^N \int d\xi d\xi' \langle \varphi_i | \xi \rangle \langle \xi | \hat{f} | \xi' \rangle \langle \xi' | \varphi_i \rangle = \sum_{i=1}^N \langle \varphi_i | \hat{f} | \varphi_i \rangle \\
&= \sum_{i=1}^N \langle \varphi_i | \hat{f} | \varphi_i \rangle.
\end{aligned} \tag{61}$$

Matrice densité à deux corps

On peut montrer avec le théorème de Wick que, pour des états de particules indépendantes, la matrice densité à deux corps s'écrit

$$\rho(1, 2) = \rho(1) \rho(2) (1 - P_{12}) \tag{62}$$

où $\rho(1)$ et $\rho(2)$ sont toutes deux la matrice densité à un corps du système, mais exprimées dans les espaces $\mathcal{H}^{(1)}$ associés aux degrés de liberté à une particule 1 et 2, tandis que P_{12} permute ces degrés de liberté. Ses éléments de matrice s'écrivent

$$\rho^{(2)}(\xi_1 \xi_2 \xi'_1 \xi'_2) = \rho^{(1)}(\xi_1 \xi'_1) \rho^{(1)}(\xi_2 \xi'_2) - \rho^{(1)}(\xi_1 \xi'_2) \rho^{(1)}(\xi_2 \xi'_1) \tag{63}$$

où on a noté $\rho^{(1)}$ la matrice densité à un corps pour éviter toute ambiguïté. On en déduit que la matrice densité à deux corps est entièrement déterminée par la matrice densité à un corps du système. Ceci est aussi vrai pour les matrices densité à M corps. Autrement dit, **toute l'information d'un état de particules indépendantes est contenue dans la matrice densité à un corps.**

5.8 Matrice des corrélations à deux corps

Dans le cas général (corrélé), la densité à deux corps comporte une partie triviale en fonction de $\rho^{(1)}$ et une partie non triviale

$$\rho^{(2)}(\xi_1 \xi_2 \xi'_1 \xi'_2) = \rho^{(1)}(\xi_1 \xi'_1) \rho^{(1)}(\xi_2 \xi'_2) - \rho^{(1)}(\xi_1 \xi'_2) \rho^{(1)}(\xi_2 \xi'_1) + C^{(2)}(\xi_1 \xi_2 \xi'_1 \xi'_2) \tag{64}$$

où $C^{(2)} \equiv C(1, 2)$ est la **matrice des corrélations à deux corps**. C'est la mesure de la déviation par rapport à une description en terme de particules indépendantes puisque dans ce cas, $C(1, 2) = 0$. On peut définir de même la matrice des corrélations à M corps.

6 La méthode Hartree-Fock en physique nucléaire

6.1 Introduction

On a vu comment décrire l'état quantique du noyau et comment calculer les quantités qui nous intéressent (valeurs moyennes d'observables) sur cet état. On a vu aussi que l'évolution de cet état est donné par l'équation de Schrödinger. Cependant, les nucléons du noyau sont corrélés, ce qui rend la résolution de l'équation de Schrödinger difficile. La technique choisie pour décrire le noyau est alors de se restreindre à une description en terme de particules indépendantes, tout en brisant un maximum de symétries pour inclure des corrélations. Le "niveau zéro" de cette approche est le *modèle à une particule* de Goeppert-Mayer et Jensen où l'interaction entre les nucléons est remplacée par un champ moyen de la forme d'un potentiel de Woods-Saxon. Une amélioration de ce modèle consiste à **optimiser** le champ moyen à l'aide d'un principe variationnel. Cela conduit à la théorie Hartree-Fock statique (HF) pour traiter la structure des noyaux ou à la théorie Hartree-Fock dépendant du temps (TDHF) pour étudier, par exemple, les vibrations des noyaux ou leurs collisions.

6.2 Principe variationnel de Ritz

Il part de la propriété

$$E = \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle \geq E_0 \quad (65)$$

où E_0 est l'énergie de l'état fondamental. Pour le montrer, décomposons le hamiltonien sur l'ensemble de ses états propres $\{|\nu\rangle\}$ qui forme une base de l'espace de Hilbert $\mathcal{H}^{(N)}$

$$\hat{H} |\nu\rangle = E_\nu |\nu\rangle \quad \Rightarrow \quad \hat{H} = \sum_{\nu} E_\nu |\nu\rangle \langle \nu|. \quad (66)$$

Par définition, on a $E_\nu \geq E_0$. Décomposons $|\Psi\rangle$ dans cette base

$$|\Psi\rangle = \sum_{\nu} C_\nu |\nu\rangle. \quad (67)$$

On a alors

$$E = \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle = \left(\sum_{\alpha} \langle \alpha | C_{\alpha}^* \right) \left(\sum_{\nu} E_\nu |\nu\rangle \langle \nu| \right) \left(\sum_{\beta} C_{\beta} |\beta\rangle \right). \quad (68)$$

Or $\langle \alpha | \beta \rangle = \delta_{\alpha\beta}$ et donc

$$E = \sum_{\nu} |C_\nu|^2 E_\nu \geq \sum_{\nu} |C_\nu|^2 E_0 = E_0 \quad (69)$$

car $|\Psi\rangle$ est normé et donc $\sum_{\nu} |C_\nu|^2 = 1$.

On a donc $E_0 = \min \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle$ à condition que $|\Psi\rangle$ puisse "varier" dans l'espace de Hilbert $\mathcal{H}^{(N)}$ complet. Si on se limite à un sous-espace $\{|\chi\rangle\}$ de $\mathcal{H}^{(N)}$ (par exemple le sous-espace des états de particules indépendantes), alors **la meilleure estimation de E_0 dans ce sous-espace est donnée par la valeur minimum de $\langle \chi | \hat{H} | \chi \rangle$** qui sera cependant toujours supérieure ou, au mieux, égale à E_0 .

6.3 Minimisation sous contrainte : la méthode de Lagrange

Soit une fonction $F(x_1 \dots x_N)$. En son minimum, toute variation infinitésimale δx_i autour de x_i laisse la valeur de F inchangée. Si les variables x_i peuvent varier indépendamment les unes des autres, c'est à dire si elles ne sont reliées par aucune contrainte, alors on peut écrire autour du minimum

$$\delta F = \sum_{i=1}^N \frac{\partial F}{\partial x_i} \delta x_i = 0. \quad (70)$$

Comme c'est vrai pour toute variation infinitésimale δx_i , cela implique

$$\frac{\partial F}{\partial x_i} = 0, \quad \forall i \in \{1 \dots N\}. \quad (71)$$

Si, par contre, les variables x_i sont reliées par une contrainte, c'est à dire, elles obéissent à une relation du type $G(x_1 \dots x_N) = 0$, on n'a alors plus cette propriété. On peut, dans ce cas, utiliser la méthode introduite par Lagrange qui consiste à remplacer F par $F - \lambda G$ où λ est un **paramètre** ou **multiplicateur de Lagrange**. On considère donc non plus $\delta F = 0$ mais $\delta(F - \lambda G) = 0$. Le multiplicateur de Lagrange est choisi de telle sorte qu'au point qui satisfait $\delta F = 0$, la contrainte $G = 0$ soit aussi satisfaite. S'il y a plusieurs contraintes²⁰, il est possible de mettre un multiplicateur par contrainte et de résoudre

$$\delta \left(F - \sum_k \lambda_k G_k \right) = 0. \quad (72)$$

6.4 Équations Hartree-Fock

Les équations Hartree-Fock (HF) s'obtiennent en minimisant E dans le sous-espace des états de particules indépendantes $\{|\Phi\rangle\}$. Au minimum²¹, la variation de E doit être nulle pour toute variation de $\text{Re}[\varphi_i(\xi)]$ et $\text{Im}[\varphi_i(\xi)]$. De manière équivalente, on peut considérer des variations de $\varphi_i(\xi)$ et $\varphi_i^*(\xi)$ indépendantes. Il faut alors "restaurer" a posteriori le fait que φ^* soit complexe conjugué de φ . De plus, il est nécessaire d'imposer des contraintes à l'aide de la méthode de Lagrange pour assurer l'orthonormalité des φ qui s'écrit

$$\int d\xi \varphi_i^*(\xi) \varphi_j(\xi) = \delta_{ij}. \quad (73)$$

Pour le moment, nous ne postulons pas de forme de \hat{H} . Aussi, $\langle \Phi | \hat{H} | \Phi \rangle$ est directement remplacé par une énergie $E[\rho]$ fonctionnelle de la densité à un corps. En effet, on a vu que pour un état de particules indépendantes, toute l'information est contenue dans la matrice densité à un corps (équation (58))

$$\rho(\xi\xi') = \sum_{i=1}^N \varphi_i^*(\xi') \varphi_i(\xi) \quad (74)$$

et il est donc normale que l'énergie s'écrive comme une fonctionnelle de ρ . Ici, les variables sont les $\varphi_i(\xi)$. La méthode décrite au chapitre 6.3 s'applique en remplaçant F par $E[\rho]$ et $G = 0$ par

²⁰Le nombre de contraintes doit cependant être inférieur au nombre de variables.

