

UNIVERSITÉ PARIS-SUD

ÉCOLE DOCTORALE : ED 517 PNC
LABORATOIRE : CEA/DAM/DIF - CEA/DSM/IRFU

DISCIPLINE : PHYSIQUE

THÈSE DE DOCTORAT

Soutenue le 25/09/2015 par

Jean-François LEMAÎTRE

Etude des fragments de fission au point de scission avec le modèle SPY

Directeur de thèse :	M. Jean-Luc Sida	Directeur de thèse (CEA/DSM, Saclay)
<u>Composition du jury :</u>		
Président du jury :	M. Elias Khan	Président du jury (CNRS-IPNO, Orsay)
Rapporteurs :	Mme. Beatriz Jurado M. Arjan Plompen	Rapporteur (CNRS-CENBG, Bordeaux) Rapporteur (EC-JRC-IRMM, Geel)
Examineurs :	M. Dominique Durand M. Olivier Sérot	Examineur (CNRS-LPC, Caen) Examineur (CEA/DEN, Cadarache)
Invités :	M. Stéphane Hilaire M. Stefano Panebianco	Co-encadrant (CEA/DAM/DIF) Co-encadrant (CEA/DSM, Saclay)

Remerciements



Je commencerais par remercier les différents membres de mon jury de thèse : mes rapporteurs Beatriz et Arjan pour la qualité de leurs remarques, les membres du jury Dominique et Olivier pour la discussion lors de la soutenance et Elias pour avoir accepté de présider le jury. J'ai pu bénéficier de la collaboration Cophynu dans laquelle j'ai pu interagir avec l'ensemble de la communauté de physique nucléaire du CEA. Je remercie tout spécialement Jean-Luc de m'avoir si bien encadré durant ma thèse et de m'avoir donné de si bons conseils ainsi que Stéphane et Stefano pour la qualité de leur encadrement. J'ai une pensée particulière pour les personnes de qualité que j'ai rencontrées au magistère, à la Pacaterie, durant mes stages et ma thèse. Je remercie également les différentes communautés présentes sur internet pour les nombreux forums et tutoriels qu'elles ont créés et entretiennent qui m'ont permis de résoudre mes problèmes de code. Je ne remercierai pas nommément toutes les personnes qui ont compté pour moi et que j'ai rencontrées durant mon cursus scolaire mais beaucoup savent en leur for intérieur que je les remercie.

En dernier lieu je tiens à remercier ma famille pour leur soutien tout le long de ma scolarité.

Orsay, le 13 Octobre 2015.

TABLE DES MATIÈRES

REMERCIEMENTS	iii
TABLE DES MATIÈRES	iv
INTRODUCTION	1
1 MODÉLISATION DE LA FISSION AVEC SPY	5
1.1 MODÈLES DE FISSION	7
1.2 LE MODÈLE SPY, VERSION DE RÉFÉRENCE	9
1.2.1 Un modèle de point de scission	9
1.2.2 Un modèle statistique	21
1.2.3 Observables accessibles par SPY	24
1.3 SYNTHÈSE	29
2 RÉSULTATS & SYSTÉMATIQUES	31
2.1 CAS DE L'URANIUM 235 ET DU CALIFORNIUM 252	33
2.1.1 Rendements de fission	33
2.1.2 Energie cinétique	36
2.1.3 Neutrons évaporés	37
2.2 EXTENSION À L'ENSEMBLE DES NOYAUX SYNTHÉTISABLES	40
2.2.1 Fission des actinides	40
2.2.2 Fission des actinides légers et des transuraniens	40
2.2.3 TKE des transuraniens	43
2.3 SYSTÉMATIQUES SUR L'ENSEMBLE DES NOYAUX LIÉS	44
2.3.1 Mode de fission	44
2.3.2 Incomplétude des distributions des rendements de fission	47
2.3.3 Neutrons évaporés	48
2.3.4 Energie cinétique totale & déformation moyenne	48
2.4 ÉTUDE DE QUELQUES CHÂÎNES ISOTOPIQUES ET ISOTONIQUES	52
2.4.1 Chaîne isotopique de l'uranium	52
2.4.2 Chaîne isotopique du dubnium	54
2.4.3 Chaîne isotopique du mercure	56
2.4.4 Chaîne isotopique $N_{CN} = 165$	57
2.5 SYNTHÈSE DES RÉSULTATS OBTENUS	58
3 CONSIDÉRATIONS SUR LA DISTRIBUTION DE CHARGE DU SYSTÈME À LA SCISSION	59

