

CHAMP MOYEN DÉPENDANT DU TEMPS ET CORRÉLATIONS D'APPARIEMENT

Benoît AVEZ¹, Michael BENDER¹, Karim BENNACEUR², Philippe CHOMAZ³,
Thomas DUGUET⁴, Cédric SIMENEL¹

¹*CEA/DSM/DAPNIA/SPhN*; ²*Institut de Physique Nucléaire de Lyon*;

³*GANIL Caen*; ⁴*NSCL, MSU, East-Lansing, USA*.

Juin 2006

Table des matières

1	Introduction	2
2	Théorie de champ moyen	2
2.1	Le formalisme	2
2.2	Résultats HF	5
3	Les corrélations d'appariement	6
3.1	Le formalisme HFB	6
3.2	Résultats HF+BCS	9
4	Théorie de champ moyen dépendant du temps	11
4.1	Hartree-Fock dépendant du temps (TDHF)	11
4.2	Dynamique avec appariement	12
4.3	TDHFB et dynamique de collisions	14
5	Conclusions et perspectives	16
	Remerciements	18
A	Champ moyen et symétries	18
B	Les algorithmes Hartree-Fock et TDHF	19
	Références	19

1 Introduction

Revalorisée par les études récentes de noyaux exotiques, la physique nucléaire est d'un intérêt scientifique certain. Le développement récent d'accélérateurs d'ions radioactifs, tels que SPIRAL1 et prochainement SPIRAL2 au GANIL [1] permettront l'étude de certains noyaux à la limite de stabilité.

L'étude du noyau atomique est complexe du fait de sa nature quantique et composite. La superfluidité du noyau fait ainsi partie des manifestations de ces caractéristiques intrinsèquement quantiques. Elle est due à des corrélations d'appariement entre les constituants du noyau, relativement faibles, mais qui sont par exemple à l'origine des oscillations de masse entre les noyaux pairs et impairs [2]. Sa prise en compte est primordiale pour une description fine des propriétés du noyau et de sa dynamique, et nécessite une description microscopique. La future installation SPIRAL2 au GANIL couvrira une gamme d'énergie assez basse (de l'ordre de 10 MeV par nucléon) pour que les corrélations d'appariement soient susceptibles de jouer un rôle important dans la dynamique. Il est donc nécessaire d'avoir des modèles théoriques en vue de l'interprétation et même de la prédiction de résultats.

Parmi les modèles théoriques de structure du noyau et de sa dynamique, les méthodes de champ moyen auto-cohérentes, comme les méthodes Hartree-Fock (HF) [3, 4, 5] et Time-Dependent Hartree-Fock (TDHF) [6, 7, 8, 9] sont bien adaptées pour une description microscopique. Cependant, les corrélations à l'origine de la superfluidité n'entrent pas dans le cadre de ces modèles. Les théoriciens de la structure nucléaire utilisent donc des modèles de champ moyen plus élaborés prenant en compte les corrélations d'appariement, comme les méthodes HF+BCS [10] (provient du modèle d'appariement de Bardeen-Cooper-Schrieffer [11] développé initialement pour les supraconducteurs) et HFB (Hartree-Fock-Bogoliubov) [12, 13, 14]. Cependant, dans les théories dynamiques, la prise en compte des corrélations d'appariement dans les noyaux se limite à des modèles schématiques [15]. Nous allons donc tenter de poser les bases d'une théorie plus générale de l'appariement dynamique et d'identifier les problèmes liés à ce type de développement.

Commençant par une description succincte de la théorie de champ moyen Hartree-Fock, nous étendrons cette théorie statique à la prise en compte des corrélations d'appariement. Après avoir décrit l'extension dynamique de la théorie Hartree-Fock (TDHF), nous tenterons enfin d'exposer les problèmes liés à une théorie de champ moyen dépendante du temps prenant en compte ce type de corrélations (TDHF+BCS et TDHFB).

2 Théorie de champ moyen

2.1 Le formalisme

La méthode variationnelle

Le principe variationnel est un des grands principes de la physique. Ce dernier stipule, étant donné un système quantique défini par son Hamiltonien \hat{H} , que les fonctions d'onde $|\Psi\rangle$ états propres de \hat{H} sont les quantités qui rendent stationnaire (minimum pour l'état fondamental) sa valeur moyenne $E[\Psi]$ définie par :

$$E[\Psi] = \langle \hat{H} \rangle_{\Psi} = \frac{\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}. \quad (1)$$

La méthode variationnelle de Ritz [16] consiste à restreindre le domaine variationnel auquel appartient $|\Psi\rangle$, et de résoudre l'équation $\delta E[\Psi] = 0$. On obtient ainsi une méthode d'approximation pour la recherche des états propres d'un Hamiltonien. De plus, il est souvent nécessaire d'introduire par la méthode de Lagrange des contraintes physiques sur les solutions (imposer une forme particulière au noyau par exemple). On doit alors minimiser la fonctionnelle :

$$\langle \hat{H} - \Lambda(\hat{Q} - Q_0) \rangle_{\Psi} = \frac{\langle \Psi | \hat{H} - \Lambda(\hat{Q} - Q_0) | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}, \quad (2)$$

où \hat{Q} est l'observable dont on veut la valeur moyenne sur l'état $|\Psi\rangle$ égale à Q_0 , et Λ est le paramètre de Lagrange associé.

Cette méthode variationnelle de Ritz est la base de différents modèles microscopiques tels que la théorie Hartree-Fock.

La théorie Hartree-Fock

Le noyau est composé de protons et de neutrons en interaction mutuelle. Une méthode de résolution de ce problème à N corps nucléaire consiste à faire l'approximation de particules indépendantes. Les nucléons étant des fermions, ils obéissent au postulat de symétrisation, à savoir que la fonction d'onde à N corps représentant le noyau doit être complètement antisymétrique par permutation de coordonnées d'espace \mathbf{r} , de spin σ et d'isospin τ . Une telle fonction peut de manière générale être représentée par une somme de *déterminants de Slater* construits à partir de fonctions d'onde individuelles. Pour des particules indépendantes, la fonction d'onde à N corps est représentée par *un seul déterminant de Slater*. L'approximation de particules indépendantes consiste donc à restreindre notre espace variationnel aux déterminants de Slater, soit, dans le formalisme de la seconde quantification, aux états « produits » :

$$|\Psi_{prod}\rangle = \prod_{i=1}^N \hat{a}_i^\dagger |-\rangle, \quad (3)$$

où le produit est fait sur les états occupés de nombre d'occupation $n_i=1$ (0 si non occupé), et où les opérateurs \hat{a}_i^\dagger et \hat{a}_i sont les opérateurs usuels de création et d'annihilation de particule. Ils agissent sur le vide de particule $|-\rangle$ et définissent une base de Fock.

Le point fort de la méthode Hartree-Fock est son auto-cohérence : c'est une théorie de particules indépendantes évoluant dans un champ moyen *créé par elles-mêmes*. Pour un noyau, l'ingrédient déterminant le champ moyen est une interaction effective entre les nucléons [17, 18, 19]. Nous utilisons une interaction de type Skyrme [20] simplifiée :

$$\hat{V}^{eff} = t_0 \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) + t_3 \rho \left(\frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2} \right) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2). \quad (4)$$

de paramètres $t_0 = -1000$ MeV et $t_3 = 15000$ MeV. C'est une force de portée nulle très schématique mais qui reproduit cependant les propriétés de saturation de la densité dans la matière nucléaire infinie ($\rho_0 = 0.16$ fm⁻³) grâce à sa dépendance en densité.

Dérivation des équations Hartree-Fock

Dans le formalisme de la seconde quantification, le Hamiltonien du système s'écrit :

$$\hat{H} = \sum_{ij} \langle i|\hat{T}|j\rangle \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} \langle i, j|\hat{V}|k, l\rangle \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_l \hat{c}_k, \quad (5)$$

où \hat{T} est l'opérateur énergie cinétique, \hat{V} est le potentiel à deux corps, et où les opérateurs \hat{c}_i^\dagger et \hat{c}_i représentent une base quelconque (les éléments de matrice ne sont pas anti-symétrisés). Il faut minimiser la valeur moyenne du Hamiltonien dans l'espace variationnel des états « produits » pour trouver le déterminant de Slater $|\Psi_{HF}\rangle$ s'approchant le plus de l'état fondamental de \hat{H} .