²¹En toute rigueur, il faut aussi vérifier qu'il s'agit d'un minimum, c'est à dire que les dérivées secondes sont positives, et aussi s'assurer que le minimum ne soit pas local en explorant tout l'espace variationnel.

les contraintes $\int d\xi \varphi_i^*(\xi) \varphi_j(\xi) - \delta_{ij} = 0$. Ces dernières ne sont nécessaires que pour les états occupés et sont donc au nombre de N^2 , chacune associée à un multiplicateur de Lagrange λ_{ij} . On a donc

$$\delta \left[E[\rho] - \sum_{ij=1}^N \lambda_{ij} \left(\int d\xi \varphi_i^*(\xi) \varphi_j(\xi) - \delta_{ij} \right) \right] = 0 \quad (75)$$

qui est équivalent au jeu de $2N$ équations

$$\left(\frac{\delta}{\delta \varphi_i^*(\xi)} [E[\rho] - \sum \dots] = 0 \quad , \quad \frac{\delta}{\delta \varphi_i(\xi)} [E[\rho] - \sum \dots] = 0 \right)_{i=1 \dots N}. \quad (76)$$

Variation par rapport à φ^*

Commençons par la variation par rapport à φ^* . Comme E dépend d'une infinité de variables $\rho(\xi\xi')$, la variation de E s'écrit comme une somme (continue) de dérivées de E par rapport à chacune de ces variables

$$\delta E[\rho] = \int d\xi d\xi' \frac{\delta E[\rho]}{\delta \rho(\xi\xi')} \delta \rho(\xi\xi'). \quad (77)$$

On a donc

$$\frac{\delta E[\rho]}{\delta \varphi_i^*(\xi)} = \int d\xi' d\xi'' \frac{\delta E[\rho]}{\delta \rho(\xi'\xi'')} \frac{\delta \rho(\xi'\xi'')}{\delta \varphi_i^*(\xi)}. \quad (78)$$

Définissons la quantité

$$h(\xi\xi') = \frac{\delta E[\rho]}{\delta \rho(\xi'\xi)} \quad (79)$$

dont on verra le sens physique plus tard. D'autre part,

$$\begin{aligned} \frac{\delta \rho(\xi'\xi'')}{\delta \varphi_i^*(\xi)} &= \frac{\delta}{\delta \varphi_i^*(\xi)} \sum_{j=1}^N \varphi_j^*(\xi'') \varphi_j(\xi') \\ &= \sum_{j=1}^N \left(\frac{\delta \varphi_j^*(\xi'')}{\delta \varphi_i^*(\xi)} \right) \varphi_j(\xi'). \end{aligned} \quad (80)$$

En effet, φ^* et φ étant considérées comme indépendantes, on a $\frac{\delta \varphi_j(\xi')}{\delta \varphi_i^*(\xi)} = 0$. De plus, si $i \neq j$ ou $\xi \neq \xi''$, alors $\varphi_j^*(\xi'')$ et $\varphi_i^*(\xi)$ sont deux variables différentes, ce qui se traduit par $\frac{\delta \varphi_j^*(\xi'')}{\delta \varphi_i^*(\xi)} = \delta(\xi - \xi'') \delta_{ij}$. On obtient donc

$$\frac{\delta E[\rho]}{\delta \varphi_i^*(\xi)} = \int d\xi' h(\xi\xi') \varphi_i(\xi'). \quad (81)$$

La variation de la contrainte par rapport à $\varphi_i^*(\xi)$ donne quant à elle

$$\begin{aligned} \frac{\delta}{\delta \varphi_i^*(\xi)} \sum_{jk=1}^N \lambda_{jk} \left(\int d\xi' \varphi_j^*(\xi') \varphi_k(\xi') - \delta_{jk} \right) &= \sum_{jk=1}^N \lambda_{jk} \int d\xi' \left(\frac{\delta \varphi_j^*(\xi')}{\delta \varphi_i^*(\xi)} \right) \varphi_k(\xi') \\ &= \sum_{k=1}^N \lambda_{ik} \varphi_k(\xi). \end{aligned} \quad (82)$$

En conclusion, la variation par rapport à $\varphi_i^*(\xi)$ donne les équations

$$\int d\xi' h(\xi\xi') \varphi_i(\xi') - \sum_{j=1}^N \lambda_{ij} \varphi_j(\xi) = 0. \quad (83)$$

Variation par rapport à φ

La variation sur $\varphi_i(\xi)$ donne, de manière équivalente,

$$\int d\xi' \varphi_i^*(\xi') h(\xi'\xi) - \sum_{j=1}^N \varphi_j^*(\xi) \lambda_{ji} = 0. \quad (84)$$

On veut tout d'abord restaurer la propriété φ^* *complexe conjugué* de φ . Cette propriété assure notamment l'hermiticité de ρ , c'est à dire $\rho(\xi\xi') = \rho^*(\xi'\xi)$. Elle assure aussi que l'énergie E soit réelle et que h soit hermitienne. En prenant le complexe conjugué de l'équation (84), on obtient

$$\int d\xi' h(\xi\xi') \varphi_i(\xi') - \sum_{j=1}^N \lambda_{ji}^* \varphi_j(\xi) = 0, \quad (85)$$

c'est à dire l'équation (83) à condition de choisir la matrice λ hermitienne ($\lambda_{ij} = \lambda_{ji}^*$). Ce choix nous permet ainsi de nous limiter aux N équations (83) qui constituent un jeu fermé d'équations. En effet, λ ne couple pas les états φ occupés aux états inoccupés.

Réduction des multiplicateurs de Lagrange

Toutes les combinaisons linéaires des φ_i qui donnent la même matrice densité à un corps (et qui décrivent donc le même état physique puisque toute l'information sur le système de particules indépendantes est contenu dans ρ) vont être solution de (83). En particulier, on peut choisir la combinaison linéaire qui diagonalise λ , c'est à dire telle que $\lambda_{ij} = e_i \delta_{ij}$ où les e_i doivent être réels pour assurer l'hermiticité de λ . On obtient ainsi les équations HF statiques

$$\int d\xi' h(\xi\xi') \varphi_i(\xi') = e_i \varphi_i(\xi) \quad (86)$$

ou, sous forme matricielle,

$$h \varphi_i = e_i \varphi_i. \quad (87)$$

Cette équation *ressemble* à une équation aux valeurs propres²² de h . La matrice h est appelée **hamiltonien à une particule de Hartree-Fock**. Les multiplicateurs de Lagrange e_i s'interprètent comme des **énergies des états à une particule** solutions des équations HF.

6.5 hamiltonien Hartree-Fock

Valeur moyenne de \hat{H}

Dans la théorie Hartree-Fock originale, on est supposé connaître le hamiltonien \hat{H} du système et on calcule h à partir de l'équation (79) en prenant $E[\rho] = \langle \Phi | \hat{H} | \Phi \rangle$. C'est notamment comme cela qu'on résout le problème HF en physique atomique. Le hamiltonien se décompose en un

²²On verra plus loin que les équations HF ne constituent en fait pas un problème aux valeurs propres.

terme cinétique et d'interaction à deux corps²³

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} \quad (88)$$

$$\hat{T} = \sum_{i=1}^N \hat{t}(i) \quad \text{où } \hat{t} = \frac{\hat{p}^2}{2m} \quad (89)$$

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^N \hat{v}(i, j) \quad (90)$$

Les valeurs moyennes de \hat{T} et \hat{V} sur l'état de particules indépendantes $|\Phi\rangle$ s'écrivent, d'après les équations (46) et (50)²⁴

$$\begin{aligned} \langle \hat{T} \rangle_{\Phi} &= \text{Tr}_1 \{ \rho(1) t(1) \} \\ &= \int d\xi d\xi' \rho(\xi\xi') t(\xi'\xi) \end{aligned} \quad (91)$$

$$\begin{aligned} \langle \hat{V} \rangle_{\Phi} &= \frac{1}{2} \text{Tr}_{12} \{ \rho(1, 2) v(1, 2) \} \\ &= \frac{1}{2} \text{Tr}_{12} \{ \rho(1) \rho(2) (1 - P_{12}) v(1, 2) \} \\ &= \frac{1}{2} \text{Tr}_{12} \{ \rho(1) \rho(2) \bar{v}(1, 2) \} \\ &= \frac{1}{2} \int d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 d\xi_4 \rho(\xi_1 \xi_2) \rho(\xi_3 \xi_4) \bar{v}(\xi_2 \xi_4 \xi_1 \xi_3) \end{aligned} \quad (92)$$

où on a défini les éléments de matrice de l'interaction antisymétrisés²⁵ $\bar{v}(\xi_1 \xi_2 \xi_3 \xi_4) = v(\xi_1 \xi_2 \xi_3 \xi_4) - v(\xi_1 \xi_2 \xi_4 \xi_3)$. On a aussi utilisé la matrice densité à deux corps dans le cas particulier d'un état de particules indépendantes $\rho^{(2)} \equiv \rho(1, 2) = \rho(1) \rho(2) (1 - P_{12})$ (équation (62)) pour calculer la valeur moyenne de \hat{V} (voir les chapitres 5.5 et 5.7).

Champ moyen

On a vu que la dérivée fonctionnelle de l'énergie donne le hamiltonien à une particule de Hartree-Fock

$$h(\xi, \xi') = \frac{\delta E}{\delta \rho(\xi' \xi)} = \frac{\delta \langle \hat{H} \rangle_{\Phi}}{\delta \rho(\xi' \xi)} = \frac{\delta \langle \hat{T} \rangle_{\Phi}}{\delta \rho(\xi' \xi)} + \frac{\delta \langle \hat{V} \rangle_{\Phi}}{\delta \rho(\xi' \xi)}. \quad (93)$$

En utilisant les valeurs moyennes de \hat{T} et de \hat{V} sur un état de particules indépendantes $|\Phi\rangle$ (équations (91) et 92)), on obtient

$$\frac{\delta \langle \hat{T} \rangle_{\Phi}}{\delta \rho(\xi' \xi)} = t(\xi \xi') \quad (94)$$

$$\begin{aligned} \frac{\delta \langle \hat{V} \rangle_{\Phi}}{\delta \rho(\xi' \xi)} &= \frac{1}{2} \left[\int d\xi_3 d\xi_4 \rho(\xi_3 \xi_4) \bar{v}(\xi \xi_4 \xi' \xi_3) + \int d\xi_1 d\xi_2 \rho(\xi_1 \xi_2) \bar{v}(\xi_2 \xi \xi_1 \xi') \right] \\ &= \int d\xi_1 d\xi_2 \rho(\xi_1 \xi_2) \bar{v}(\xi \xi_2 \xi' \xi_1) \\ &= U(\xi \xi') \end{aligned} \quad (95)$$

²³Pour simplifier, on néglige l'interaction à trois corps, même si celle-ci joue un rôle en physique nucléaire.

²⁴On prendra garde au facteur 1/2 présent dans la définition (90) de \hat{V} et pas dans l'équation (48).

²⁵On rappelle que $v(\xi_1 \xi_2 \xi_3 \xi_4) = \langle 1 : \xi_1, 2 : \xi_2 | \hat{v}(1, 2) | 1 : \xi_3, 2 : \xi_4 \rangle$.

où on a utilisé $\bar{v}(\xi_1\xi_2\xi_3\xi_4) = \bar{v}(\xi_2\xi_1\xi_4\xi_3)$. La matrice U est un potentiel à une particule appelé **champ moyen Hartree-Fock**. On peut aussi l'écrire

$$U(1) = \text{Tr}_2\{ \rho(2) \bar{v}(1, 2) \} \quad (96)$$

où la trace est une **trace partielle** puisqu'elle est effectuée sur les degrés de liberté à une particule numérotés 2 uniquement.