3.1	IMPACT DE LA DESCRIPTION DE LA CHARGE D'UN FRAGMENT	61
3.1.1	Distribution de charge des fragments	61
3.1.2	Impact de la nature de la déformation des fragments	62
3.2	IMPACT DE LA DÉFINITION DU POINT DE SCISSION	68
3.2.1	Effet de la distance de scission	68
3.2.2	Utilisation des distributions de charge HFB	70
3.2.3	Redéfinition de la scission	76
3.3	SYNTHÈSE DE L'ÉTUDE SUR LA DISTRIBUTION DE CHARGE DU SYSTÈME À LA SCISSION	79
4	IMPORTANCE DE LA STRUCTURE NUCLÉAIRE DANS LA DESCRIPTION DES OBSERVABLES	81
4.1	ÉNERGIE INDIVIDUELLE D'UN FRAGMENT	83
4.1.1	Impact de la structure nucléaire	86
4.1.2	Impact de l'appariement	89
4.1.3	Impact de la table de masse	89
4.1.4	Impact de l'interaction	91
4.2	DÉNOMBREMENT DES ÉTATS DU SYSTÈME À LA SCISSION	95
4.2.1	Impact de l'ensemble statistique	95
4.2.2	Densité d'états type gaz de Fermi	98
4.2.3	Densité d'états microscopiques	100
4.3	ÉTAT LE PLUS AVANCÉ DU MODÈLE	105
4.3.1	Fraction d'énergie disponible moyenne	105
4.3.2	Rendements de fission	106
4.3.3	Distribution en énergie cinétique	107
4.3.4	Distributions du nombre de neutrons évaporés	108
4.3.5	Synthèse des avancées du modèle SPY	108
	CONCLUSION GÉNÉRALE	109
A	COMPLÉMENTS SUR L'INTERACTION COULOMBIENNE	113
A.1	ELLIPSOÏDE : LIEN ENTRE DÉFORMATION & GÉOMÉTRIE	113
A.2	QUADRUPOLE : LIEN ENTRE DÉFORMATION & GÉOMÉTRIE	115
A.3	FORMULE DE COHEN & SWIATECKI	116
A.4	ÉNERGIE D'INTERACTION ENTRE DEUX CYLINDRES CREUX	118
B	DENSITÉ D'ÉTATS D'UN GAZ DE FERMIONS	121
B.1	ÉTAT INDIVIDUEL - STATISTIQUE DE FERMI-DIRAC	121
B.2	CALCUL DE LA DENSITÉ D'ÉTATS $\rho(E^*)$	122
B.2.1	Calcul de Sommerfeld de la statistique de Fermi	122
B.2.2	Calcul de l'énergie interne et du nombre de particules	125
B.2.3	Expression de $\rho(E^*)$	128
B.3	DENSITÉ D'ÉTATS D'UN NOYAU	130
C	SUPPRESSION DES EFFETS D'APPARIEMENT	131
C.1	APPARIEMENT DE L'ÉTAT FONDAMENTAL	131
C.1.1	Interpolation linéaire	131

C.1.2 Interpolation quadratique	132
C.2 APPARIEMENT DES ÉTATS DÉFORMÉS	133
BIBLIOGRAPHIE	135
NOTATIONS	139

Introduction



Le travail de doctorat porte sur la modélisation de la dernière étape du processus de fission : le point de scission. Le modèle développé dans cette thèse, appelé SPY, est un modèle thermodynamique, basé sur des ingrédients issus d'une théorie microscopique de champ moyen utilisant l'interaction effective de Gogny. L'objectif est d'étudier le rôle de la structure des fragments de fission dans la détermination des principales observables expérimentales tel que les rendements, les distributions en énergie cinétique ou le nombre moyen de neutrons évaporés.

Ce travail se situe dans le long processus de compréhension du noyau atomique et de la fission. Cette branche de la physique "naît" en 1896 avec la découverte du premier processus nucléaire observé par Henri Becquerel, la radioactivité. Après cet acte de naissance due en partie au hasard, l'enfance de la physique nucléaire est jalonnée par les découvertes et les caractérisations des rayonnements α , β et γ .

Le rayonnement α est découvert en 1899 par Ernest Rutherford et identifié comme étant un noyau d'hélium en 1908. Le rayonnement β est identifié comme étant une émission d'électron en 1900. Finalement le rayonnement γ est découvert par Paul Villard en 1900, sa nature électromagnétique est révélée en 1914. En 1901, Rutherford et Frederick Soddy montrent que la radioactivité α et β impliquent la transmutation d'atomes et, douze ans plus tard, les lois de Soddy sont établies de manière indépendante par Kasimir Faján et Frederick Soddy. Parallèlement à la découverte de ces rayonnements, le modèle de l'atome se développe. Grâce à son expérience de diffusion de particules α sur une feuille d'or réalisée en 1909, Rutherford met en défaut le modèle du *plum pudding* de J.J. Thomson en 1911. Dans le modèle, dit planétaire, de Rutherford, l'ensemble de la masse d'un atome est concentré dans un petit volume : le noyau de l'atome. Ce noyau est chargé positivement et autour de lui orbitent les électrons. Ce modèle de l'atome est perfectionné par Niels Bohr en 1913 en postulant l'existence d'orbites circulaires stables pour les électrons.