Une des propriétés des états produits est que l'on peut les définir comme un vide. Ainsi, on remarque que $|\Psi_{HF}\rangle$ est un vide pour les opérateurs :

$$\hat{b}_i = \hat{a}_i \text{ si } n_i = 0 \text{ et } \hat{a}_i^\dagger \text{ si } n_i = 1. \quad (6)$$

En effet, on a $\hat{b}_i|\Psi_{HF}\rangle = 0 \forall i$. Les opérateurs adjoints de \hat{b}_i sont des créateurs de particules ou de trous sur le vide $|\Psi_{HF}\rangle$. Cette propriété justifie l'application directe du *théorème de Wick* [21] :

$$\langle \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j \rangle_{HF} = \rho_{ji}, \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \langle \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_l \hat{c}_k \rangle_{HF} &= \langle \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_k \rangle_{HF} \langle \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_l \rangle_{HF} - \langle \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_l \rangle_{HF} \langle \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_k \rangle_{HF} \\ &= \rho_{ki} \rho_{lj} - \rho_{li} \rho_{kj}, \end{aligned} \quad (8)$$

les contractions de type $\langle \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j^\dagger \rangle_{HF}$ et $\langle \hat{c}_i \hat{c}_j \rangle_{HF}$ étant nulles. Les ρ_{ij} sont les éléments de matrice de la densité à un corps (diagonale dans la base « Hartree-Fock » $\{\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_i\}$). La valeur moyenne du Hamiltonien s'écrit alors :

$$E[\Psi_{HF}] = \sum_{ij} \langle i|\hat{T}|j\rangle \rho_{ji} + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} \langle i, j|\hat{V}|k, l\rangle (\rho_{ki} \rho_{lj} - \rho_{li} \rho_{kj}).$$

En ce qui concerne l'interaction étudiée, la *fonctionnelle de Skyrme* $E^{Sky}[\Psi_{HF}]$ s'écrit [5] :

$$E^{Sky}[\Psi_{HF}] = \int \left[\frac{t_0}{2} \left(\rho^2(\mathbf{r}) - \frac{1}{2} (\rho_n^2(\mathbf{r}) + \rho_p^2(\mathbf{r})) \right) + \frac{t_3}{4} \rho(\mathbf{r}) \rho_n(\mathbf{r}) \rho_p(\mathbf{r}) \right] d\mathbf{r}, \quad (9)$$

où $\rho_n(\mathbf{r})$ et $\rho_p(\mathbf{r})$ sont les densités neutrons et protons et $\rho(\mathbf{r})$ la densité totale. Elles se calculent :

$$\rho_\tau(\mathbf{r}) = \sum_{\sigma} \langle \mathbf{r}, \sigma, \tau | \hat{\rho} | \mathbf{r}, \sigma, \tau \rangle, \quad (10)$$

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{\tau} \rho_\tau(\mathbf{r}), \quad (11)$$

avec $\hat{\rho}$ l'opérateur densité à un corps $\hat{\rho} = \sum_{ij} |i\rangle \rho_{ji} \langle j|$.

En se plaçant dans la base Hartree-Fock en représentation $(\mathbf{r}, \sigma, \tau)$, le processus variationnel revient à minimiser $E[\Psi_{HF}]$ par rapport aux $\phi_i^*(\mathbf{r})$ indépendamment de $\phi_i(\mathbf{r})^1$ (ou inversement), sous la contrainte de garder les fonctions d'onde individuelles orthonormales. Le principe variationnel s'écrit :

$$\delta \left(E[\Psi_{HF}] - \sum_{ij} \epsilon_i (\langle i|j\rangle - \delta_{ij}) \right) = 0. \quad (12)$$

¹Les deux quantités étant complexes conjuguées l'une de l'autre, varier indépendamment les parties réelle et imaginaire de $\phi_i(\mathbf{r})$ et $\phi_i^*(\mathbf{r})$ est équivalent à varier de manière indépendante $\phi_i(\mathbf{r})$ et $\phi_i^*(\mathbf{r})$.

Il aboutit aux N équations aux valeurs propres :

$$\hat{h}_{\tau_i} [\Psi_{HF}] |i\rangle = \epsilon_i |i\rangle. \quad (13)$$

Dans ce système d'équations, appelées équations Hartree-Fock, les ϵ_i sont les paramètres de Lagrange associés à la contrainte sur l'orthonormalité des fonctions d'onde. Ils représentent, a posteriori, les énergies des états de particules individuelles. L'opérateur $\hat{h}_{\tau_i} [\Psi_{HF}]$ est le Hamiltonien Hartree-Fock, composé d'un terme d'énergie cinétique et du champ moyen $\hat{U}_{\tau_i} [\Psi_{HF}]$ créé par l'ensemble des particules et ressenti par $|i\rangle$ (τ_i est l'isospin du nucléon indicé i). Il est responsable de l'*auto-cohérence* de la méthode. Le champ moyen peut ainsi s'écrire :

$$\begin{aligned} \hat{U}_{\tau_i} [\Psi_{HF}] &= \frac{\partial E^{Sky} [\rho(\mathbf{r})]}{\partial \rho_{\tau_i}(\mathbf{r})} \\ &= t_0 \left(\rho - \frac{\rho_{\tau_i}}{2} \right) + \frac{t_3}{4} (2\rho_{\tau_i} \rho_{-\tau_i} + \rho_{-\tau_i}^2). \end{aligned} \quad (14)$$

On doit donc résoudre les équations (13), et remplir les N fonctions d'onde à une particule les plus basses en énergie pour obtenir l'état fondamental. La partie du Hamiltonien négligée dans l'approximation de champ moyen s'écrit alors :

$$\hat{v}_{res} = \hat{H} - \sum_i \hat{h}_i [\Psi_{HF}]. \quad (15)$$

On l'appelle « interaction résiduelle ». On verra comment, dans la section 3 et dans l'annexe A, prendre en compte une partie des corrélations induites par \hat{v}_{res} , tout en restant dans le cadre d'une théorie de champ moyen.

2.2 Résultats HF

Les calculs Hartree-Fock ont été réalisés après implémentation d'un code en symétrie sphérique, sous l'hypothèse de renversement du temps². Par soucis de simplicité, le couplage spin-orbite et l'interaction Coulombienne ont été négligés³. L'algorithme utilisé est brièvement décrit dans l'annexe B.

Les calculs ont été effectués pour le noyau ${}_{40}^{90}\text{Zr}_{50}$. Ils ont aboutit sur une énergie totale de liaison $E = -989.5$ MeV et pour la racine du rayon carré moyen à $R_{rms} = \sqrt{\langle r^2 \rangle} = 4.11$ fm. Pour référence, le modèle de la goutte liquide de Bethe et Weizsäcker [22, 23] donne les valeurs : -752.4 MeV (-1008.4 MeV sans le terme Coulombien) et $R_{rms} = 4.34$ fm. Bien que trop simpliste pour décrire de manière réaliste les noyaux, ce modèle donne tout de même de bons ordres de grandeurs pour ces quantités macroscopiques.

L'allure des potentiels moyens neutrons et protons est illustrée dans la FIG.1. On remarque la forme du fond des puits de potentiels qui n'est pas plate. Ceci provient de la description microscopique du noyau. De plus, l'asymétrie N/Z du noyau explique la différence de profondeur de ces puits de potentiels neutrons et protons ainsi que des niveaux d'énergie⁴. Enfin, l'ordre global des niveaux d'énergies est respecté comparé à celui du

²c'est à dire que si une fonction d'onde $\phi_i^{\sigma,\tau}(\mathbf{r})$ est occupée, sa renversée du temps $\phi_i \equiv 2\sigma\phi_i^{-\sigma,\tau^*}(\mathbf{r})$ l'est aussi (cette définition est valable pour un spin 1/2).