On voit que le champ moyen Hartree-Fock dépend de la densité du système. On dit qu'il est **auto-cohérent**. C'est le champ moyen dans lequel "baignent" les nucléons. Il se comporte comme un potentiel extérieur pour chacun des nucléons. Il simule "en moyenne" toutes les interactions d'un nucléon avec les autres nucléons du noyau. On peut montrer que le champ moyen HF est le meilleur champ moyen possible pour décrire le système. Si on remplace U par un potentiel de Woods-Saxon, abandonnant ainsi l'auto-cohérence, on retrouve alors le modèle à une particule de Goepfert-Mayer et Jensen.

Remarque :

L'équation HF n'est pas une équation aux valeurs propres de h car celui-ci dépend de ρ et donc de la solution ($h \equiv h[\rho]$). L'équation HF est donc non linéaire, contrairement à l'équation de Schrödinger. Cette non linéarité complique la résolution pratique du problème HF, mais c'est le prix à payer pour avoir simplifier le problème en décrivant le système à l'aide d'un état de particules indépendantes.

Forme de Liouville de l'équation HF

Le hamiltonien à une particule de Hartree-Fock h est une matrice écrite dans une base de degrés de liberté à une particule, par exemple $\{|\mathbf{r}sq\rangle\}$. On peut considérer qu'elle représente un opérateur \hat{h} agissant dans l'espace de Hilbert $\mathcal{H}^{(1)}$ tel que

$$h(\xi, \xi') = \langle \xi | \hat{h} | \xi' \rangle. \quad (97)$$

On peut alors écrire \hat{h} dans la base $\{|\mathbf{r}sq\rangle\} \equiv \{|\xi\rangle\}$ de $\mathcal{H}^{(1)}$

$$\hat{h} = \int d\xi d\xi' h(\xi, \xi') |\xi\rangle \langle \xi'|. \quad (98)$$

Les équations HF peuvent ainsi s'écrire dans $\mathcal{H}^{(1)}$

$$\hat{h} |\varphi_i\rangle = e_i |\varphi_i\rangle \quad (99)$$

où $i \in \{1 \dots N\}$ et $|\varphi_i\rangle$ décrit un état à un nucléon occupé. En multipliant l'équation (99) par $\langle \varphi_i |$ à droite, en sommant sur les états occupés et en rappelant l'expression de l'opérateur associé à la matrice densité à un corps dans $\mathcal{H}^{(1)}$: $\hat{\rho} = \sum_{i=1}^N |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i|$ (équation (59)), on obtient

$$\sum_{i=1}^N \hat{h} |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i| = \hat{h} \hat{\rho} = \sum_{i=1}^N e_i |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i|. \quad (100)$$

En partant de l'équation hermitique conjuguée de (99), en multipliant par $|\varphi_i\rangle$ à gauche et en sommant sur les états occupés, on obtient de même

$$\hat{\rho} \hat{h} = \sum_{i=1}^N e_i |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i| \quad (101)$$

où on a utiliser le fait que \hat{h} est un opérateur hermitique ($\hat{h}^\dagger = \hat{h}$ et ses valeurs propres e_i sont réelles). En retranchant l'équation (101) à l'équation (100), on obtient

$$\hat{h} \hat{\rho} - \hat{\rho} \hat{h} = [\hat{h}, \hat{\rho}] = 0. \quad (102)$$

C'est la forme de Liouville des équations HF.

Énergie HF

Partons de l'expression de la valeur moyenne de \hat{H} sur un état de particules indépendantes

$$\langle \Phi | \hat{H} | \Phi \rangle = \text{Tr}_1 \{ \rho(1) t(1) \} + \frac{1}{2} \text{Tr}_{12} \{ \rho(1) \rho(2) \bar{v}(1, 2) \}. \quad (103)$$

Le terme d'interaction peut se réécrire en faisant intervenir le champ moyen puisque

$$\begin{aligned} \text{Tr}_{12} \{ \rho(1) \rho(2) \bar{v}(1, 2) \} &= \text{Tr}_1 \{ \rho(1) \text{Tr}_2 [\rho(2) \bar{v}(1, 2)] \} \\ &= \text{Tr}_1 \{ \rho(1) U(1) \}. \end{aligned} \quad (104)$$

On écrit alors l'énergie HF comme la valeur moyenne d'opérateurs à un corps

$$\begin{aligned} \langle \hat{H} \rangle_\Phi &= \text{Tr}_1 \{ \rho(1) t(1) \} + \frac{1}{2} \text{Tr}_1 \{ \rho(1) U(1) \} \\ &= \sum_{i=1}^N \langle \varphi_i | \left(\hat{t} + \frac{1}{2} \hat{U} \right) | \varphi_i \rangle \end{aligned} \quad (105)$$

où $\hat{U} = \int d\xi d\xi' U(\xi\xi') |\xi\rangle \langle \xi'|$ est l'opérateur de champ moyen HF, représenté par U , et agissant dans $\mathcal{H}^{(1)}$.

D'autre part, les états à une particule $|\varphi_i\rangle$ sont états propres de \hat{h} (cf. équation (99))

$$\hat{h} |\varphi_i\rangle = (\hat{t} + \hat{U}) |\varphi_i\rangle = e_i |\varphi_i\rangle. \quad (106)$$

On en déduit donc l'expression de l'énergie HF en fonction des énergies à une particule e_i

$$\langle \hat{H} \rangle_\Phi = \sum_{i=1}^N \langle \varphi_i | \left(\hat{t} + \hat{U} - \frac{1}{2} \hat{U} \right) | \varphi_i \rangle = \sum_{i=1}^N e_i - \frac{1}{2} \langle \sum_{i=1}^N \hat{U}(i) \rangle_\Phi \quad (107)$$

On remarque que **l'énergie HF n'est pas la somme des énergies à une particule**, contrairement à ce que l'on aurait dans le modèle de Goeppert-Mayer et Jensen. Cela vient de l'auto-cohérence du champ $U \equiv U[\rho]$. C'est donc une manifestation de la non linéarité des équations HF. Cela traduit aussi le fait que la théorie HF n'est pas vraiment un modèle de particules indépendantes (bien que l'état soit décrit par un déterminant de Slater) et qu'une partie des corrélations est incluse dans l'auto-cohérence du champ.

6.6 Le problème du cœur dure en physique nucléaire

Interaction nue

Jusqu'à présent, nous n'avons pas spécifié quelle était l'interaction entre les nucléons. Son étude nécessite un cours entier et ce n'est pas notre but ici de l'aborder en détail. En effet, cette

interaction est complexe comparée à l'interaction coulombienne entre électrons par exemple. Elle dépend notamment des spin, isospin et moment orbital relatifs entre les nucléons. De plus, il a été montré récemment qu'elle comportait une composante à trois corps importante (l'interaction de trois nucléons n'est pas juste la somme des interactions associées à chacune des paires de nucléons).

Une caractéristique de l'interaction nucléaire nous intéresse cependant. Il s'agit de sa forte répulsion à courte distance. On parle notamment d'un **cœur dur** traduit par un potentiel infini lorsque la distance entre deux nucléons est inférieure à $r_c \sim 0.5$ fm. La figure 18 donne un exemple de potentiel entre un proton et un neutron de même spin (cas du deuton) illustrant la forte répulsion entre les nucléons à courte portée.

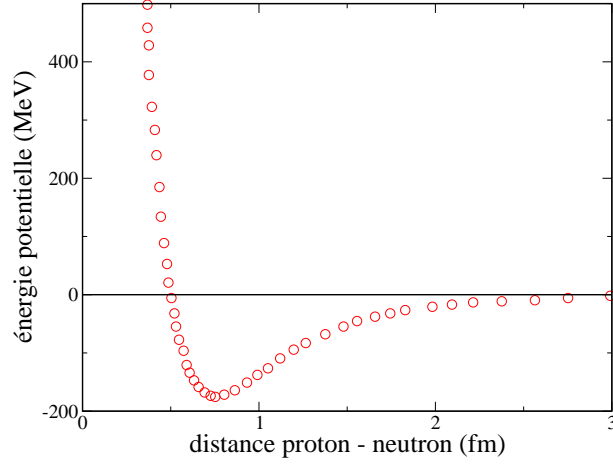


FIGURE 18 – Exemple d'énergie potentielle d'interaction entre un proton et un neutron de même spin.

Divergence du champ moyen HF

La présence d'un cœur dur dans l'interaction entre nucléons fait diverger le champ moyen HF et rend cette théorie inapplicable en physique nucléaire avec la force nue. On rappelle tout d'abord l'expression du champ moyen

$$U(\xi, \xi') = \int d\xi_1 d\xi_2 \rho(\xi_1 \xi_2) \bar{v}(\xi \xi_2 \xi' \xi_1). \quad (108)$$

Prenons juste le terme direct de \bar{v} (ce qui revient à supposer les particules discernables), oublions le spin et l'isospin et supposons que v ne dépende que de la distance relative entre les nucléons. On a alors

$$\begin{aligned} U(\mathbf{r}\mathbf{r}') &= \int d^3r_1 d^3r_2 \rho(\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2) \langle 1 : \mathbf{r}, 2 : \mathbf{r}_1 | v(|\hat{\mathbf{r}}(1) - \hat{\mathbf{r}}(2)|) | 1 : \mathbf{r}', 2 : \mathbf{r}_2 \rangle \\ &= \int d^3r_1 d^3r_2 \rho(\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) v(|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|) \\ &= \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \int d^3r_1 \rho(\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_1) v(|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|). \end{aligned} \quad (109)$$

En notant $\rho(\mathbf{r}) \equiv \rho(\mathbf{r}\mathbf{r})$ la partie diagonale de la matrice densité à un corps, qui n'est autre que la densité de nucléons au point \mathbf{r} , et en remarquant que seule la partie diagonale du champ moyen $U(\mathbf{r}) \equiv U(\mathbf{r}\mathbf{r})$ est non nulle, on obtient

$$U(\mathbf{r}) = \int d^3r' \rho(\mathbf{r}') v(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|). \quad (110)$$

En particulier, au centre du noyau, on a

$$U(\vec{0}) = \int d^3r \rho(\mathbf{r}) v(r). \quad (111)$$

Si on considère un cœur dur tel que $v(r < r_c) \rightarrow \infty$, alors²⁶

$$U(\vec{0}) = \int_0^{r_c} d^3r \rho(\mathbf{r}) \infty + \int_{r_c}^{\infty} d^3r \rho(\mathbf{r}) v(r). \quad (112)$$

Le premier terme du membre de droite est infini car la densité est non nulle au centre du noyau (c'est du moins ce qu'on observe expérimentalement, voire figures 3 et 4).