La physique nucléaire entre dans sa période d'adolescence en 1919 lorsque Rutherford réalise la première transmutation induite artificiellement avec la réaction $^{14}\text{N}(\alpha, p)^{17}\text{O}$. Ainsi il ouvre la voie à l'étude des réactions nucléaires induites par l'Homme. En 1930, W. Bothe et H. Becker, observent que des éléments légers, bombardés par des particules α , émettent des rayons "ultra pénétrants" qu'ils supposent être des rayons γ très énergétiques, estimés à 50 MeV par Irène et Frédéric Joliot-Curie en 1932. La même année, en partant des résultats issus du travail des Joliot-Curie, James Chadwick fait la découverte du neutron grâce à l'étude détaillée

la réaction ${}^9\text{Be}(\alpha, n){}^{12}\text{C}$. La découverte du neutron oblige à reconsidérer la composition du noyau qui, jusqu'ici, était supposé composé de protons, d'électrons et de particules α . Heisenberg montre en 1934 qu'un noyau peut être composé de protons et neutrons. La même année, Frédéric et Irène Joliot-Curie découvrent qu'il est possible de rendre radioactif un noyau. Ils parviennent à produire du phosphore 30, radioactif β^+ par la réaction ${}^{27}\text{Al}(\alpha, n){}^{30}\text{P}$. Comme le suggéra Fermi, il est aussi possible d'induire de la radioactivité artificielle en utilisant des neutrons. A cause de la barrière coulombienne, seuls les éléments légers peuvent être activés par des particules α alors que les neutrons, insensibles à cette barrière, peuvent activer facilement des noyaux légers comme lourds.

D'un point de vue théorique, George Gamow formule, en 1928-1929, une théorie pour décrire la décroissance α d'un noyau où la particule α s'échappe du noyau en traversant la barrière coulombienne par effet tunnel. Selon cette théorie, dans le cas d'une désintégration spontanée du noyau, l'émission d'une particule ayant une charge supérieure à celle de la particule α est impossible. Et en 1936, il montre que c'est aussi le cas lors d'une désintégration induite. La théorie de la décroissance β , mettant en jeu un proton et un neutron, est établie par Enrico Fermi en 1934. Parallèlement à cela, deux modèles du noyau de type goutte liquide sont développés dans les années 30. En 1930, Gamow introduit l'idée que le noyau pouvait être comparé à une goutte liquide où les constituants du noyaux : protons, neutrons et α sont confinés grâce à la tension de surface. En 1936, Bohr propose une autre version de la goutte liquide pour décrire les réactions nucléaires où un noyau composé est thermalisé au cours de la réaction et se comporte comme une goutte oscillante. L'émission de particules est alors considéré comme étant un mécanisme d'évaporation. Cependant, dans le cas de réactions induites par neutrons, les seules voies de sorties envisagées par les deux modèles sont les décroissances α et β plus la capture neutronique et l'émission d'un proton. Le modèle de Bohr envisage également la dislocation du noyau si le neutron incident est très énergétique [1].

C'est dans ce contexte que l'histoire de la découverte de la fission commence, en 1934, lorsque Fermi essaya de produire des éléments au delà de $Z = 92$ lors d'expériences de bombardement de l'uranium avec des neutrons lents. Ida Noddack lui objecta qu'il était envisageable que les noyaux lourds bombardés par des neutrons pouvaient se rompre en plusieurs gros fragments. Le groupe de Berlin : Lise Meitner, Otto Hahn et Friedrich Strassman reproduisirent l'expérience de Fermi et exclurent la possible production d'éléments entre le mercure ($Z = 80$) et l'uranium ($Z = 92$) et ils en conclurent, dans un premier temps, que cette réaction devait produire l'élément $Z = 93$. Néanmoins ils furent incapable d'en expliquer le mécanisme de formation [1]. Par la suite les réactions : (n, α) , $(n, 2n)$ et $(n,)$ suivies d'une ou plusieurs désintégrations β^- furent envisagés pour expliquer la formation d'éléments transuraniens mais des anomalies firent leurs apparitions au cours de leurs recherches [1] pour comprendre le mécanisme de synthèse. La dernière anomalie fut la découverte, le 19 décembre 1938, de la présence de baryum suite au bombardement de l'uranium. En s'appuyant sur le modèle de la goutte liquide de Bohr, Meitner comprit que la présence de baryum était due à la fission de l'uranium.

La découverte de la fission fit entrer la physique nucléaire dans l'âge adulte. Il est désormais possible d'étudier les propriétés de noyaux exotiques loin de la vallée de stabilité et de tester le modèle en couche du noyau développé par Eugène Paul Wigner, Maria Goeppert Mayer et J. Hans P. Jense en 1949. L'étude de la fission permet de sonder les liens entre les propriétés statiques du noyau : la structure nucléaire et les propriétés dynamiques du noyau : la réaction nucléaire.

Plus de 75 ans après sa découverte, la compréhension de ce phénomène présente encore des difficultés théoriques dues à sa complexité. Ces difficultés proviennent en partie de l'incapacité, d'un point de vue expérimental, de suivre la fission d'un noyau depuis le noyau composé jusqu'à la formation des fragments pour en connaître chaque étape.

Historiquement, le premier modèle de fission est le modèle de la goutte liquide. Il se base sur des considérations hydrostatiques, le noyau se comportant comme un fluide. Lorsque cette goutte de fluide est bombardée par un neutron, elle se met à osciller et se scinde en deux. D'après ce modèle, tous les noyaux fissionnent symétriquement, ce qui n'est pas le cas en réalité. Par la suite, divers améliorations ont été effectuées afin d'interpréter la nature asymétrique de la fission de l'uranium 235 mais sans réel succès. Parmi ces améliorations, il y avait l'introduction d'effets dynamiques tels que la viscosité, la rotation du fluide ou encore la rupture aléatoire du col.