³Ce modèle schématique n'aura donc pas la prétention de décrire des noyaux de manière réaliste.

⁴Et ce malgré le fait que l'on ait négligé l'interaction Coulombienne. Cette différence est donc strictement due à l'asymétrie protons-neutrons.

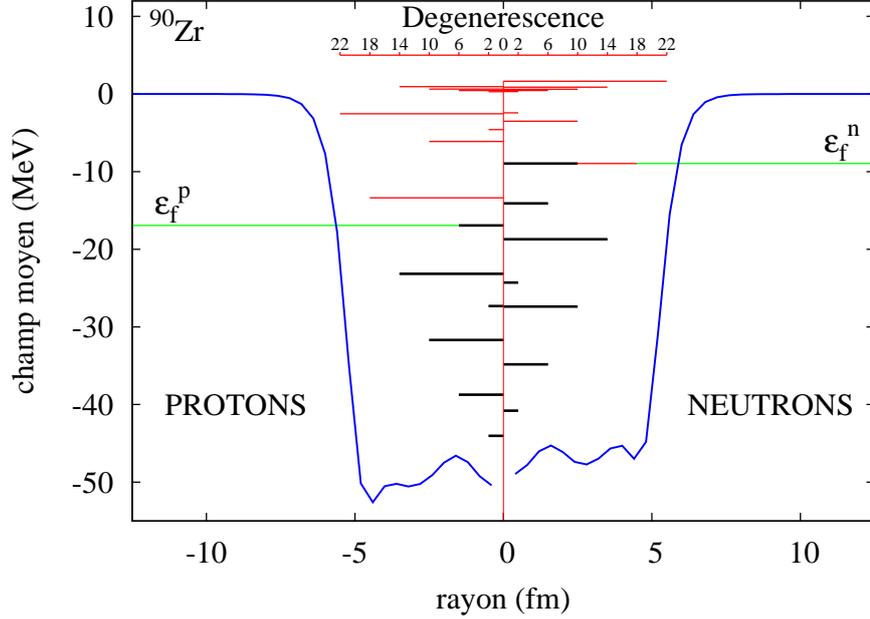


FIG. 1 – Les champs moyens protons (à gauche) et neutrons (à droite) du ^{90}Zr sont représentés en bleu. Les niveaux d'énergie individuelle apparaissent en barres horizontales rouges, avec une longueur proportionnelle à leur dégénérescence. Superposées à ces niveaux, leurs occupations relatives apparaissent en noir. Les niveaux de Fermi sont représentés en verts.

modèle en couches (compte tenu de l'absence de couplage spin-orbite dans notre modèle).

Ce type de modèle microscopique auto-cohérent écrit pour une force de Skyrme complète, permet de décrire avec succès des propriétés telles que la masse et le rayon de noyaux doublement magiques [5]. Cependant, une description plus fine des propriétés du noyau nécessite une prise en compte des corrélations d'appariement au sein de ces modèles.

3 Les corrélations d'appariement

3.1 Le formalisme HFB

La transformation générale de Bogoliubov

Il convient d'inclure dans notre modèle de champ moyen les corrélations d'appariement, responsables des phénomènes de superfluidité dont fait l'objet le noyau. On peut voir dans le formalisme Hartree-Fock que le fait d'avoir un état produit comme fonction d'onde à N corps simplifie grandement la résolution du problème. Cependant, il faut désormais, pour sonder les états de paires, pouvoir avoir des contractions de Wick de type « 2-particules » et « 2-trous » ($\langle \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j^\dagger \rangle$ et $\langle \hat{c}_i \hat{c}_j \rangle$). D'après le théorème de Wick généralisé, ceci n'est possible

que si on considère un vide plus général que le vide Hartree-Fock. Pour définir un tel vide, on considère la transformation générale de Bogoliubov [24] qui s'écrit :

$$\eta_k = \sum_n (U_{nk}^* a_n + V_{nk}^* a_n^\dagger), \quad (16)$$

$$\eta_k^\dagger = \sum_n (V_{nk} a_n + U_{nk} a_n^\dagger). \quad (17)$$

Elle peut aussi s'écrire sous forme matricielle :

$$\begin{pmatrix} \eta \\ \eta^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U^\dagger & V^\dagger \\ V^T & U^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ a^\dagger \end{pmatrix} = \mathcal{W}^\dagger \begin{pmatrix} a \\ a^\dagger \end{pmatrix}. \quad (18)$$

Afin de conserver des propriétés fermioniques pour les opérateurs $\{\eta_k, \eta_k^\dagger\}$, la matrice \mathcal{W} doit être unitaire :

$$\mathcal{W}\mathcal{W}^\dagger = \mathcal{W}^\dagger\mathcal{W} = 1. \quad (19)$$

On appelle le jeu d'opérateurs $\{\eta_k, \eta_k^\dagger\}$ les *opérateurs de quasiparticules*. Afin de garder la simplicité de la description en champ moyen, nous choisissons comme espace variationnel l'espace sous-tendu par les états de quasiparticules indépendantes. L'état correspondant, appelé état Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB), s'écrit donc :

$$|\Psi_{HFB}\rangle = \prod_k \eta_k |-\rangle. \quad (20)$$

Dans cet état, toutes les quasiparticules du vide de particule ont été détruites : en effet, $\eta_k |\Psi_{HFB}\rangle = 0, \forall k$. L'état HFB est donc un vide pour les opérateurs de quasi-particules.

Ces états de quasiparticules peuvent aussi s'écrire en terme de fonctions d'onde :

$$\Phi_n(\mathbf{x} = \mathbf{r}, \sigma, \tau) = \begin{pmatrix} \Phi_n^{(U)}(\mathbf{x}) \\ \Phi_n^{(V)}(\mathbf{x}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_i U_{in} \phi_i(\mathbf{x}) \\ \sum_i V_{in} \phi_i(\mathbf{x}) \end{pmatrix}, \quad (21)$$

où les ϕ_i sont des fonctions d'onde de particules individuelles.

Derivation des équations HFB

Le processus variationnel consiste désormais à minimiser l'énergie du système dans l'espace des états de quasiparticules indépendantes. Cependant, une telle fonction d'onde n'a plus un nombre déterminé de particules (elle n'est plus état propre de \hat{N}). On utilise donc la prescription de garder le bon nombre de particules *en moyenne* grâce à un multiplicateur de Lagrange. La fonctionnelle à minimiser est la valeur moyenne de l'opérateur :

$$\hat{H}' = \hat{H} - \lambda (\hat{N} - N_0). \quad (22)$$

Nous avons alors :

$$\begin{aligned}
E'[\Psi_{HFB}] &= \sum_{ij} (\langle i|\hat{T}|j\rangle - \lambda)\rho_{ji} \\
&+ \frac{1}{2} \sum_{ijkl} \langle i,j|\hat{V}|k,l\rangle (\rho_{ki}\rho_{lj} - \rho_{li}\rho_{kj}) \\
&+ \frac{1}{2} \sum_{ijkl} \langle i,j|\hat{V}|k,l\rangle \kappa_{ij}^* \kappa_{kl}.
\end{aligned} \tag{23}$$

$$\tag{24}$$

où les *matrice densité* ρ_{ji} et *tenseur d'appariement* κ_{ji} sont définis par :

$$\rho_{ji} = \langle \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j \rangle_{HFB} = (V^* V^T)_{ji}, \tag{25}$$

$$\kappa_{ji} = \langle \hat{c}_i \hat{c}_j \rangle_{HFB} = (V^* U^T)_{ji}. \tag{26}$$