En conclusion, la théorie HF ne s'applique pas avec l'interaction nue de la physique nucléaire puisque le cœur dur fait diverger le champ moyen.

Discussion sur le cœur dur

On voit que la présence du cœur dur induit des corrélations dans l'état $|\Psi\rangle$ car $\langle\Psi|\hat{V}|\Psi\rangle$ est finie (puisque les noyaux existent...) alors que pour un état de particules indépendantes $|\Phi\rangle$, $\langle\Phi|\hat{V}|\Phi\rangle$ diverge. Cela montre que ces corrélations ne peuvent pas être traitées par la méthode des brisures de symétries d'un état de particules indépendantes. Cela dit, on veut garder pour objectif de trouver un champ moyen optimal car on sait qu'un modèle de particules indépendantes comme celui de Goeppert-Mayer et Jensen décrit assez bien les noyaux. Cela implique juste qu'on ne l'obtiendra pas avec la méthode de Hartree-Fock standard, c'est à dire avec l'interaction nue.

Avant d'aller plus loin, étudions donc l'effet du cœur dur. Au cœur d'un noyau, la densité de nucléons est de l'ordre de $\rho_0 \sim 0.17 \text{ fm}^{-3}$. Chaque nucléon occupe en moyenne un volume $v_n \sim 1/0.17 = 6 \text{ fm}^3 = \frac{4}{3}\pi R^3$. La distance moyenne entre deux nucléons voisins est donc de l'ordre de $D = 2R = 2\sqrt[3]{\frac{3v_n}{4\pi}} = 2.25 \text{ fm}$, ce qui est bien supérieur à la distance du cœur dur ($r_c \sim 0.5 \text{ fm}$). C'est le principe de Pauli qui impose une distance aussi élevée. Un nucléon ressent donc essentiellement la somme des interactions à longue portée avec les autres nucléons, responsable de la présence d'un champ moyen.

En fait, les nucléons ressentent "rarement" le cœur dur d'un autre nucléon car leur libre parcours moyen (distance moyenne parcourue entre deux collisions) est de l'ordre de la taille du noyau, toujours à cause du principe de Pauli. Cependant, bien que rares, les collisions avec le cœur dur surviennent avec violence, ce qui impose de les inclure d'une manière ou d'une autre dans notre description du noyau. En effet, elles sont responsables de certaines corrélations dites "à courte portée".

²⁶On n'attendra aucune rigueur mathématique dans les notations!

6.7 Approche de Brueckner

En 1955, Brueckner propose une méthode qui permet de continuer à traiter le noyau à l'aide d'un état de particules indépendantes $|\Phi\rangle$. Puisqu'on ne peut y inclure les corrélations à courte portée, il décide de les inclure dans l'interaction elle-même, qui devient ainsi une **interaction effective**

$$\hat{G} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^N \hat{g}(i, j). \quad (113)$$

Il impose que l'action de \hat{G} sur $|\Phi\rangle$ donne le même état que celle de \hat{V} sur l'état corrélé $|\Psi\rangle$

$$\hat{V} |\Psi\rangle = \hat{G} |\Phi\rangle. \quad (114)$$

L'opérateur \hat{G} peut s'obtenir à l'aide de la théorie de Brueckner²⁷. On peut montrer que \hat{G} dépend de l'état de particules indépendantes sur lequel il s'applique, et donc de la matrice densité à un corps qui lui est associée. On peut aussi montrer que l'énergie totale de l'état fondamental corrélé s'écrit

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle &= \langle \Phi | \hat{T} | \Phi \rangle + \langle \Phi | \hat{G} | \Phi \rangle \\ &= \text{Tr}_1 \{ \rho(1) t(1) \} + \frac{1}{2} \text{Tr}_{12} \{ \rho(1) \rho(2) \bar{g}(1, 2) \} \end{aligned} \quad (115)$$

où \bar{g} est l'interaction effective antisymétrisée. On remarque que cette expression est de la même forme que celle de l'énergie HF (équation (103)), ce à quoi on pouvait s'attendre puisque $|\Phi\rangle$ est un état de particules indépendantes. Une première différence est qu'à gauche de l'équation (115), c'est l'état corrélé qui apparaît et non un état de particules indépendantes. En principe, on a alors accès à l'énergie exacte de l'état fondamental. Une seconde différence tient au fait que l'interaction nue v a été remplacée par l'interaction effective g . Cela montre que, dans le cas d'une interaction avec un cœur dur, la théorie Hartree-Fock doit être appliquée, non pas avec l'interaction nue puisque le champ diverge, mais avec l'interaction effective calculée par la théorie de Brueckner et qui incorpore notamment les corrélations à courtes portées.

Cette théorie est appelée la théorie Brueckner-Hartree-Fock. Elle se propose de déterminer simultanément $|\Phi\rangle$ et \hat{G} . Elle est cependant très lourde à mettre en place et ses applications se limitent à des calculs de matière nucléaire infinie, plus aisés à mettre en œuvre que des calculs de systèmes finis comme les noyaux.

6.8 Interactions effectives phénoménologiques

Généralités

Ce sont des interactions "inspirées" de la forme de \hat{G} , et qui ne comportent pas de cœur dur. En particulier, elles dépendent de la densité. En effet, on a vu que \hat{G} dépendait de la matrice densité à un corps associée à l'état $|\Phi\rangle$. Comme les interactions effectives sont destinées à des calculs Hartree-Fock, c'est à dire avec des états de particules indépendantes, elles n'ont de sens que par l'**énergie fonctionnelle de la densité à un corps** $E[\rho]$ qu'elles induisent. C'est d'ailleurs cette fonctionnelle et non l'interaction effective qui est ajustée de manière à reproduire certaines propriétés des systèmes nucléaires, comme la densité de saturation ($\rho_0 \sim 0.17 \text{ fm}^{-3}$) et l'énergie de liaison (nucléaire) par nucléon ($E/A \sim 16 \text{ MeV}$) de la matière nucléaire infinie.

²⁷Hors programme.

Deux formes d'interactions effectives phénoménologiques sont principalement utilisées : l'interaction de **Skyrme** et celle de **Gogny**. La première est de portée nulle car tous ses termes sont proportionnels à $\delta(\hat{\mathbf{r}}(1) - \hat{\mathbf{r}}(2))$. C'est une **interaction de contact**, les nucléons n'interagissent que lorsqu'ils sont au même point. Le fait que l'interaction de Skyrme soit de portée nulle simplifie grandement les calculs numériques et permet notamment de développer les fonctions d'ondes sur des réseaux cartésiens. L'interaction de Gogny, quant à elle, comporte certains termes de portée finie proportionnels à des gaussiennes du type $\exp[-(\hat{\mathbf{r}}(1) - \hat{\mathbf{r}}(2))^2/\mu^2]$. Elle est particulièrement utile avec des bases d'états de l'oscillateur harmonique.

Ces deux interactions permettent une description correcte de tous les noyaux, des légers aux super-lourds. Elles donnent notamment accès à leur énergie de liaison et à leur déformations. Les courbes des figures 3 et 4 ont été obtenues avec des calculs Hartree-Fock utilisant de telles forces effectives phénoménologiques. On voit qu'ils reproduisent très bien les densités de protons obtenues expérimentalement par diffusion d'électron.

Interaction de Skyrme simplifiée

Considérons à titre d'exemple une interaction de Skyrme simplifiée du type

$$\hat{G} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1} t_0 \delta(\hat{\mathbf{r}}(i) - \hat{\mathbf{r}}(j)) + \frac{1}{6} \sum_{i \neq j \neq k=1} t_3 \delta(\hat{\mathbf{r}}(i) - \hat{\mathbf{r}}(j)) \delta(\hat{\mathbf{r}}(j) - \hat{\mathbf{r}}(k)). \quad (116)$$

Le premier terme (t_0) décrit l'attraction entre deux nucléons au même point (donc $t_0 < 0$). Le deuxième terme décrit la répulsion occasionnée par la présence d'un troisième nucléon en ce point (donc $t_3 > 0$). Ce dernier est nécessaire pour éviter que les nucléons ne s'agrègent en un seul point. C'est ce qu'on appelle la **saturation de la matière nucléaire** qui est responsable notamment d'une densité à peu près constante (voisine de $\rho_0 = 0.17 \text{ fm}^{-3}$) à l'intérieur des noyaux.

On peut montrer que ce deuxième terme est équivalent à une **interaction à deux corps dépendante de la densité**. Dans ce cas, l'interaction de Skyrme simplifiée s'écrit

$$\hat{G} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1} \left(t_0 + \frac{1}{6} t_3 \rho(\hat{\mathbf{R}}_{12}) (1 + \hat{P}_{\sigma_{12}}) \right) \delta(\hat{\mathbf{r}}(i) - \hat{\mathbf{r}}(j)) \quad (117)$$

où $\hat{\mathbf{R}}_{12} = \frac{\hat{\mathbf{r}}(1) + \hat{\mathbf{r}}(2)}{2}$ et $\hat{P}_{\sigma_{12}}$ échange les spins des deux particules. Ici, $\rho(\mathbf{r})$ est la densité de particule au point \mathbf{r} . Elle est reliée à la matrice densité à un corps $\rho(\mathbf{r}sq \mathbf{r}'s'q')$ en utilisant les notations standard par

$$\rho(\mathbf{r}) \equiv \sum_{sq} \rho(\mathbf{r}sq \mathbf{r}sq) \equiv \sum_{sq} \rho_{sq}(\mathbf{r}) = \sum_q \rho_q(\mathbf{r}) = \sum_s \rho_s(\mathbf{r}) \quad (118)$$

où $\rho_{sq}(\mathbf{r})$ est la densité de nucléons de spin s et d'isospin q au point \mathbf{r} tandis que $\rho_s(\mathbf{r})$ est celle de spin s et $\rho_q(\mathbf{r})$ celle d'isospin q uniquement.