Le premier modèle à être en mesure d'expliquer la nature asymétrique de la fission est le modèle de Fong [2], établi en 1953. Il s'agit du premier modèle statistique au point de scission ; il suppose un équilibre thermodynamique à la scission. La probabilité d'une configuration est proportionnelle à sa densité d'états. La nature asymétrique de la fission de l'uranium s'explique alors par la structure nucléaire des fragments.

Le modèle de Wilkins *et al*, développé en 1976, enrichit le modèle de Fong en prenant en compte la déformation des fragments. Dans ce modèle, les fragments sont modélisés par des ellipsoïdes de révolution coaxiaux distants de 1.4 fm. Contrairement au modèle de Fong, le modèle de Wilkins *et al* utilise une description canonique pour la statistique, d'où l'utilisation d'une température collective. La probabilité de formation d'une fragmentation est déterminée à partir de l'énergie potentielle du système à la scission, elle même déterminée à partir des énergies individuelles des fragments. Cette énergie individuelle est la somme d'un terme de goutte liquide, d'une correction de couche et d'un terme d'appariement. Ainsi les rendements de fission obtenus peuvent être corrélés à la structure nucléaire des fragments via leur correction de couche. Le nombre de systèmes fissionnant étudiés est assez important, depuis les actinides légers jusqu'au fermium. La transition entre la fission symétrique et la fission asymétrique est interprétée à l'aide de l'évolution des corrections de couche déformée protons et neutrons des fragments. Un certain nombre d'études de sensibilité aux différents paramètres du modèle est effectuée.

Le modèle SPY s'inscrit dans la lignée de ces deux modèles. Il a pour ambition de décrire les distributions des fragments de fission en se basant sur une description statistique du système à la scission le plus exactement possible grâce à

l'utilisation des données issues des calculs microscopiques (HFB). Contrairement aux modèles phénoménologiques, le modèle SPY est en mesure de calculer les observables associées aux fragments de fission de n'importe quel système fissionnant. Ainsi le modèle SPY est l'un des rares "générateur de fission" actuellement disponible, notamment pour la communauté des astrophysiciens. Ce travail de doctorat exploite et poursuit le développement du modèle SPY initié dans la thèse de Sophie Heinrich [3]. La version de référence du modèle SPY [4] est déjà une version améliorée par rapport à celui de Sophie Heinrich. Les formes ellipsoïdales ont été remplacées par des formes quadrupolaires qui constituent une meilleure approximation des fragments. La paramétrisation de la déformation d'un fragment est à présent basée sur son moment quadrupolaire. D'un point de vue informatique, le code a été réécrit et optimisé en vue d'utilisations étendues, avec une meilleure gestion des différents choix dans les ingrédients du modèle.

L'exploitation du modèle SPY passe par la comparaison avec le maximum de données expérimentales et les interprète en étudiant les corrélations avec des grandeurs non-observables telles que la déformation des fragments. Grâce à sa rapidité de calcul et à son absence de limitation à une région particulière de la carte des noyaux, il est possible d'établir des systématiques sur un très grand nombre de systèmes fissionnants. Grâce à sa structure modulaire, des études de sensibilité vis à vis de la description des fragments ont pu facilement être menées.

Ce manuscrit est structuré en quatre chapitres. Le premier chapitre portera sur la problématique de la modélisation, après quelques rappels sur le processus de fission. Il permettra de définir les hypothèses du modèle, les ingrédients utilisés et les observables accessibles au modèle. Ces hypothèses constituent la solution de référence du modèle. Dans le second chapitre, les prédictions du modèle SPY pour la fission thermique de l'uranium 235 et la fission spontanée du californium 252 seront comparées aux données expérimentales. Ensuite les prédictions seront étendues à l'ensemble des systèmes fissionnants actuellement mesurés. A la fin de ce chapitre des systématiques étendues bien au delà de la région des noyaux actuellement synthétisables seront présentées. Les deux derniers chapitres porteront sur des études de sensibilité du modèle et sur les améliorations effectuées. La solution de référence du modèle est progressivement abandonnée au profit d'une solution plus sophistiquée. Le troisième chapitre sera consacré à l'utilisation originale de la distribution de charge à la scission obtenue dans le cadre des calculs microscopiques HFB. L'hypothèse sur la forme des fragments sera discutée dans un premier temps. Puis la définition du point de scission sera revisitée. Dans le dernier chapitre, des études de sensibilité des observables vis à vis des ingrédients utilisés seront présentées. La nécessité d'une description sophistiquée du noyau sera discutée. Finalement, les prédictions du modèle SPY dans sa version la plus avancée seront présentées pour la fission thermique de l'uranium 235 et la fission spontanée du californium 252.

Modélisation de la fission *avec* **SPY**

1

SOMMAIRE

1.1	MODÈLES DE FISSION	7
1.2	LE MODÈLE SPY, VERSION DE RÉFÉRENCE	9
1.2.1	Un modèle de point de scission	9
1.2.2	Un modèle statistique	21
1.2.3	Observables accessibles par SPY	24
1.3	SYNTHÈSE	29



COMMENT modéliser le processus de fission ? La fission nucléaire est un processus de désexcitation où le noyau est profondément modifié, contrairement aux processus de désexcitation par émission de photons γ , de neutrons ou par décroissance β^- . La description de l'ensemble du processus nécessite des connaissances sur le mécanisme de formation du noyau fissionnant, sur la structure nucléaire et sur la dynamique du système au cours de la fission. La complexité de ce phénomène est à l'origine des difficultés théoriques encore rencontrées à l'heure actuelle pour le décrire dans le cadre d'une théorie unique.