Une écriture plus intuitive de cette énergie peut s'écrire en terme de fonctionnelle de densités locales en représentation « \mathbf{r} ». La densité s'écrit alors, à l'aide de l'écriture (21), : $\rho(\mathbf{x} = \mathbf{r}, \sigma, \tau) = \sum_n \Phi_n^{(V)}(\mathbf{x}) \Phi_n^{(V)*}(\mathbf{x})$, et le tenseur d'appariement : $\kappa(\mathbf{x} = \mathbf{r}, \sigma, \tau) = \sum_n \Phi_n^{(U)}(\mathbf{x}) \Phi_n^{(V)*}(\mathbf{x})$. La partie interaction de la fonctionnelle s'écrit alors :

$$\begin{aligned}
E^{int}[\Psi_{HFB}] &= \int \left[\frac{t_0}{2} \left(\rho^2(\mathbf{r}) - \frac{1}{2} (\rho_n^2(\mathbf{r}) + \rho_p^2(\mathbf{r})) \right) + \frac{t_3}{4} \rho(\mathbf{r}) \rho_n(\mathbf{r}) \rho_p(\mathbf{r}) \right] d\mathbf{r} \\
&+ \sum_{\tau} \int \left[\frac{t_{0p}}{4} \kappa_{\tau}(\mathbf{r}) \kappa_{\tau}^*(\mathbf{r}) + \frac{t_{3p}}{24} \rho(\mathbf{r}) \kappa_{\tau}(\mathbf{r}) \kappa_{\tau}^*(\mathbf{r}) \right] d\mathbf{r},
\end{aligned} \tag{27}$$

où t_{0p} et t_{3p} sont les paramètres de l'interaction d'appariement effective \hat{V}_p^{eff} qui a la même forme que (4).

La minimisation de la fonctionnelle (24) par rapport à ρ et κ aboutit aux équations aux valeurs propres [2] :

$$\begin{pmatrix} h_{\tau_\mu} - \lambda_{\tau_\mu} & \Delta_{\tau_\mu} \\ -\Delta_{\tau_\mu}^* & -(h_{\tau_\mu} - \lambda_{\tau_\mu}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U^\mu \\ V^\mu \end{pmatrix} = E_\mu \begin{pmatrix} U^\mu \\ V^\mu \end{pmatrix}, \tag{28}$$

où h_{τ_μ} est le hamiltonien Hartree-Fock et Δ_{τ_μ} le champ d'appariement, définis par :

$$h_{\tau_\mu} - \lambda_{\tau_\mu} = \frac{\partial E'[\Psi_{HFB}]}{\partial \rho_{\tau_\mu}}, \tag{29}$$

$$\Delta_{\tau_\mu} = \frac{\partial E'[\Psi_{HFB}]}{\partial \kappa_{\tau_\mu}^*}. \tag{30}$$

L'approximation BCS

On choisit, dans la théorie HF+BCS, de n'apparier que des *états symétriques par renversement du temps* [25, 2]. Les opérateurs de quasiparticules s'écrivent alors :

$$\eta_i = u_i \hat{a}_i - v_i \hat{a}_i^\dagger, \tag{31}$$

$$\eta_{\bar{i}} = u_i \hat{a}_{\bar{i}} + v_i \hat{a}_i^\dagger, \tag{32}$$

où l'état « \bar{i} » indique l'état symétrique par renversement du temps de « i ». La conservation (en moyenne) du nombre de particules impose $u_i^2 + v_i^2 = 1$ quelque soit i . L'état produit BCS a ainsi la forme :

$$|\Psi_{BCS}\rangle = \prod_{i>0} \eta_i \eta_{\bar{i}} |-\rangle, \quad (33)$$

que l'on peut réécrire⁵ :

$$|\Psi_{BCS}\rangle = \prod_{i>0} \left(u_i + v_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_{\bar{i}}^\dagger \right) |-\rangle. \quad (34)$$

La probabilité d'occupation de l'état i est v_i^2 . On voit d'après l'Eq.(34) que l'état BCS s'écrit comme une somme d'états appariés de nombres de particules différents. Le nombre de particules n'est plus une bonne symétrie, ce qui est le prix à payer pour garder une description en terme de champ moyen. L'application du théorème de Wick sur la fonction d'onde BCS nous donne une équation (eq. (24) simplifiée) dont on peut tirer la relation pour les nombres d'occupation [2, 25] que sont les v_i^2 :

$$v_i^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\epsilon_i - \lambda}{\sqrt{(\epsilon_i - \lambda)^2 + \Delta_i^2}} \right), \quad (35)$$

où ϵ_i est valeur propre du Hamiltonien de champ moyen \hat{h} . $\Delta_i = \Delta_{\bar{i}}$ est l'énergie d'appariement des nucléons de la paire $\{i, \bar{i}\}$, déduite de (30) : $\Delta_i = \langle i | \Delta_{\tau_i} | \bar{i} \rangle$. L'énergie d'appariement de paire ($2\Delta_i$) est aussi appelée énergie de « gap » : c'est l'énergie nécessaire pour briser une paire de Cooper. Elle est responsable des oscillations d'énergie de liaison entre noyaux pairs et impairs.

3.2 Résultats HF+BCS

L'implémentation d'un code HF+BCS a été réalisée avec les mêmes méthodes et simplifications que le code HF, en y ajoutant les corrélations d'appariement⁶. La force d'appariement utilisée a la même forme que (4) et est paramétrée par [13] : $t_{0p} = -248.5$ MeV et $t_{3p} = 4658.4$ MeV. Le noyau étudié est le même que dans l'étude Hartree-Fock : ${}^{90}_{40}\text{Zr}_{50}$.

Les effets de la superfluidité du noyau étant faibles, on s'attend à ce que les observables globales ne soient pas beaucoup changées, avec cependant des différences dans les observables microscopiques. Les calculs à l'approximation BCS donnent pour l'énergie $E = -994.4$ MeV et pour le rayon $R_{rms} = 4.11$ fm. Par rapport au cas HF, le système a gagné de l'énergie en s'appariant, et le rayon, observable globale du système, n'a pas ou peu changé.

Dans le noyau étudié, le ${}^{90}\text{Zr}$, les gaps individuels sont de l'ordre du MeV pour les neutrons et nuls pour les protons. En d'autres termes, seuls les neutrons sont appariés dans ce noyau. En effet, le ${}^{90}\text{Zr}$ a une fermeture de couche pour les protons, et donc le premier état au dessus du niveau de Fermi est trop haut en énergie pour permettre la diffusion de paires.

Le spectre en énergie des états de particule individuelle obtenu par le calcul HF+BCS est présenté sur la

⁵Les Eq.(33) et (34) sont identiques à un coefficient de normalisation près. Le produit est fait sur la moitié des états pour éviter les double-comptages.

⁶On ne couple dans ce modèle que des état liés, donc d'énergie individuelle négative.

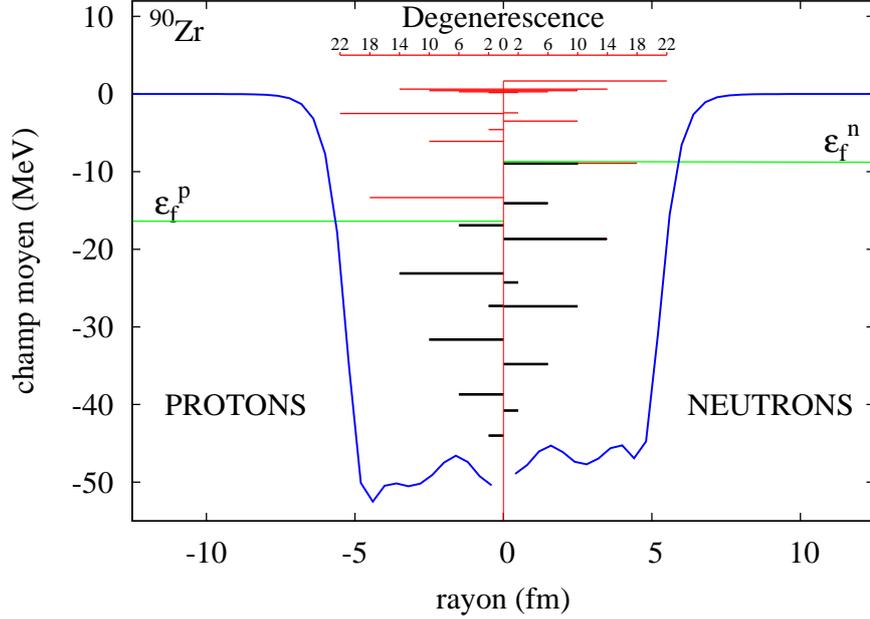


FIG. 2 – Les champs moyens protons (à gauche) et neutrons (à droite) du ^{90}Zr sont représentés en bleu. Les niveaux d'énergie individuelle apparaissent en barres horizontales rouges, avec une longueur proportionnelle à leur dégénérescence. Superposées à ces niveaux, leurs occupations relatives apparaissent en noir. Les niveaux de Fermi sont représentés en verts. Calculs HF+BCS.