Pour déterminer le champ moyen HF avec une telle interaction, on ne peut pas identifier directement $U(1)$ à $\text{Tr}_2(\rho(2)\bar{g}(1,2))$ comme démontré au chapitre 6.5 (équation (96)) car l'interaction deffective dépend maintenant de la densité elle-même. Il faut donc repartir de la définition plus générale de h comme la dérivée fonctionnelle de E par rapport à ρ (équation (79)), et donc

$$U(\xi\xi') = \frac{\delta \langle \hat{G} \rangle_{\Phi}}{\delta \rho(\xi'\xi)} \quad (119)$$

On doit ainsi commencer par calculer la valeur moyenne de l'énergie d'interaction $\langle \hat{G} \rangle_\Phi$ dans l'état de particules indépendantes $|\Phi\rangle$

$$\begin{aligned}
\langle \hat{G} \rangle_\Phi &= \text{Tr}_{12} \left[\frac{1}{2} \rho(1) \rho(2) (1 - P_{12}) g(1, 2) \right] \\
&= \frac{1}{2} \int d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_4 \sum_{s_1 \dots s_4 q_1 \dots q_4} \rho(\mathbf{r}_1 s_1 q_1 \mathbf{r}_2 s_2 q_2) \rho(\mathbf{r}_3 s_3 q_3 \mathbf{r}_4 s_4 q_4) \\
&\quad \times \langle 1 : \mathbf{r}_2 s_2 q_2, 2 : \mathbf{r}_4 s_4 q_4 | \left[t_0 + \frac{t_3}{6} \rho(\hat{\mathbf{R}}_{12}) (1 + \hat{P}_{\sigma_{12}}) \right] \delta(\hat{\mathbf{r}}(1) - \hat{\mathbf{r}}(2)) \\
&\quad (1 - \hat{P}_{12}) | 1 : \mathbf{r}_1 s_1 q_1, 2 : \mathbf{r}_3 s_3 q_3 \rangle. \tag{120}
\end{aligned}$$

$|1 : \xi, 2 : \xi'\rangle$ est état propre de $\delta(\hat{\mathbf{r}}(1) - \hat{\mathbf{r}}(2))$ et de $\hat{\mathbf{R}}_{12}$. On a donc

$$\rho(\hat{\mathbf{R}}_{12}) \delta(\hat{\mathbf{r}}(1) - \hat{\mathbf{r}}(2)) |1 : \mathbf{r}_1 s_1 q_1, 2 : \mathbf{r}_2 s_2 q_2\rangle = \rho(\mathbf{r}_1) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) |1 : \mathbf{r}_1 s_1 q_1, 2 : \mathbf{r}_2 s_2 q_2\rangle. \tag{121}$$

D'autre part, on rappelle que $\hat{P}_{12} |1 : \xi, 2 : \xi'\rangle = |1 : \xi', 2 : \xi\rangle$. On en déduit

$$\begin{aligned}
&\left[t_0 + \frac{t_3}{6} \rho(\hat{\mathbf{R}}_{12}) (1 + \hat{P}_{\sigma_{12}}) \right] \delta(\hat{\mathbf{r}}(1) - \hat{\mathbf{r}}(2)) (1 - \hat{P}_{12}) |1 : \mathbf{r}_1 s_1 q_1, 2 : \mathbf{r}_3 s_3 q_3\rangle \\
&= \left[t_0 + \frac{t_3}{6} \rho(\mathbf{r}_1) (1 + \hat{P}_{\sigma_{12}}) \right] \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3) (|1 : \mathbf{r}_1 s_1 q_1, 2 : \mathbf{r}_3 s_3 q_3\rangle - |1 : \mathbf{r}_3 s_3 q_3, 2 : \mathbf{r}_1 s_1 q_1\rangle). \tag{122}
\end{aligned}$$

L'opérateur $\hat{P}_{\sigma_{12}}$ échange les spins

$$\hat{P}_{\sigma_{12}} |1 : \mathbf{r}_1 s_1 q_1, 2 : \mathbf{r}_2 s_2 q_2\rangle = |1 : \mathbf{r}_1 s_2 q_1, 2 : \mathbf{r}_2 s_1 q_2\rangle. \tag{123}$$

Enfin, on rappelle que

$$\langle 1 : \mathbf{r}_1 s_1 q_1, 2 : \mathbf{r}_2 s_2 q_2 | 1 : \mathbf{r}_3 s_3 q_3, 2 : \mathbf{r}_4 s_4 q_4 \rangle = \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3) \delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_4) \delta_{s_1 s_3} \delta_{s_2 s_4} \delta_{q_1 q_3} \delta_{q_2 q_4}. \tag{124}$$

On obtient finalement

$$\begin{aligned}
\langle \hat{G} \rangle_\Phi &= \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} \sum_{s_1 \dots s_4 q_1 \dots q_4} \rho(\mathbf{r} s_1 q_1 \mathbf{r} s_2 q_2) \rho(\mathbf{r} s_3 q_3 \mathbf{r} s_4 q_4) \\
&\quad \times \left[\left(t_0 + \frac{t_3}{6} \rho(\mathbf{r}) \right) (\delta_{s_1 s_2} \delta_{s_3 s_4} \delta_{q_1 q_2} \delta_{q_3 q_4} - \delta_{s_1 s_4} \delta_{s_2 s_3} \delta_{q_1 q_4} \delta_{q_2 q_3}) \right. \\
&\quad \left. + \frac{t_3}{6} \rho(\mathbf{r}) (\delta_{s_1 s_4} \delta_{s_2 s_3} \delta_{q_1 q_2} \delta_{q_3 q_4} - \delta_{s_1 s_2} \delta_{s_3 s_4} \delta_{q_1 q_4} \delta_{q_2 q_3}) \right]. \tag{125}
\end{aligned}$$

On se limite généralement à des états purs en isospin, ce qui veut dire que les états à une particule servant à construire $|\Phi\rangle$ sont soit proton, soit neutron, mais pas un mélange des deux. Cela revient restreindre le sous-espace des déterminants de Slater²⁸. La matrice densité à un corps devient alors diagonale en isospin

$$\rho(\mathbf{r} s q \mathbf{r}' s' q') = \rho(\mathbf{r} s q \mathbf{r}' s' q) \delta_{q q'}. \tag{126}$$

²⁸Il n'y a pas de raison a priori de faire cela si ce n'est que ça simplifie les calculs.

On suppose aussi une symétrie de spin²⁹ dans l'état $|\Phi\rangle$, ce qui implique d'une part que la matrice densité à un corps est aussi diagonale en spin

$$\rho(\mathbf{r}sq\mathbf{r}'s'q') = \rho(\mathbf{r}sq\mathbf{r}'sq) \delta_{qq'} \delta_{ss'} \quad (127)$$

et d'autre part que la densité de nucléons de spin s obéit à

$$\rho_s(\mathbf{r}) = \rho_{-s}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}\rho(\mathbf{r}) \quad ; \quad \rho_{sq}(\mathbf{r}) = \rho_{-sq}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}\rho_q(\mathbf{r}). \quad (128)$$

En faisant ces hypothèses, l'expression de $\langle \hat{G} \rangle_\Phi$ s'écrit alors simplement

$$\begin{aligned} \langle \hat{G} \rangle_\Phi &= \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} \left[\left(t_0 + \frac{t_3}{6} \rho(\mathbf{r}) \right) \left(\rho^2(\mathbf{r}) - \frac{1}{2} \sum_q \rho_q^2(\mathbf{r}) \right) + \frac{t_3}{6} \rho(\mathbf{r}) \left(\frac{1}{2} \rho^2(\mathbf{r}) - \sum_q \rho_q^2(\mathbf{r}) \right) \right] \\ &= \frac{1}{4} \int d\mathbf{r} \left[t_0 \left(2\rho^2(\mathbf{r}) - \sum_q \rho_q^2(\mathbf{r}) \right) + t_3 \rho(\mathbf{r}) \rho_p(\mathbf{r}) \rho_n(\mathbf{r}) \right]. \end{aligned} \quad (129)$$

Une fois l'expression de l'énergie obtenue, on peut alors en déduire celle du champ moyen HF

$$\begin{aligned} U(\mathbf{r}sq\mathbf{r}'s'q') &= \frac{\delta \langle \hat{G} \rangle_\Phi}{\delta \rho(\mathbf{r}'s'q' \mathbf{r}sq)} \\ &= \frac{1}{4} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta_{ss'} \delta_{qq'} [t_0 (4\rho(\mathbf{r}) - 2\rho_q(\mathbf{r})) + t_3 (\rho_p(\mathbf{r}) \rho_n(\mathbf{r}) + \rho(\mathbf{r}) \rho_{-q}(\mathbf{r}))]. \end{aligned} \quad (130)$$

Signalons enfin qu'il faut que l'énergie fonctionnelle de la densité à un corps $E[\rho]$, dont le terme d'interaction est donné par l'expression de $\langle \hat{G} \rangle_\Phi$ obtenue précédemment, reproduise la densité de saturation et l'énergie de liaison apportée par l'ajout d'un nucléon dans le noyau. Un ajustement de la fonctionnelle sur ces propriétés donne les paramètres $t_0 = -1000 \text{ MeV}\cdot\text{fm}^3$ et $t_3 = 15000 \text{ MeV}\cdot\text{fm}^6$. Ainsi, on a "abandonné" toute référence à l'interaction nue et à son coeur dur. On se rapproche donc de l'esprit de la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT) en matière condensée. Il s'agit cependant d'une théorie différente car nous nous basons sur une interaction effective phénoménologique inspirée de l'approche de Brueckner qui est différente de celle de Kohn-Sham.

6.9 Résolution de l'équation HF : aspects pratiques

Nous nous intéressons maintenant à la résolution pratique des équations Hartree-Fock dans le but d'étudier la structure des noyaux. On cherche donc à résoudre le jeu d'équations

$$\hat{h} |\varphi_i\rangle = e_i |\varphi_i\rangle \quad (131)$$

pour les N états de plus basses énergies e_i .

²⁹C'est le cas par exemple des noyaux avec un nombre pair de neutrons et de protons qui sont saturés en spin dans leur état fondamental et pour lesquels, si un état de spin *up* est occupé, le même état mais de spin *down* l'est aussi.