Quelles sont les approximations possibles ? Quelle est l'influence de l'état initial du système sur son état final ? La dynamique du système entre ces deux états a-t-elle un impact sur l'état final ? Pour apporter des éléments de réponses à ces questions, divers modèles ont été développés depuis la découverte de la fission du noyau et, entre autres, le modèle SPY.

1.1 MODÈLES DE FISSION

Le processus de fission peut être, de manière schématique, décomposé en quatre étapes. Tout d'abord il y a formation du système fissionnant, que ce soit dans un état excité, suite à la capture d'une particule dans le cas d'une fission induite, ou bien dans son état fondamental dans le cas d'une fission spontanée.

Puis ce système fissionnant se déforme de plus en plus jusqu'à franchir la barrière de fission, au niveau d'un point selle. Cette barrière de potentiel est le résultat de la compétition entre l'interaction nucléaire attractive entre les nucléons et la répulsion coulombienne entre les protons. La barrière de fission est franchie par effet tunnel lorsque l'énergie d'excitation du système est inférieure à la hauteur de la barrière, ce qui est le cas lors d'une fission spontanée. Dans le cas d'une fission induite par un projectile, le système peut être suffisamment excité pour que la barrière de fission soit franchissable sans effet tunnel.

Une fois cette barrière franchie, la fission du noyau est irréversible : le système se déforme davantage et un col se développe. Puis ce col se rompt aboutissant à la formation de deux, parfois trois, fragments excités dit primaires. Cet instant définit la scission du système.

Une fois séparés, ces fragments se désexcitent principalement par émission de neutrons. Lorsque l'énergie d'excitation devient inférieure à l'énergie de liaison d'un neutron, les fragments se désexcitent par émission de photons gamma. Après évaporation de neutrons et de photons gamma, les fragments sont faiblement excités mais riches en neutrons d'où une instabilité vis à vis de l'interaction faible. Cette instabilité est responsable de la décroissance β^- des fragments vers la vallée de stabilité. Cette décroissance peut être accompagnée de l'émission de neutrons retardés et peut durer des années.

A chacune de ces étapes correspond une classe de modèles schématisée sur la figure 1.1. Chaque classe de modèles est associée à un certain nombre d'observables. La première classe concerne la modélisation du mécanisme de formation du système fissionnant. Plusieurs voies de sortie, dont la fission, sont possibles lorsque le système interagit avec une particule : proton, neutron, photon ... Par exemple, dans le cas d'une réaction avec un neutron, il peut y avoir diffusion élastique ou inélastique $X(n, n')X^*$, transfert $X(n, p)Y$ ou capture radiative $X(n, \gamma)Y$, ou capture suivie d'une fission $X(n, f)$. Ces modèles ont pour objectif de comprendre la relation entre les différentes voies de sortie et de prédire, entre autres, les sections efficaces des divers réactions.

La deuxième classe se focalise sur le chemin de fission, sa forme et la hauteur de la barrière qui sont directement reliés à la probabilité de fission. L'objectif principal de ces modèles est de déterminer les caractéristiques des barrières afin de prédire le coefficient de transition. Les deux classes de modèles précédentes sont liées car la compétition entre la fission et les autres voies de désexcitation est en partie liée à la différence de hauteur entre la barrière de fission et l'énergie de liaison des particules que le système peut émettre : γ, n, p, α .

La troisième classe concerne l'évolution du système du point selle jusqu'au point de scission. Les modèles de cette classe se focalisent sur la formation des fragments afin de prédire leur probabilité de formation (aussi appelée rendements

de fission) pour un système fissionnant donné ainsi que les propriétés associées aux fragments telles que l'énergie cinétique ou la déformation.

La dernière classe regroupe les modèles s'intéressant à la manière dont un fragment peut se désexciter : par émission de neutrons, de photons ou bien par décroissance β^- . Ainsi ces modèles prédisent les spectres d'émission de neutrons, de photons γ , d'électrons et de neutrinos.

Il existe des dépendances plus ou moins fortes entre les différentes classes de modèles. Par exemple, la cinématique de la voie d'entrée (moment cinétique, énergie d'excitation ...) peut, selon les modèles utilisés, avoir un impact important sur la voie de sortie (rendement de fission, spectre d'émission des différentes particules). De même, le nombre de neutrons retardés dépend de l'énergie d'excitation et de la distribution des fragments primaires. Ces relations de dépendance sont symbolisées par l'encadré "Impact ?" sur la figure 1.1. L'impact d'une classe sur la suivante dépend du modèle choisi. Un modèle peut être englobé dans plusieurs classes, par exemple, une description microscopique de la fission d'aide d'un modèle de champ moyen (par exemple [5]) permet de décrire la topologie de la barrière de fission et l'évolution du système depuis le point selle jusqu'au point de scission. Une comparaison entre les observables prédites par un modèle, par exemple les rendements de fission, et les données expérimentales permet de valider la pertinence du modèle. Cette comparaison permet également de sonder les relations de dépendance entre les différentes classes de modèles pour savoir dans quelle mesure les différentes étapes du processus de fission sont indépendantes les unes des autres. Cette démarche est schématisée sur la figure 1.1 par la boucle de rétroaction partant des observables vers les différentes classes de modèles ainsi que vers les liens entre les classes.