FIG.2. On remarque que ces résultats sont quasi-identiques aux résultats HF. En effet, malgré l'appariement des neutrons, l'espacement entre les couches dont dépend la probabilité d'occupation (cf équation (35)) est très grand. La courbe présentant la dépendance en $\epsilon_k - \lambda$ du nombre d'occupation v_k^2 est donnée sur la FIG.3 pour un gap moyen $\Delta = 1$ MeV. On s'aperçoit que très vite la probabilité d'occupation tombe à zéro au-delà du niveau de Fermi. On retrouve de plus le résultat classique que les nucléons au voisinage de la surface de Fermi sont ceux qui ont le plus tendance à s'apparier. C'est ce que l'on voit sur la courbe bleue fine sur la figure FIG.3 qui représente l'évolution du produit $u_k v_k$ en fonction de l'énergie de l'état k . Ce produit quantifie, dans l'approximation BCS, l'appariement entre un état k et son état symétrique par renversement du temps. On voit qu'il est bien piqué à la surface de Fermi, alors que dans l'approximation HF il serait toujours nul.

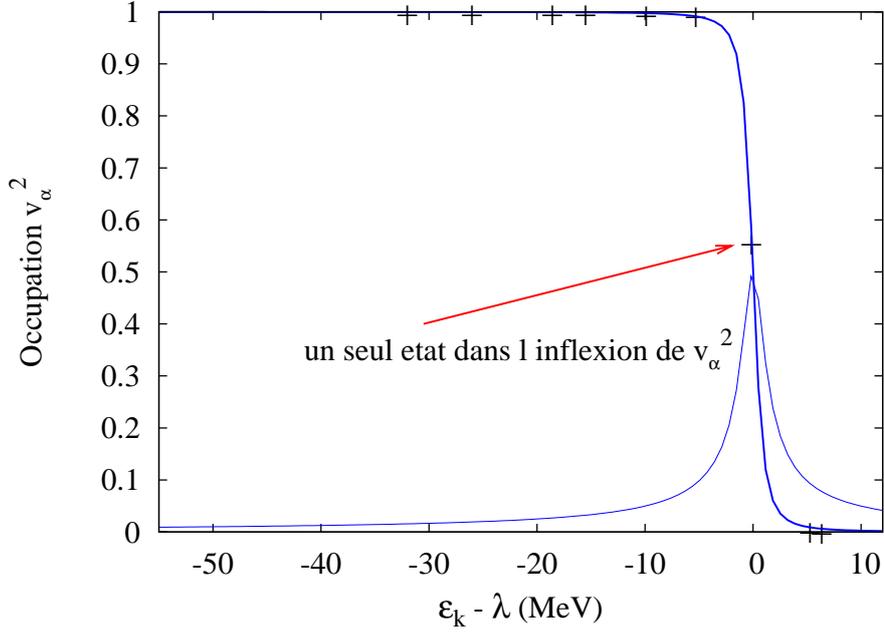


FIG. 3 – Courbe (en gras bleue) représentant l’occupation v_k^2 d’un état en fonction de $\epsilon_k - \lambda$ pour un gap « moyen » de 1 MeV, tirée de (35). Les signes « + » représentent les couples $(\epsilon_k - \lambda, v_k^2)$ obtenus par le code HF+BCS pour le noyau ^{90}Zr . La courbe fine de couleur bleue représente l’observable $u_i v_i$.

4 Théorie de champ moyen dépendant du temps

4.1 Hartree-Fock dépendant du temps (TDHF)

La théorie de champ moyen dépendant du temps TDHF repose elle aussi sur une méthode variationnelle. On doit désormais minimiser la fonctionnelle d’action :

$$S[\Psi] = \int_{t_0}^{t_1} \langle \Psi | \left(\hat{H} - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) | \Psi \rangle dt. \quad (36)$$

L’approximation TDHF consiste, de la même manière que pour la théorie HF statique, à restreindre l’espace variationnel aux états de particules indépendantes. Ainsi, la fonction d’onde à N corps que l’on considère à chaque instant est un déterminant de Slater.

Les équations TDHF

Rendre stationnaire l’équation (36) amène à résoudre les équations TDHF :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |i\rangle = \hat{h}[\rho(t)] |i\rangle. \quad (37)$$

Il est remarquable, du fait de l’auto-cohérence du système, que le Hamiltonien dépende de la densité à un corps et donc du temps. Cependant, si le pas en temps δt est assez petit, on peut considérer le Hamiltonien

de champ moyen constant entre t et $t + \delta t$. L'opérateur d'évolution $\hat{U}_{\delta t}$ sur les fonctions d'onde individuelles s'écrit alors simplement :

$$|i\rangle_{t+\delta t} = \hat{U}_{\delta t}(t, t + \delta t)|i\rangle_t = \exp\left(-i\frac{\hat{h}[\rho(t')]}{\hbar}\delta t\right)|i\rangle_t, \quad (38)$$

où la densité (donc le Hamiltonien) est estimée à $t' = t + \frac{\delta t}{2}$ de manière à assurer la conservation de l'énergie [9]. Enfin, il faut noter que le problème TDHF est adiabatique : on ne suit que les fonctions d'onde occupées du problème HF, sans se soucier du cas où il y ait un croisement dans les niveaux de particules individuelles. Cependant, puisque les nombres d'occupations changent avec l'appariement, il est à espérer que son inclusion dans TDHF autorise les nucléons à sauter d'un état à un autre, ce qui permettrait un traitement plus réaliste de la dynamique nucléaire.

Résultats TDHF

Une théorie de champ moyen dépendante du temps peut être appliquée à l'étude des dynamiques de collision. Cependant, nous nous sommes restreints à étudier les « modes de respiration » du noyau. Ainsi, en étudiant l'évolution d'un noyau (^{90}Zr) suite à une excitation monopolaire (*ie* une petite compression ou dilatation sphérique du noyau), il est possible d'étudier certains modes *collectifs* du noyau [27, 28]. Dans ce cas précis où l'on conserve la symétrie sphérique, on étudie ainsi des modes monopolaires, notamment la résonance géante monopolaire (GMR). Sur la FIG.4 est illustrée la réponse de la racine du rayon carré moyen à un potentiel extérieur $\hat{V}_{ext}(t) = k\hat{r}\delta(t - t_0)$ où k est l'intensité de l'excitation, choisie assez faible pour être considérée dans le régime de réponse linéaire. On peut voir que l'allure de cette courbe est une sinusoïde amortie. Son spectre est illustré sur la FIG.5. Elle est décomposée sur un mode principal : ce mode correspond au premier phonon de la GMR. On obtient un mode collectif de haute énergie $E_{GMR} \sim 24$ MeV dont l'ordre de grandeur est correct en comparaison à des calculs plus réalistes ($E_{GMR} \sim 20$ MeV, [29]). Ce type d'excitations collectives est souvent étudié en théorie de la réponse linéaire RPA⁷.