Méthode du temps imaginaire

La méthode du temps imaginaire est une des méthodes couramment utilisées pour trouver la valeur propre la plus basse d'un opérateur (s'il existe une borne inférieure à son spectre de valeurs propres). Illustrons-la dans le cas simple d'une seule particule dans un potentiel extérieur. Considérons un *état d'essai* $|\nu_e\rangle$ que l'on décompose sur les états propres d'un hamiltonien ($\hat{H}|\mu_n\rangle = E_n|\mu_n\rangle$)

$$|\nu_e\rangle = \sum_n c_n |\mu_n\rangle. \quad (132)$$

Appliquons l'opérateur $e^{-\beta\hat{H}}$ sur cet état

$$e^{-\beta\hat{H}}|\nu_e\rangle = \sum_n c_n e^{-\beta E_n} |\mu_n\rangle = e^{-\beta E_0} \sum_n c_n e^{-\beta(E_n - E_0)} |\mu_n\rangle. \quad (133)$$

L'état $|\mu_0\rangle$ de valeur propre la plus basse E_0 s'obtient alors par la relation

$$|\mu_0\rangle = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{e^{-\beta\hat{H}} |\nu_e\rangle}{\langle \nu_e | e^{-2\beta\hat{H}} | \nu_e \rangle^{1/2}} \quad (134)$$

car $e^{-\beta E_0} \geq e^{-\beta E_{n \neq 0}}$ et donc la composante $n = 0$ domine quand β devient grand. Le dénominateur est un facteur de normalisation car l'opérateur $e^{-\beta\hat{H}}$ n'est pas unitaire ($\beta \in \mathbb{R}$). La dénomination "temps imaginaire" vient du fait que $e^{-\beta\hat{H}}$ ressemble à un opérateur d'évolution en temps $e^{-i\hat{H}t/\hbar}$ avec un temps imaginaire $t = -i\hbar\beta$. Notons qu'il est nécessaire de partir d'un état d'essai qui contienne une composante non nulle de l'état fondamental.

Application à des calculs HF

Obtenir les états et les valeurs propres du hamiltonien HF à une particule \hat{h} n'est pas aussi direct que le suggère le cas à une particule. Deux difficultés sont à relever :

- Nous avons non pas une mais N particules et donc N états propres de \hat{h} à trouver. Il faut partir avec N états d'essai.
- Le problème est non linéaire car \hat{h} dépend de ρ et donc de la solution recherchée.

Pour s'affranchir de la première difficulté, nous appliquons la méthode à chaque état occupé en leur imposant de rester orthogonaux entre eux. On obtient ainsi les N états de plus basses énergies à condition qu'aucun de ces états ne soit orthogonal aux N états d'essai. On peut, par exemple, choisir pour états d'essai les fonctions d'onde à une particule de l'oscillateur harmonique. La seconde difficulté nécessite quant à elle de résoudre le problème itérativement. Il faut appliquer l'opérateur d'évolution sur un petit temps imaginaire $\Delta\beta$ puis recalculer la matrice densité et le nouveau champ moyen avant de procéder à l'itération suivante.

Voici un schéma possible de résolution avec la méthode du temps imaginaire.

$$\begin{array}{ccc} \{|\varphi_1^{(n)}\rangle \cdots |\varphi_N^{(n)}\rangle\} & \Rightarrow & \rho^{(n)} & \Rightarrow & \hat{h}^{(n+1)} = \lambda \hat{h}[\rho^{(n)}] + (1 - \lambda) \hat{h}^{(n)} \\ & & \uparrow & & \downarrow \\ |\varphi_i^{(n+1)}\rangle = \frac{1}{\mathcal{N}_i} \left(|\varphi'_i\rangle - \sum_{j=0}^{i-1} \langle \varphi_j^{(n+1)} | \varphi'_i \rangle |\varphi_j^{(n+1)}\rangle \right) & \Leftarrow & |\varphi'_i\rangle = (1 - \Delta\beta \hat{h}^{(n+1)}) |\varphi_i^{(n)}\rangle \end{array} \quad (135)$$

où \mathcal{N}_i est la norme de l'état entre parenthèses. Le paramètre λ est un facteur d'amortissement utilisé pour assurer la convergence. Il impose que le champ moyen soit un mélange du champ

HF et du champ à l'itération précédente. Les états à une particule sont ensuite évolués avec un pas en temps imaginaire "petit" pour assurer la convergence, et pour lequel l'opérateur d'évolution s'écrit au premier ordre $e^{-\Delta\beta\hat{h}^{(n)}} \simeq (1 - \Delta\beta\hat{h}^{(n)})$. Comme cette opération n'est pas unitaire, il est nécessaire d'orthonormaliser les états à une particule obtenus afin d'obtenir l'état à l'itération $n + 1$. La méthode d'orthonormalisation utilisée dans l'exemple ci-dessus est appelée "procédure de Graham-Schmidt".

Il va de soi que le schéma proposé ci-dessus n'est pas résolu numériquement tel quel, c'est à dire avec des opérateurs et des états de l'espace de Hilbert. En pratique, on choisit d'abord une base de cet espace, par exemple les coordonnées $|\mathbf{rsq}\rangle$ ou celui des impulsions $|\mathbf{psq}\rangle$ que l'on discrétise sur un réseau, ou encore une base d'oscillateur harmonique $|nljm\rangle$ que l'on tronque à une certaine valeur du nombre quantique principal n_{max} . Une fois la base choisie, on peut alors écrire les éléments de matrice des opérateurs et décomposer les états à une particule qui deviennent, par exemple, des fonctions d'onde spatiales si l'on choisit l'espace des coordonnées.

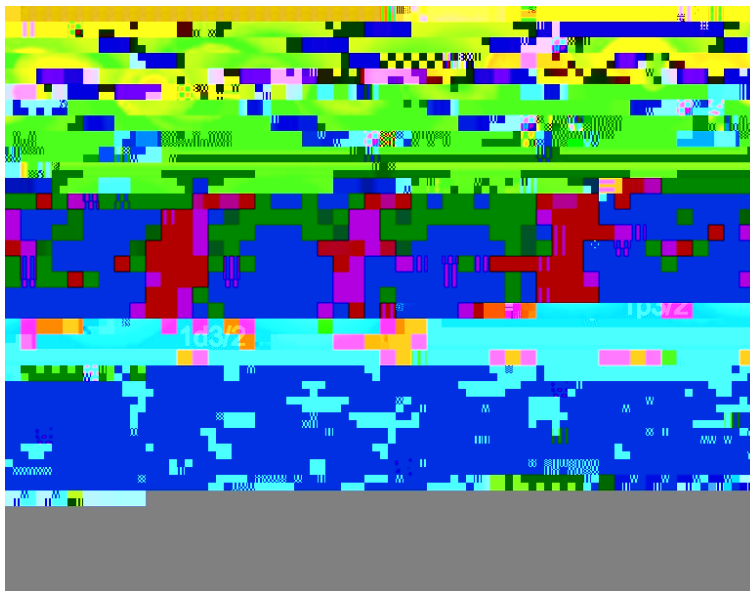


FIGURE 19 – densité spatiale des états à une particule neutron de l' ^{16}O . L'état $1p1/2$ est coupé en 2 pour montrer qu'il est creux en son centre.

On obtient donc, après convergence, un jeu de fonctions d'onde à une particule occupées servant à construire l'état HF. Il est bien entendu aussi possible de déterminer les états non occupés d'énergies supérieures au niveau de Fermi, même si ceux-ci n'affectent ni la densité ni le champ moyen du système. La figure 19 représente les densités $|\varphi_i(\mathbf{rsq})|^2$ associées aux états à une particule neutron de l' ^{16}O et obtenues à l'aide de la méthode du temps imaginaire. La résolution est effectuée dans l'espace des coordonnées spatiales discrétisé. Le réseau est pris assez grand pour traiter correctement les comportements asymptotiques des fonctions d'onde, donnant l'aspect diffus des densités. Les conditions aux limites du réseau utilisé sont dites "à bords durs". Cela signifie que les fonctions d'onde s'annulent en dehors du réseau. Notons enfin

que dans le calcul présenté, seuls les états³⁰ $1s1/2$, $1p3/2$ et $1p1/2$ sont occupés³¹.

³⁰La nomenclature des orbitales en physique nucléaire diffère de celle de la physique atomique. Ici, le premier chiffre n'est pas le nombre quantique principal mais le nombre quantique radial. La lettre indique le moment cinétique orbital en notation spectroscopique ($s, p, d, f, g... \equiv l = 0, 1, 2, 3, 4...$) et le dernier chiffre indique le moment cinétique total $j = l \pm s$. Voir par exemple *Noyaux et particules : modèles et symétries* de Luc Valentin.

³¹Chaque état représenté sur la figure 19 a une dégénérescence 2 car le calcul statique préserve la symétrie par renversement du temps.

7 L'approche Hartree-Fock dépendant du temps

Dans le chapitre précédent, nous avons vu comment appliquer la méthode Hartree-Fock statique pour déterminer la structure de l'état fondamental des noyaux. Nous nous intéressons maintenant au cas plus général de la théorie Hartree-Fock dépendant du temps (TDHF). Cette théorie généralise HF aux problèmes dynamiques pour traiter, par exemple, la vibration des noyaux ou encore leur collisions. Nous partons donc de l'équation de Schrödinger dépendant du temps

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi\rangle = \hat{H} |\Psi\rangle. \quad (136)$$

Il est possible d'obtenir l'équation TDHF de la même manière que l'équation HF statique au chapitre 6 à l'aide d'un principe variationnel, non plus sur l'énergie (principe variationnel de Ritz), mais sur l'action de Dirac S tel que celle ci soit stationnaire par rapport à toute variation infinitésimale de $\Psi(t)$ en fixant l'état à l'instant initial t_i et celui à l'instant final t_f :

$$\delta S_{t_i, t_f}[\Psi] = \delta \left\{ \int_{t_i}^{t_f} dt \langle \Psi(t) | \left(i\hbar \frac{d}{dt} - \hat{H} \right) | \Psi(t) \rangle \right\} = 0 \quad (137)$$

Nous allons cependant utiliser une autre méthode pour dériver l'équation TDHF, basée sur le théorème d'Erhenfest.

7.1 Évolution : théorème d'Erhenfest

Nous nous intéressons à l'évolution de valeurs moyennes d'observables. En partant de l'équation de Schrödinger et de sa transposée pour un état quelconque à N nucléons $|\Psi\rangle$, on peut écrire, pour une observable à un corps \hat{F} ,

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{F} \rangle_{\Psi} = \left(\frac{i}{\hbar} \langle \Psi | \hat{H} \right) \hat{F} |\Psi\rangle + \langle \Psi | \hat{F} \left(\frac{-i}{\hbar} \hat{H} |\Psi\rangle \right) = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{F}] \rangle_{\Psi} \quad (138)$$

ce qui n'est autre que le théorème d'Ehrenfest appliqué à \hat{F} . Notons ici qu'aucune approximation n'a été faite, à savoir que l'état $|\Psi\rangle$ peut être un état corrélé.