Le modèle SPY appartient à la troisième classe de modèles puisqu'il se focalise sur la formation des fragments.

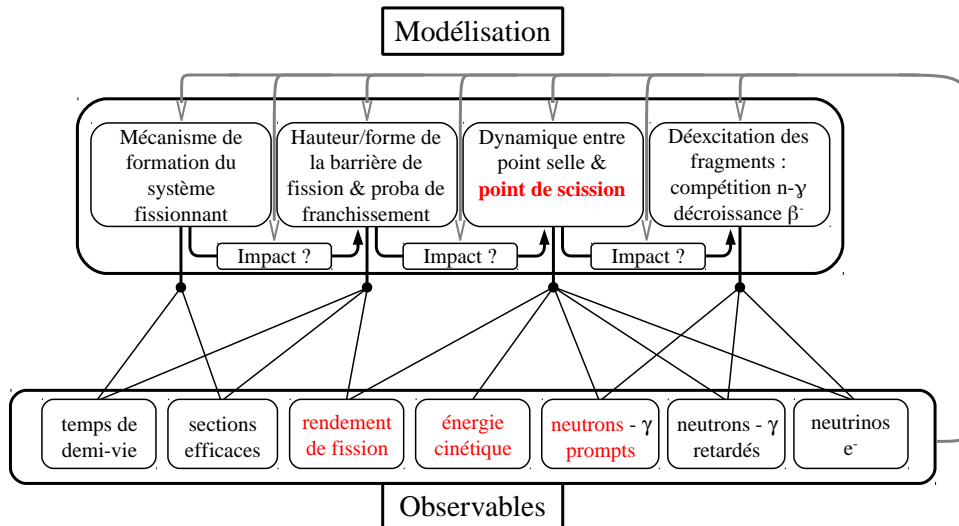


FIGURE 1.1 – Schéma des différentes étapes du processus de fission, les différentes classes de modèles associées ainsi que les observables qui leur sont accessibles. Les termes en rouges correspondent au modèle SPY.

1.2 LE MODÈLE SPY, VERSION DE RÉFÉRENCE

Le modèle SPY, tout comme le modèle de Wilkins [6], est un modèle statistique de point de scission. Il se concentre sur la description des fragments de fission (termes en rouge, Fig. 1.1) où la barrière de fission est présumée franchie. Cette approche repose sur deux hypothèses fortes : il est supposé que, d'une part, les observables associées aux fragments de fission sont être déterminées en ne considérant que le point de scission du système fissionnant. Les étapes précédant le point de scission sont négligées. D'autre part, il suppose que le système est en équilibre thermodynamique au point de scission. Sous ces deux hypothèses, le modèle SPY décrit les propriétés statiques du système au point de scission. Etant donné que le mécanisme de formation du système fissionnant et son évolution entre le point selle et le point de scission ne sont pas pris en compte, il est possible, dans une certaine mesure, de sonder par contraste la contribution des propriétés dynamiques du système dans la formation des fragments, principalement l'origine du caractère symétrique ou asymétrique de la fission.

Le processus de fission est réduit à la description de la topologie du système au point de scission dans le cadre d'une description statistique choisie. Divers propriétés intrinsèques des fragments interviennent dans la description du système à la scission. Les propriétés intrinsèques sont les distributions de protons, les énergies individuelles et les densités d'états des fragments. Le modèle SPY est basé sur un bilan d'énergie au point de scission où un dénombrement des états accessibles est effectué. Dans la suite de ce chapitre, les différents ingrédients du modèle seront détaillés et leur impact sur les observables physiques sera discuté. Dans les chapitres 3 et 4, la mention "solution de référence" signifiera que les ingrédients utilisés sont ceux présentés ci-dessous.

1.2.1 Un modèle de point de scission

Le point de scission est défini comme l'instant où les deux fragments sont séparés, isolés l'un et l'autre et possèdent chacun un nombre de nucléons clairement défini. Il se situe entre le point selle et la configuration où les deux fragments sont à l'infini l'un de l'autre. Le point de scission est donc la configuration du système où la densité de matière au niveau du col entre les deux pré-fragments peut être négligée et où les fragments sont encore proches l'un de l'autre. Contrairement au point selle, le point de scission ne possède pas de définition topologique univoque. Différents critères existent pour le définir, en particulier dans certaines approches microscopiques [5, 7], le point de scission est caractérisé par la chute brutale de l'énergie de liaison du système alors que dans d'autres modèles c'est le rapport entre l'énergie d'interaction nucléaire et l'énergie d'interaction coulombienne entre les fragments qui est considéré [8].