4.2 Dynamique avec appariement

Les équations TDHFB

Nous avons vu dans le cas statique que le principe variationnel nous amenait à résoudre un système d'équations aux valeurs propres pour les quasiparticules (cf Eq.(28)). La généralisation au cas dynamique découle du principe variationnel et aboutit aux équations TDHFB :

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix} U^\mu \\ V^\mu \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{h}_{\tau_\mu}[\rho(t), \kappa(t)] - \lambda_{\tau_\mu}(t) & \Delta_{\tau_\mu}[\rho(t), \kappa(t)] \\ -\Delta_{\tau_\mu}^*[\rho(t), \kappa(t)] & -(\hat{h}_{\tau_\mu}[\rho(t), \kappa(t)] - \lambda_{\tau_\mu}(t))^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U^\mu \\ V^\mu \end{pmatrix}. \quad (39)$$

Résoudre un tel problème consisterait donc à faire évoluer les quasiparticules indépendantes de la même manière que l'on a fait évoluer les fonctions d'onde Hartree-Fock, en utilisant l'opérateur d'évolution :

$$\hat{U}_{\delta t}(t, t + \delta t) = \exp\left(-i\frac{\hat{\mathcal{H}}[\rho(t'), \kappa(t'), \lambda(t')]}{\hbar}\delta t\right), \quad (40)$$

⁷Une manière d'obtenir la RPA est de linéariser les équations TDHF [2]

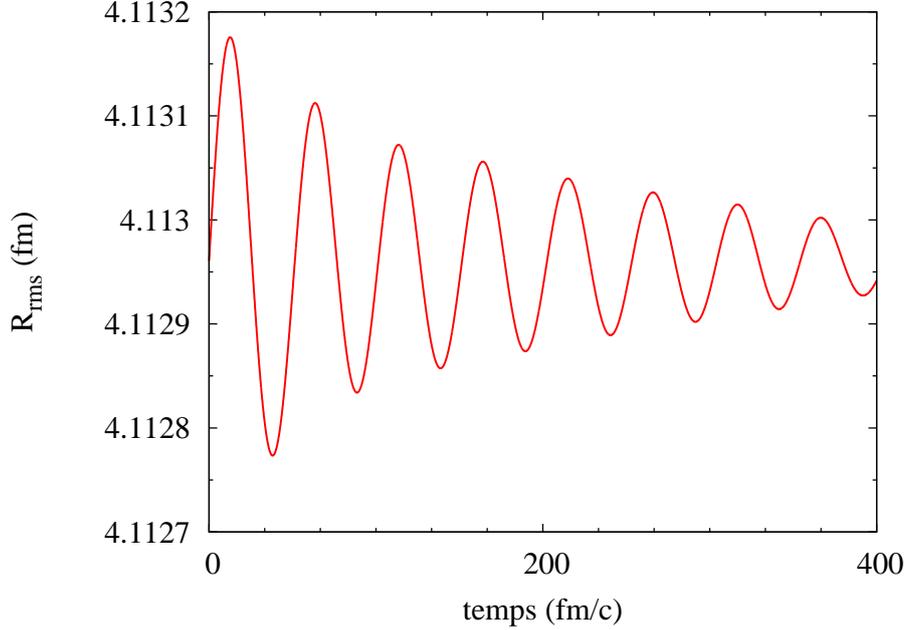


FIG. 4 – Réponse du rayon carré moyen R_{rms} suite à une excitation monopolaire sur le noyau ^{90}Zr .

où \mathcal{H} est la "supermatrice" de l'équation (39) et $t' = t + \frac{\delta t}{2}$. Cependant, la résolution de ces équations pose un problème conceptuel sur lequel il conviendra de s'attarder : la conservation du nombre de particules dans les dynamiques de collisions.

Résultats préliminaires

Un code TDHFB similaire au TDHF précédemment décrit est en cours de développement. Son exploitation fera l'objet d'une étude ultérieure. Nous nous limitons ici à une comparaison des dynamiques suite à une excitation monopolaire, entre un état apparié (HF+BCS) et un état qui ne l'est pas (HF), tous deux propagés en temps par un code TDHF *sans appariement*⁸. Une telle étude n'inclut pas la dynamique de l'appariement. Elle montre simplement les différences liées à la structure initiale des deux états avec et sans appariement. Le spectre de la réponse à une excitation monopolaire du noyau ^{90}Zr convergé par le code HF+BCS et évolué grâce au code TDHF est représenté sur la FIG.6. Il est superposé au même noyau obtenu initialement avec le code HF. Les résultats sont conformes à ceux obtenus dans le cas statique : la prise en compte des corrélations d'appariement n'ayant engendré que des différences minimales en ce qui concerne les propriétés macroscopiques (comme $\langle r^2 \rangle$ par exemple), il est normal que les différences dans leurs dynamiques soient tout aussi minimales.

⁸les nombres d'occupations des fonctions d'onde à une particule sont constants

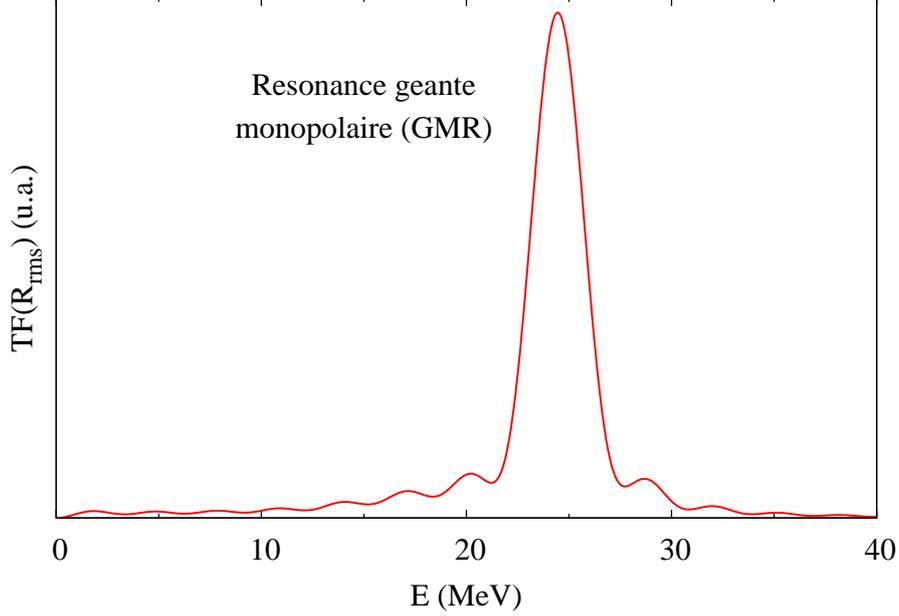


FIG. 5 – Spectre énergétique des modes de vibrations monopolaires du ^{90}Zr .

4.3 TDHFB et dynamique de collisions

Les collisions dans TDHF

Pour décrire une collision entre noyaux dans la théorie TDHF, on part des fonctions d’ondes de chaque noyau, $N1$ et $N2$, qui ont été convergées de manière indépendante grâce à un code HF statique. La fonction d’onde totale du système est donc le produit tensoriel des fonctions d’ondes de chaque noyau :

$$|\Psi_{tot}\rangle = |\Psi_{N1}\rangle \otimes |\Psi_{N2}\rangle, \quad (41)$$

avec la condition initiale que les deux noyaux n’ont pas de recouvrement. Un mouvement de translation est ensuite appliqué aux deux noyaux. L’évolution se fait ensuite en considérant le Hamiltonien total, calculé à partir de toutes les fonctions d’onde considérées dans le problème, de la même manière que la méthode décrite précédemment pour TDHF.