7.2 Équation TDHF

Les hypothèses

Pour obtenir l'équation TDHF, on se limite à la **description de l'évolution des valeurs moyennes d'observables à un corps** en faisant l'hypothèse que **le système est décrit par un état de particules indépendantes**. On cherche donc à déterminer $\langle \hat{F} \rangle_{\Phi}(t)$ où $\hat{F} = \sum_{i=1}^N \hat{f}(i)$ et $|\Phi(t)\rangle$ est un déterminant de Slater.

Décomposition de \hat{H} et interaction résiduelle

Considérons le hamiltonien

$$\begin{aligned}
 \hat{H} &= \sum_{i=1}^N \hat{t}(i) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^N \hat{v}(i, j) \\
 &= \sum_{i=1}^N \hat{h}(i) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^N \hat{v}_{res}(i, j) \\
 &= \hat{H}_{CM} + \hat{V}_{res}
 \end{aligned} \tag{139}$$

où $\hat{h} = \hat{t} + \hat{U}$ est le hamiltonien à une particule de Hartree-Fock défini précédemment et $\hat{V}_{res} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^N \hat{v}_{res}(i, j)$ est l'**interaction résiduelle** définie comme la différence entre le hamiltonien \hat{H} et le **hamiltonien à un corps de champ moyen** construit à partir du hamiltonien à une particule de Hartree-Fock $\hat{H}_{CM} = \sum_{i=1}^N \hat{h}(i)$.

Forme de Liouville de l'équation TDHF

La valeur moyenne de \hat{F} s'écrit simplement en fonction de la matrice densité à un corps

$$\langle \hat{F} \rangle_{\Phi} = \text{Tr}(\rho f). \tag{140}$$

La partie à un corps du commutateur dans l'équation de Ehrenfest s'écrit

$$\begin{aligned}
 \langle \Phi | \left[\sum_{i=1}^N \hat{h}(i), \sum_{j=1}^N \hat{f}(j) \right] | \Phi \rangle &= \sum_{i=1}^N \langle \Phi | \left[\hat{h}(i), \hat{f}(i) \right] | \Phi \rangle \quad (\text{à cause du commutateur}) \\
 &= \text{Tr}(\rho[h, f]).
 \end{aligned} \tag{141}$$

Le terme faisant intervenir l'interaction résiduelle s'annule quant à lui, ce qui se montre en utilisant la seconde quantification.

On obtient ainsi

$$\frac{d}{dt} \text{Tr}(\rho f) = \frac{i}{\hbar} \text{Tr}(\rho[h, f]) \tag{142}$$

or

$$\frac{d}{dt} \text{Tr}(\rho f) = \text{Tr} \left(\frac{d\rho}{dt} f \right) \tag{143}$$

et

$$\text{Tr}(\rho[h, f]) = \text{Tr}(\rho h f) - \text{Tr}(\rho f h) = \text{Tr}(\rho h f) - \text{Tr}(h \rho f) = \text{Tr}([\rho, h]f). \tag{144}$$

Ces équations étant vrai quelque soit f , on peut choisir le cas particulier où seul $f(\xi, \xi')$ est non nul, ce qui nous permet de nous affranchir de la trace et de factoriser f . On arrive ainsi à l'équation TDHF sous sa forme de Liouville

$$i\hbar \frac{d}{dt} \rho = [h, \rho]. \tag{145}$$

On rappelle que h est auto-cohérent, c'est à dire qu'il dépend lui même de ρ . L'équation TDHF est donc fortement non linéaire.

Équation TDHF dans $\mathcal{H}^{(1)}$

On rappelle que $\rho(\xi, \xi') = \langle \xi | \hat{\rho} | \xi' \rangle$ et $h(\xi, \xi') = \langle \xi | \hat{h} | \xi' \rangle$, donc

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \langle \xi | \hat{\rho} | \xi' \rangle &= \int d\xi'' \left(\langle \xi | \hat{h} | \xi'' \rangle \langle \xi'' | \hat{\rho} | \xi' \rangle - \langle \xi | \hat{\rho} | \xi'' \rangle \langle \xi'' | \hat{h} | \xi' \rangle \right) \\ &= \langle \xi | [\hat{h}, \hat{\rho}] | \xi' \rangle. \end{aligned} \quad (146)$$

Comme c'est vrai quelque soit ξ et ξ' , on obtient

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\rho} = [\hat{h}, \hat{\rho}]. \quad (147)$$

On choisit de se placer dans la base des états à une particule $\{|\varphi_i\rangle\}$ qui diagonalise \hat{h} , c'est à dire $\hat{\rho} = \sum_{i=1}^N |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i|$. L'équation TDHF s'écrit alors comme un jeu de N équations couplées par l'auto-cohérence du champ moyen

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\varphi_i\rangle = \hat{h} |\varphi_i\rangle, \quad i = 1 \dots N. \quad (148)$$

En effet, en partant de ce jeu d'équations, en multipliant à droite par $\langle \varphi_i |$ et en sommant sur i , on a

$$\sum_{i=1}^N i\hbar \left(\frac{d}{dt} |\varphi_i\rangle \right) \langle \varphi_i | = \hat{h} \hat{\rho}. \quad (149)$$

De même, en partant des équations conjuguées du jeu d'équations précédent, en multipliant à gauche par $|\varphi_i\rangle$ et en sommant sur i , on obtient

$$\sum_{i=1}^N -i\hbar |\varphi_i\rangle \left(\frac{d}{dt} \langle \varphi_i | \right) = \hat{\rho} \hat{h}. \quad (150)$$

En effectuant la différence de ces deux dernières équations, on obtient bien

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\rho} = \hat{h} \hat{\rho} - \hat{\rho} \hat{h} = [\hat{h}, \hat{\rho}]. \quad (151)$$

7.3 Résolution pratique des équations TDHF

Pour trouver l'évolution dynamique du système, nous devons résoudre les équations TDHF pour les états occupés. La difficulté vient principalement du fait que le hamiltonien dépend du temps. En conséquence, comme dans le cas du temps imaginaire, une procédure spécifique doit être mise en place pour prendre en compte l'auto-cohérence du hamiltonien HF dans le propagateur. Nous procédons donc itérativement par petits pas en temps Δt durant lesquels nous supposons que le hamiltonien reste constant. Pour conserver l'énergie, il est nécessaire d'appliquer un algorithme symétrique par renversement du temps³², et donc d'estimer le hamiltonien à $t + \frac{\Delta t}{2}$ pour faire évoluer le système entre t et $t + \Delta t$

$$|\varphi_i(t + \Delta t)\rangle \approx e^{-i\frac{\Delta t}{\hbar} \hat{h}(t + \frac{\Delta t}{2})} |\varphi_i(t)\rangle. \quad (152)$$

³²En allant de t vers $t + \Delta t$, puis en inversant le temps pour revenir à t en utilisant le même algorithme, l'énergie, en particulier, doit être inchangée.

Une algorithme possible est schématisé par

$$\begin{array}{ccccc}
\{|\varphi_1^{(n)}\rangle \cdots |\varphi_N^{(n)}\rangle\} & \Rightarrow & \rho^{(n)} & \Rightarrow & \hat{h}^{(n)} \equiv \hat{h}[\rho^{(n)}] \\
\uparrow & & & & \downarrow \\
|\varphi_i^{(n+1)}\rangle = e^{-i\frac{\Delta t}{\hbar} \hat{h}^{(n+\frac{1}{2})}} |\varphi_i^{(n)}\rangle & & & & |\tilde{\varphi}_i^{(n+1)}\rangle = e^{-i\frac{\Delta t}{\hbar} \hat{h}^{(n)}} |\varphi_i^{(n)}\rangle \\
\uparrow & & & & \downarrow \\
\hat{h}^{(n+\frac{1}{2})} \equiv \hat{h} \left[\rho^{(n+\frac{1}{2})} \right] & \Leftarrow & \rho^{(n+\frac{1}{2})} = \frac{\rho^{(n)} + \tilde{\rho}^{(n+1)}}{2} & \Leftarrow & \tilde{\rho}^{(n+1)}
\end{array} \tag{153}$$

où $|\varphi^{(n)}\rangle$ est une approximation de $|\varphi(t_n = n\Delta t)\rangle$. Dans cet algorithme, une première évolution est effectuée pour estimer la densité $\tilde{\rho}^{(n+1)}$ au pas en temps suivant. Le hamiltonien HF servant à faire l'évolution est alors calculé à partir de la moyenne des densités $\rho^{(n)}$ et $\tilde{\rho}^{(n+1)}$.

D'autre part, l'opérateur d'évolution s'écrit sous forme d'une exponentielle. Numériquement, on ne sait pas appliquer directement une exponentielle d'opérateur et il est nécessaire de développer et de tronquer l'exponentielle. Ceci est possible car Δt est petit, mais ce n'est pas sans poser de problème car l'opérateur d'évolution perd alors son unitarité. Il est alors nécessaire de contrôler l'orthonormalité des fonctions d'onde au cours du temps.

7.4 Étude de vibrations avec TDHF

Les noyaux ont des modes de vibration (voir figure 20) plus ou moins collectifs (c'est à dire qui impliquent un plus ou moins grand nombre de nucléons vibrant en phase). Ceux-ci peuvent être étudiés en "boostant" l'état fondamental du noyau. Par exemple, si on s'intéresse à des vibrations monopolaires (alternance de compressions et de dilatations du noyau), on peut partir d'une condition initiale

$$|\Phi(t=0)\rangle = e^{ik \sum_{i=1}^N \hat{r}^{(i)^2}} |\Phi_{HF}\rangle \tag{154}$$

où $|\Phi_{HF}\rangle$ est l'état fondamental obtenu par la théorie Hartree-Fock statique et k est l'intensité du boost. En effet, dans le cas d'un hamiltonien indépendant du temps, l'opérateur d'évolution s'écrit $e^{i\hat{H}t/\hbar}$ et on voit que le boost revient à appliquer un potentiel extérieur dépendant du temps proportionnel à $\hat{r}^2\delta(t)$ pour chacun des états à une particule. Celui-ci induit une densité de courant tendant à dilater ou contracter le noyau en fonction du signe de k .