De manière analogue au modèle de Wilkins, le point de scission du système est modélisé par deux fragments à bords francs séparés d'une distance inter-surface d fixée, dans le cadre du modèle SPY, à 5 fm. Une représentation schématique d'une configuration du système à la scission est proposée à la figure 1.2. De plus, les fragments possèdent la même symétrie axiale dû à la conservation de cette

symétrie au cours de l'évolution du système. La distribution de protons et de neutrons de chaque fragment est supposée uniforme à l'intérieur d'un volume $V = \frac{4}{3}\pi r_0^3 A$ de forme quadrupolaire, où A est la masse du noyau et $r_0 = 1.2$ fm. La déformation quadrupolaire des fragments est compatible avec une distance inter-surface de 5 fm, ce qui n'est pas le cas pour une distance plus petite ($\lesssim 1$ fm) où la composante octupolaire (forme de poire) de la déformation des fragments est non négligeable. La déformation du fragment par rapport à une sphère de même volume est caractérisée par un unique paramètre \tilde{q} , appelé moment quadrupolaire réduit et défini par :

$$\tilde{q} = \frac{q_{20}}{AR_0^2} \quad (1.1)$$

où q_{20} est le moment quadrupolaire et $R_0 = 1.2A^{1/3}$ le rayon du fragment lorsqu'il est sphérique. Lorsque $\tilde{q} < 0$, le noyau est aplati selon son axe de symétrie (*oblate*), $\tilde{q} = 0$ correspond à un noyau sphérique et quand $\tilde{q} > 0$, il est allongé selon son axe de symétrie (*prolate*).

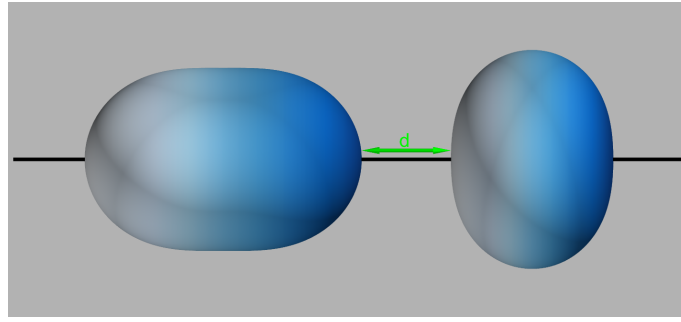


FIGURE 1.2 – Définition d'une configuration de scission selon le modèle SPY où les surfaces des deux fragments sont séparés de 5 fm. La ligne noire représente l'axe de scission.

La distance inter-surface d est fixée à 5 fm quel que soit le système fissionnant. La valeur de 5 fm est en compatible avec les distances extraites de calculs microscopiques [5, 9]. De plus les énergies cinétiques prédites par le modèle SPY, fortement dépendantes de d , sont cohérentes avec les données expérimentales.

Énergie disponible

La première étape du modèle SPY consiste à effectuer un bilan de l'énergie disponible (notée AE pour *Available Energy*) au point de scission en explorant toutes les fragmentations énergétiquement accessibles (autour de 1000 dans le cas de la fission d'un actinide) en fonction de la déformation quadrupolaire \tilde{q} de chaque fragment. L'énergie disponible est définie comme étant la différence entre l'énergie potentielle du système à la scission et l'énergie totale du noyau composé (E_{CN} , CN pour *Compound Nucleus*) :

$$\begin{aligned} AE = & E_{\text{ind}}(Z_1, N_1, \tilde{q}_1) + E_{\text{ind}}(Z_2, N_2, \tilde{q}_2) \\ & + E_{\text{coul}}(Z_1, N_1, \tilde{q}_1, Z_2, N_2, \tilde{q}_2, d) + E_{\text{nucl}}(Z_1, N_1, \tilde{q}_1, Z_2, N_2, \tilde{q}_2) \\ & - E_{\text{CN}} \end{aligned} \quad (1.2)$$

L'énergie potentielle du système à la scission est la somme de l'énergie individuelle de chaque fragment (E_{ind}) et de l'énergie d'interaction entre les deux fragments. L'énergie d'interaction est composée d'un terme d'énergie coulombienne (E_{coul}) et d'un terme d'énergie nucléaire (E_{nucl}). Ce dernier terme ne contribue que très faiblement à l'énergie d'interaction. Pour $d = 5$ fm, il est inférieur à 1 MeV, alors que l'énergie coulombienne est de l'ordre de 100 – 200 MeV. Une fragmentation est énergétiquement accessible si l'énergie totale du système à la scission est supérieure à son énergie potentielle, c'est à dire lorsque $|AE| > 0$. Seules les fragmentations énergétiquement accessibles seront considérées et, par commodité, AE représentera la valeur absolue de l'énergie disponible.

Énergie cinétique de précission

L'énergie cinétique de précission correspond à l'énergie cinétique acquise par les préfragments entre le point selle et le point de scission. Le bilan en énergie disponible n'inclue pas l'énergie cinétique de précission car le modèle SPY ne se focalise que sur le point de scission du système où les fragments sont statiques et exempts de tout effet dynamique. L'énergie de précission peut atteindre environ 10 MeV [10] dans le cas de la fission de $^{235}\text{U}(n_{\text{th}}, f)$. Cette valeur est obtenue à partir de la distribution en énergie cinétique des particules α , issues de la fission ternaire de l'uranium, pour différents angles d'émission. Cependant la dépendance avec le système fissionnant et la fragmentation est inconnue. De plus l'énergie de précission dépend fortement de la définition de la scission. Dans le cas du modèle SPY, il suffirait de diminuer légèrement la distance inter-surface pour augmenter l'énergie coulombienne et englober l'énergie de précission dans le calcul de l'énergie cinétique totale, notée TKE (*Total Kinetic Energy*).