Les collisions dans TDHFB

En ce qui concerne une théorie TDHFB des collisions, un problème se pose. En effet, les équations HFB se résolvent usuellement sous contrainte pour conserver le nombre de particules du système en moyenne. Le paramètre de Lagrange associé, le potentiel chimique, est donc propre à *un problème HFB particulier*. Dans le cas dynamique, notamment lorsqu’il sera question de simuler des collisions à basse énergie, le cas général impliquera deux noyaux différents, ayant donc été convergés avec des potentiels chimiques différents. En ce qui concerne la fonction d’onde totale du système, elle sera toujours déterminée par l’équation (41) avec

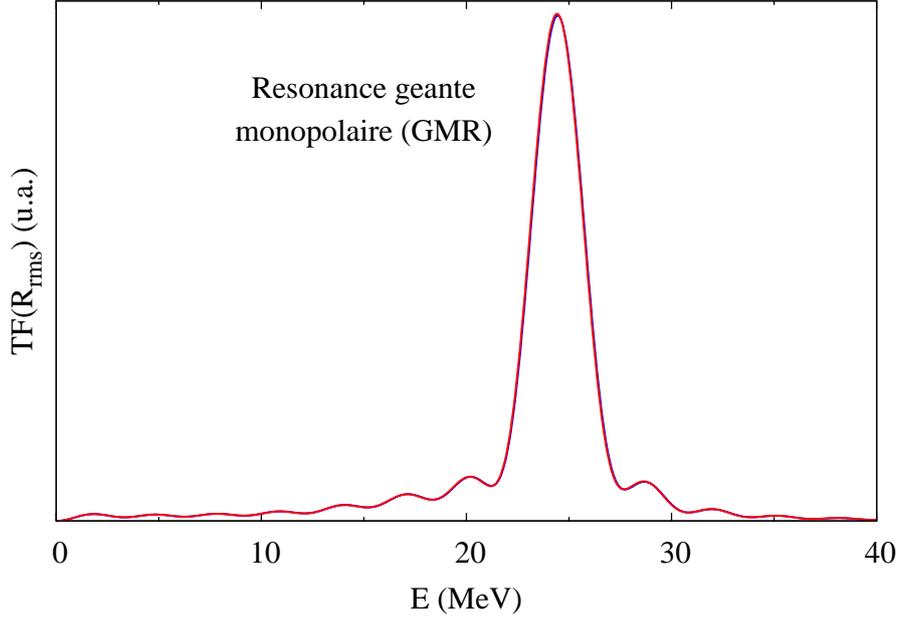


FIG. 6 – Spectre énergétique des modes de vibrations monopolaires du ^{90}Zr . calcul TDHF sur un état BCS (en rouge) et sur un état HF (en bleu). Les deux courbes se confondent.

toujours la condition initiale que les deux noyaux ne se recouvrent pas. Cependant, lors de l'évolution, garder un nombre de particules du système constant sans biaiser la physique lors de la collision s'avère difficile. On doit recourir à certaines prescriptions sur le paramètre de Lagrange ou utiliser une méthode allant au delà du champ moyen qui sera discutée dans la suite.

Prescription 1 : un seul paramètre de Lagrange

La manière la plus simple pour imposer au système un nombre de particules constant serait de rechercher par une méthode numérique le paramètre de Lagrange associé au système total donnant le bon nombre de particules à la fonction d'onde totale. Après avoir trouvé ce paramètre, qui a posteriori se trouve correspondre au potentiel chimique, on aurait ainsi un système avec le bon nombre de particules. Cependant, utiliser une telle méthode impliquerait des transferts spurieux de particules entre les noyaux, car alors le paramètre que l'on trouverait impliquerait avant même de débiter une évolution un échange de particule entre les noyaux N_1 et N_2 (la méthode trouverait en effet un potentiel chimique λ_{tot} entre λ_{N_1} et λ_{N_2} pour donner un nombre de particules à chaque noyau compris lui aussi entre N_{N_1} et N_{N_2}). Cet effet de vase communicant invalide une telle méthode.

Prescription 2 : deux paramètres de Lagrange

Une autre prescription serait de faire évoluer chaque fonction d'onde individuelle du problème avec un

paramètre de Lagrange distinct selon qu'elle appartenait à l'origine au noyau N1 ou N2, soit en quelque sorte à différencier les fonctions d'onde selon leur noyau d'origine en leur associant le paramètre de Lagrange λ_{N1} ou λ_{N2} . Une telle méthode conserverait le nombre total de particules et permettrait a priori de décrire une évolution réaliste. Cependant, on perdrait alors la signification de potentiel chimique des paramètres de Lagrange, et on aurait deux fragments en voie de sortie (après une réaction profondément inélastique par exemple) chacun d'eux composés d'une partie de fonctions d'onde d'indice λ_{N1} et une autre d'indice λ_{N2} mélangées. Quelle signification physique apporter alors aux paramètres de Lagrange ? De plus, on voit qu'il est possible d'avoir des transferts spurieux de particules entre les fragments en voie de sortie.

Au-delà du champ moyen : méthode des projections et TDGCM

Une autre possibilité consiste à se placer explicitement dans une approche au-delà du champ moyen en utilisant la méthode de projection. Cette méthode permet d'obtenir un système avec un bon nombre de particules. En effet, la seule contrainte à imposer au système $N = N1 + N2$ est de conserver le nombre total de particules. Une telle contrainte revient à appliquer au système le projecteur $\hat{\mathcal{P}}_N$ où :

$$\hat{\mathcal{P}}_N = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \exp\left(i\phi\left(\hat{N} - N\right)\right) d\phi. \quad (42)$$

Là encore, le système sera autorisé à téléporter des particules, de manière spurieuse, du noyau 1 au noyau 2 ou inversement, notamment lors de réactions de transfert. Il faudrait donc définir un nouvel opérateur construit à partir de projecteurs, avec des pondérations *physiques* pour les transferts de particules :

$$\hat{P}_N = \sum_{n=0}^{N/2} \alpha_n(t) \hat{\mathcal{P}}_{2n}^{(1)} \hat{\mathcal{P}}_{N-2n}^{(2)}, \quad (43)$$

les seules transferts de particules autorisés étant des transferts de paires de particules de l'espace (1) à l'espace (2). Les exposants (i) traduisent l'espace de Hilbert dans lequel on applique le projecteur $\hat{\mathcal{P}}$: (1) pour l'espace des fonctions d'onde initialement originaires du noyau N1 et (2) pour le noyau N2. Ces exposants correspondent bien aux fragments initiaux et non pas ceux en voie de sortie, qui peuvent chacun avoir de fonctions d'onde de (1) et de (2) . La détermination des coefficients $\alpha_n(t)$ se fait par la méthode variationnelle. C'est la théorie de la coordonnée génératrice dépendante du temps (TDGCM) [30].

5 Conclusions et perspectives

Nous avons passé en revue certaines méthodes de champ moyen appliquées au noyau. Il est clair, à la vue des résultats obtenus par les calculs de champ moyen statiques, que ces modèles auto-cohérents qui permettent une description microscopique du noyau sont d'une grande aide dans la compréhension des propriétés quantiques de ce dernier. Il en est ainsi en ce qui concerne les corrélations d'appariement. Les problèmes liés au développement d'une théorie de champ moyen dynamique ont été abordés, et des solutions, comme les méthodes de projection et de mélange de configurations (TDGCM), ont été introduites, laissant présager de futurs développements théoriques et numériques.

Il conviendra dans l'avenir de développer ces méthodes pour des cas *réalistes*, en vue d'obtenir un outil

d'interprétation et de prédiction de résultats expérimentaux. Les méthodes Hartree-Fock-Bogoliubov les plus complètes (notamment pour les noyaux déformés) permettent une description correcte des noyaux exotiques [26] dont l'étude expérimentale utilise les nouvelles générations de faisceaux radioactifs. L'étude théorique des dynamiques de réactions de ces noyaux, sont d'un grand intérêt pour la compréhension des phénomènes aux échelles nucléaires.

Remerciements

Je tiens à remercier Cédric Simenel de m'avoir proposé ce stage et de m'avoir accompagné dans mon travail. J'aimerais aussi remercier sincèrement Michael Bender et Karim Bennaceur, avec qui j'ai beaucoup appris et il m'a été très agréable de travailler. Je suis également très reconnaissant envers Philippe Chomaz et Hubert Flocard, pour les entrevues qu'ils m'ont accordées, leur aide et leur gentillesse. Un grand merci aussi à Thomas Duguet qui m'a fait connaître ce domaine de la physique, m'a donné l'envie de poursuivre dans cette voie, m'a fait rencontrer Cédric et qui a relu ce manuscrit. Je remercie enfin le laboratoire et la direction du SPPhN pour l'accueil et l'accompagnement chaleureux tout au long de ce stage. J'espère sincèrement avoir la chance de pouvoir poursuivre en thèse au sein de cette collaboration.

A Champ moyen et symétries

L'auto-cohérence entre les fonctions d'onde d'essai et le Hamiltonien dans les problèmes HF implique une relation étroite entre les symétries de ces deux entités. En effet, il apparaît dans l'équation aux valeurs propres (13), que notre système aura les symétries que l'on impose à la fonction d'onde d'essai à N corps.