Suite à cette excitation, on peut observer l'évolution de valeurs moyennes d'observables à un corps, en particulier l'observable qui a servi à l'excitation. Un exemple d'évolution du rayon carré moyen suite à une excitation monopolaire est représenté sur la figure 21. De plus, si l'intensité du boost est assez petite pour être dans un **régime linéaire**, c'est à dire si l'amplitude des oscillations observées est linéaire en k , il est possible de linéariser l'équation TDHF. On obtient alors la théorie **RPA** (approximations des phases aléatoires). Pour linéariser l'équation TDHF, il faut partir de la solution de l'équation HF statique

$$[h_0, \rho_0] = 0. \tag{155}$$

Une perturbation extérieure $\delta F(t)$ infinitésimale induit une variation $\delta \rho(t)$ de la densité à un corps ($\rho(t) = \rho_0 + \delta \rho(t)$) et donc une modification du hamiltonien à une particule

$$h(t) = h_0 + \delta h(t) + \delta F(t) \tag{156}$$

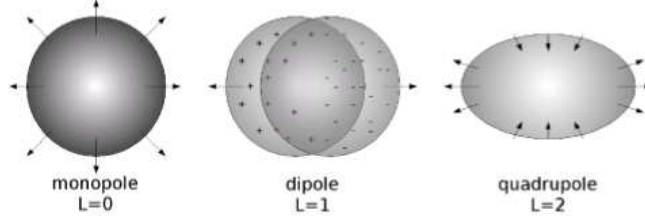


FIGURE 20 – Exemples de résonances géantes.

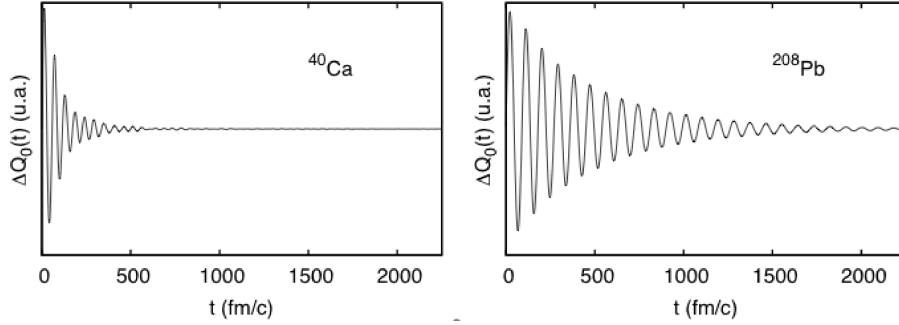


FIGURE 21 – Évolution du rayon carré moyen dans le ^{40}Ca et le ^{208}Pb suite à un boost monopolaire.

où δh est induit par l'autocohérence du champ. L'équation TDHF donne alors

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{d}{dt} \rho &= [h, \rho] \\
 i\hbar \frac{d}{dt} \delta \rho &= [h_0, \delta \rho] + [\delta h, \rho_0] + [\delta F, \rho_0] + O(2).
 \end{aligned}
 \tag{157}$$

Cette équation est équivalente à l'équation RPA.

Cette théorie est couramment utilisée car elle fournit des informations importantes sur la structure des modes de vibration des noyaux comme leurs énergies. En particulier, la RPA (ou TDHF linéarisé) est utilisée pour étudier les **résonances géantes** qui sont des vibrations collectives à hautes énergies présentes dans tous les noyaux (sauf les plus légers). La figure 21 met en évidence une résonance géante monopolaire.

7.5 Calculs de collisions avec la théorie TDHF

Nous nous intéressons maintenant à la résolution pratique de TDHF dans le but d'étudier des collisions entre noyaux. Nous allons expliquer la réalisation d'un tel calcul pas à pas afin notamment de maîtriser au mieux les contraintes numériques du calcul. Pour effectuer un calcul TDHF il nous faut :

- construire l'état fondamental HF des partenaires de collision
- construire un unique Slater à partir de ces deux états en les plaçant à une distance D_0
- mettre les noyaux en vitesse en fonction de l'énergie et du moment angulaire désirés

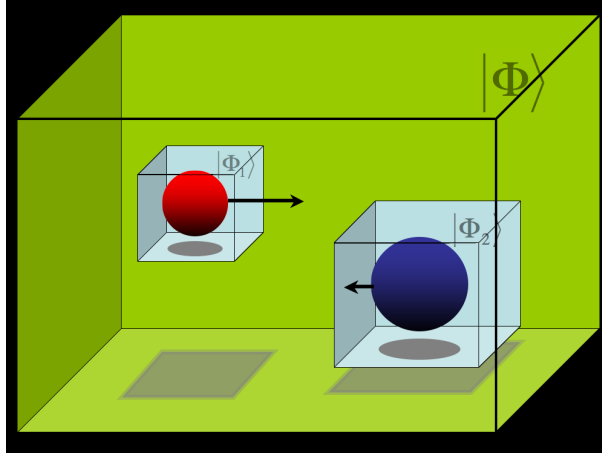


FIGURE 22 – Schéma représentant les 2 réseaux HF initiaux inclus dans le réseau TDHF.

- résoudre itérativement l'équation TDHF pour obtenir l'évolution des états occupés
- calculer les observables d'intérêt à partir de ces fonctions d'onde.

7.5.1 construction de l'état à deux noyaux

Chaque noyau est initialement dans son état fondamental HF. On dispose donc de deux états de particules indépendantes pour construire la condition initiale alors que l'équation TDHF ne peut servir à décrire l'évolution que d'un seul déterminant de Slater.

Cependant il est possible de construire un état $|\Phi\rangle$ de $N = N_1 + N_2$ nucléons indépendants à partir de deux déterminants de Slater $|\Phi_1\rangle = |\alpha_1 \dots \alpha_{N_1}\rangle$ et $|\Phi_2\rangle = |\beta_1 \dots \beta_{N_2}\rangle$. Pour montrer sous quelles conditions cela est possible, considérons les matrices densité à un corps $\hat{\rho}_1 = \sum_{i=1}^{N_1} |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i|$ et $\hat{\rho}_2 = \sum_{i=1}^{N_2} |\beta_i\rangle\langle\beta_i|$ de ces états. Comme il s'agit d'états de particules indépendantes, elles obéissent à la propriété³³ $\hat{\rho}_i^2 = \hat{\rho}_i$. Calculons le carré de la matrice densité totale $\hat{\rho} = \hat{\rho}_1 + \hat{\rho}_2$

$$\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}_1^2 + \hat{\rho}_2^2 + \hat{\rho}_1 \hat{\rho}_2 + \hat{\rho}_2 \hat{\rho}_1 = \hat{\rho} + \sum_{i=1}^{N_1} \sum_{j=1}^{N_2} (|\alpha_i\rangle\langle\alpha_i|\beta_j\rangle\langle\beta_j| + \text{H.c.}) \quad (158)$$

où H.c. signifie *Hermitique conjugué*. On voit que pour avoir la propriété $\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$, et donc pour que $|\Phi\rangle$ soit un état de particules indépendantes, il faut que les états à une particule ayant servi à la construction des 2 états HF aient un recouvrement nul. En pratique, cela est possible grâce à la condition aux limites de bords durs qui impose que les fonctions d'onde soient nulles en dehors des réseaux qui ont servi à calculer leurs états HF. Il suffit alors de construire un réseau pour le calcul TDHF qui inclut les 2 réseaux initiaux sans que ces derniers ne se recouvrent (voir figure 22).

7.5.2 mise en mouvement des noyaux

La théorie TDHF est quantique, dans le sens où le système est représenté par une fonction d'onde à N nucléons. Cependant la restriction à des états de particules indépendantes n'autorise

³³La matrice densité d'un état de particules indépendantes est un projecteur dans le sous-espace des états occupés.

pas, en général, une interprétation *probabiliste* des voies de réaction. C'est le cas notamment pour la fusion où TDHF prédit des probabilités de fusion valant 1 ou 0. TDHF est donc incapable de décrire la fusion par effet tunnel. Cela signifie que TDHF donne essentiellement pour résultat des *trajectoires classiques*.

On se place dans le référentiel du centre de masse du système total. Le paramètre d'impact b et la vitesse à l'infini v suffisent alors à décrire les vecteurs vitesse \mathbf{v}_1 et \mathbf{v}_2 des noyaux à l'instant initial du calcul TDHF ($t = 0$) où leurs centres de masse sont distant de D_0 , à condition de considérer une trajectoire de Rutherford pour les temps $t \leq 0$. Cette dernière hypothèse est cohérente avec le fait que l'on suppose que les deux noyaux soient dans leur état fondamental à $t = 0$. En d'autre terme, on suppose qu'il n'y a pas eu de transfert d'énergie par excitation coulombienne du mouvement relatif vers les degrés de liberté internes entre l'infini et la distance D_0 .

On donne une vitesse \mathbf{v}_i au noyau $i = 1$ ou 2 en lui appliquant une impulsion $\mathbf{P}_i = N_i m \mathbf{v}_i$. Cela se fait grâce à une translation de sa matrice densité ρ_i dans l'espace des impulsions

$$\hat{\rho}_i(t = 0) = e^{i m \mathbf{v}_i \cdot \hat{\mathbf{r}} / \hbar} \hat{\rho}_i^{HF} e^{-i m \mathbf{v}_i \cdot \hat{\mathbf{r}} / \hbar} \quad (159)$$

où l'opérateur position $\hat{\mathbf{r}} = \hat{x} \mathbf{e}_x + \hat{y} \mathbf{e}_y + \hat{z} \mathbf{e}_z$ agit dans l'espace des états à une particule.

Exercice 18 :

Montrer que $\langle \hat{P}_i \rangle = N_i m \mathbf{v}_i$.

En pratique, si on choisit une représentation dans l'espace des coordonnées, ce sont donc les fonctions d'onde à une particule que nous allons suivre, et la transformation de l'équation précédente revient à appliquer une **phase** ou un **boost galiléen** aux fonctions d'onde en chaque point du réseau. Les fonctions d'onde à l'instant initial s'écrivent ainsi

$$\begin{aligned} \varphi_{\alpha_i}(\mathbf{r}sq; t = 0) &= e^{i m \mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{r}} \varphi_{\alpha_i}(\mathbf{r}sq) & 1 \leq i \leq N_1 \\ \varphi_{\beta_i}(\mathbf{r}sq; t = 0) &= e^{i m \mathbf{v}_2 \cdot \mathbf{r}} \varphi_{\beta_i}(\mathbf{r}sq) & 1 \leq i \leq N_2. \end{aligned} \quad (160)$$

Exercice 19 :

Le montrer à partir de l'équation (159).

Après cette transformation, il n'y a plus de raison de distinguer entre les fonctions d'onde à une particule de l'un ou l'autre des partenaires de collision.

L'évolution TDHF permet entre autre de suivre l'évolution de la densité du système, comme nous l'avons illustré au début de ce cours sur les figures 7 et 8.