Le cas spatial

Si on impose la symétrie sphérique au système, à chaque itération, le Hamiltonien calculé sera lui-même de symétrie sphérique car l'interaction nucléaire est invariante par rotation. Cependant, on remarque que si on brise cette symétrie en prenant par exemple une fonction d'onde d'essai déformée, on va pouvoir prendre en compte des corrélations spatiales entre nucléons qui font partie de l'interaction résiduelle. En effet, comme on peut le voir sur la figure FIG.7, considérant par exemple un nucléon au point A, il sera plus probable de trouver un autre nucléon au point B plutôt qu'au point C. Cela dit, on reste encore dans un problème de champ moyen puisque l'état du système s'écrit comme un état déformé de particules indépendantes.

Ainsi, si on part avec une fonction d'onde possédant le moins de symétries possible, qu'elles soient spatiales

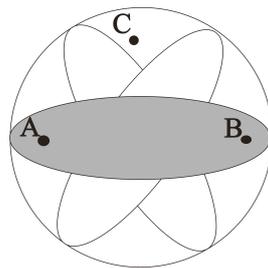


FIG. 7 – Schéma d'un noyau déformé

ou pas, on peut s'attendre à prendre en compte un maximum de corrélations de l'interaction résiduelle. En principe, les symétries du système se doivent d'être restaurées ensuite. Dans certains cas, on se contente simplement de les conserver en moyenne (comme le nombre de particules pour les théories HF+BCS et HFB). Pour une restauration exacte des symétries, il faut utiliser des méthodes de projection. Dans le cas de la

déformation, il faut ainsi projeter sur le bon moment angulaire (0^+ pour un système pair-pair).

Ces méthodes de restauration des symétries vont au-delà du champ moyen : elle dépassent l'approximation de particules indépendantes. En effet, après projection, l'état s'écrit souvent comme une somme d'états produits. Ces méthodes sont très utilisées pour décrire les noyaux déformés et les noyaux présentant des corrélations d'appariement (dans le cas où on ne conserve pas le bon nombre de particules en moyenne, mais où on projette sur l'état ayant un bon nombre de particules).

B Les algorithmes Hartree-Fock et TDHF

La symétrie sphérique

La méthode de résolution du problème Hartree-Fock passe par la résolution des équations aux valeurs propres (13). Dans nos calculs, la symétrie sphérique est imposée. Elle permet de simplifier le problème en ne considérant ainsi que les parties radiales $u_{n_i l_i}(r)$ des fonctions d'onde $\phi_i(\mathbf{r})$. Ainsi, les équations pour les fonctions d'onde à une particule s'écrivent :

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\hbar^2 l_i(l_i + 1)}{2mr^2} + \hat{U}_{\tau_i}(r) \right) u_{n_i l_i}(r) = \epsilon_{n_i l_i} u_{n_i l_i}(r). \quad (44)$$

Les fonctions d'onde individuelles totales s'écrivent alors :

$$\phi_i(\mathbf{r}) (\equiv \phi_{n_i l_i m_i}(\mathbf{r})) = \frac{u_{n_i l_i}(r)}{r} Y_{l_i m_i}(\theta, \Phi), \quad (45)$$

où les Y_{lm} sont les harmoniques sphériques, et les (n, l, m) sont respectivement les nombres quantiques principal, orbital, et azymutal. Les calculs sont ainsi simplifiés et reviennent à la résolution d'un problème à une dimension.

L'algorithme Hartree-Fock

Les fonctions d'onde d'essai que l'on choisit sont celles de l'oscillateur harmonique isotrope. Partant de ces fonctions d'onde d'essai, l'algorithme de résolution du problème Hartree-Fock utilisé procède comme suit :

1. on calcule le Hamiltonien HF,
2. on applique l'opérateur $e^{-\beta \hat{h}}$ aux fonctions d'onde (méthode dite du temps imaginaire) [31], où β est petit,
3. on orthonormalise les fonctions d'onde obtenues par un procédé de Graam-Schmidt
4. puis on recommence en (1) jusqu'à la convergence des énergies...

L'algorithme TDHF

L'évolution TDHF se fait par passage du temps imaginaire au temps réel ($e^{-\beta \hat{h}} \rightarrow e^{-i\hat{h} \frac{\delta t}{\hbar}}$). L'étape (3) n'est plus nécessaire car cet opérateur dévolution est unitaire. On recommence donc les étapes jusqu'à avoir la fenêtre en temps voulue.

Références

- [1] www.ganil.fr
- [2] P. Ring and P. Schuck, *The Nuclear Many-Body Problem*, Springer, Berlin, 1980.
- [3] D. R. Hartree, Proc. Cambridge Philos. Soc. **24**, 89 (1928).
- [4] V. A. Fock, Z. Phys. **61**, 126 (1930).
- [5] D. Vautherin and D. M. Brink, Phys. Rev. C **5**, 626 (1972).
- [6] J. W. Negele, Rev. Mod. Phys., Vol. **54**, No. 4, (1982).
- [7] Y. M. Engel and al., Nucl. Phys. A **249**, 215 (1975).
- [8] P. Bonche, S. Koonin and J. W. Negele, Phys. Rev. C **13** ; 1226 (1976).
- [9] H. Flocard, S. E. Koonin and M. S. Weiss, Phys. Rev. C **17**, 1682 (1978).
- [10] P. Bonche, H. Flocard and P.-H. Heenen, Comp. Phys. Com. **171**, 49 (2005).
- [11] J. Bardeen, L. N. Cooper, J. R. Schrieffer, Phys. Rev. **108**, 1175 (1957).
- [12] M. Bender, P.-H. Heenen, and P.-G. Reinhard, Rev. Mod. Phys., Vol. **75** (2003).
- [13] K. Bennaceur and J. Dobaczewski, Comp. Phys. Com. **168**, 96 (2005).
- [14] P. Bonche, H. Flocard and P.-H. Heenen, Nucl. Phys. A **467**, 115 (1987).
- [15] J. Blocki, H. Flocard, Nucl. Phys. A **273**, 45 (1976).
- [16] A. Messiah, *Mécanique Quantique*, Dunod, Paris, (1960).
- [17] J. Meyer, Ann. Phys. Fr. **28** (2003).
- [18] T. Duguet, *Problème à N corps nucléaire et force effective dans les méthodes du champ moyen autocohérent*, Thèse de doctorat de l'Université Paris 6, (2002).
- [19] B. D. Day, Rev. Mod. Phys. **39**, 719 (1967).
- [20] T. Skyrme, Phil. Mag. **1**, 1043 (1956).
- [21] G.C. Wick, Phys. Rev., **80**, 268 (1950).
- [22] H. A. Bethe and R. F. Bracher, Rev. Mod. Phys. **8**, 82 (1936).
- [23] C. F. von Weizsäcker, Z. Phys. **96**, 431 (1935).
- [24] N. N. Bogoliubov, Soviet. Phys. JETP **7**, 41 (1958).
- [25] J.-F. Berger, *Approches de champ moyen et au-delà*, Cours de l'école internationale Joliot-Curie de physique nucléaire (1991).
- [26] J. Dobaczewski, H. Flocard and J. Treiner, Nucl. Phys. A **422**, 103 (1984).
- [27] C. Simenel, *Dynamique nucléaire autour de la barrière : de la fusion à l'évaporation*, Thèse de doctorat de l'Université de Caen, (2003).
- [28] Ph. Chomaz, *Collective excitations in nuclei*, Cours de l'école internationale Joliot-Curie de physique nucléaire (1997).

- [29] C. Simenel and Ph. Chomaz, Phys. Rev. C **68**, 024302 (2003).
- [30] P.-G. Reinhard, R. Y. Cusson and K. Goeke, Nucl. Phys. A **398**, 141 (1983).
- [31] K. T. R. Davies, H. Flocard, S. Krieger and M. S. Weiss, Nucl. Phys. A **342**, 111 (1980).