Énergie individuelle

L'énergie individuelle des fragments (E_{ind}) est issue de calculs microscopiques [11] de type HFB basés sur l'interaction nucléon-nucléon Gogny D1S [12]. Les propriétés de structure nucléaire d'un fragment découlent directement de l'interaction effective nucléon-nucléon. La comparaison de l'énergie individuelle issue du calcul microscopique de type HFB avec l'énergie individuelle issue du modèle de la goutte liquide (noté LD pour *Liquid Drop*) révèle l'importance de la structure nucléaire dans la description de l'énergie individuelle d'un fragment. Par exemple, dans le cas du ^{132}Sn (Fig. 1.3, a), la présence d'une double fermeture de couche sphérique diminue l'énergie individuelle du noyau dans son état fondamental ce qui le rend plus lié. Par contre, dans le cas du ^{104}Mo (Fig. 1.3, b), la structure nucléaire de ce noyau rend son état fondamentale moins lié.

L'évolution de la structure nucléaire d'un noyau avec sa déformation impacte également son énergie individuelle. L'énergie du ^{132}Sn augmente plus rapidement que par rapport à l'énergie individuelle issue du modèle de la goutte liquide. Cela est dû à l'ouverture des couches protons et neutrons avec la déformation. En revanche, l'énergie du ^{104}Mo augmente faiblement lorsque le noyau est légèrement déformé puisque les couches protons et neutrons, partiellement remplies dans l'é-

tat fondamental, le demeure lorsque le noyau est déformé. Le comportement du ^{118}Pd est proche d'une goutte liquide aux petites déformations puisque les énergies individuelles sont très proches (Fig. 1.3, c). Aux grandes déformations, le modèle de la goutte liquide surestime de manière générale l'énergie individuelle d'un noyau. L'énergie individuelle des noyaux liés, soit environ 7000, est issue de la base de données *AMEDEE* [13].

L'énergie de l'état fondamental d'un noyau issue d'un calcul HFB diffère de la masse mesurée. Cette différence, de plusieurs MeV, provient principalement de l'utilisation d'une base finie dans les calculs HFB. Il est donc nécessaire de recalculer les énergies HFB ($E_{\text{HFB}}(Z, N, \tilde{q})$) sur la masse ($E_{\text{syst}}(Z, N)$) expérimentale, lorsqu'elle existe, ou bien sur la masse théorique issue d'une table de masse, ici la table *hfb21* [14] :

$$E_{\text{SPHFB}}(Z, N, \tilde{q}) = E_{\text{HFB}}(Z, N, \tilde{q}) + (E_{\text{syst}}(Z, N) - E_{\text{HFB}}(Z, N, \tilde{q}_{\text{GS}})) \quad (1.3)$$

Le besoin de recalculer les masses issues de la base *AMEDEE* [11] est dû à une moins bonne reproduction des masses connues par rapport à la table de masse *hfb21* [14]. L'écart quadratique moyen (rms) des masses issues de la base *AMEDEE* est de 4.4 MeV [11] alors qu'il est de 0.58 MeV pour la table de masse *hfb21* [14]. Cette énergie recalculée est notée $E_{\text{SPHFB}}(Z, N, \tilde{q})$, où les lettres S et P signifient que les énergies HFB ont été recalculées (S pour *Shifted*) sur la masse expérimentale/théorique présentant un effet d'appariement (P pour *Pairing*). Le résultat de ce recalcul est illustré à la figure 1.3. Dans le cas du noyau doublement magique ^{132}Sn , le recalcul sur la masse expérimentale n'est quasiment pas visible puisque la masse HFB est très proche de la masse expérimentale. Par contre les noyaux ^{104}Mo et ^{118}Pd , qui ne présentent pas de fermeture de couche, le recalcul sur la masse expérimentale est nécessaire étant donné que la différence entre la masse HFB et la masse expérimentale est d'environ de 5 MeV.

L'appariement des nucléons a un trop grand impact sur le bilan en énergie disponible et donc sur les résultats : il est d'environ 2 MeV entre un noyau pair-pair et un noyau impair-impair dans la région $A \approx 100 - 200$. Pour le moment, il est donc supprimé. La suppression des effets d'appariement dans les énergies HFB s'effectue en deux étapes. La première consiste à interpoler l'énergie $E_{\text{HFB}}(\tilde{q})$ sur les noyaux pair-pair voisins. Le résultat de cette interpolation est noté $E_{\text{IHFB}}(\tilde{q})$ (I pour *Interpolated*). Puis cette énergie est recalculée sur la masse du noyau ($E_{\text{syst}}^{\chi}(Z, N)$), obtenue à partir de l'interpolation sur les masses des noyaux pair-pair voisins :

$$E_{\text{ISHFB}}(Z, N, \tilde{q}) = E_{\text{IHFB}}(Z, N, \tilde{q}) + (E_{\text{syst}}^{\chi}(Z, N) - E_{\text{IHFB}}(Z, N, \tilde{q}_{\text{GS}})) \quad (1.4)$$

Dans la pratique, l'énergie E_{ISHFB} est simplement notée E_{SHFB} .

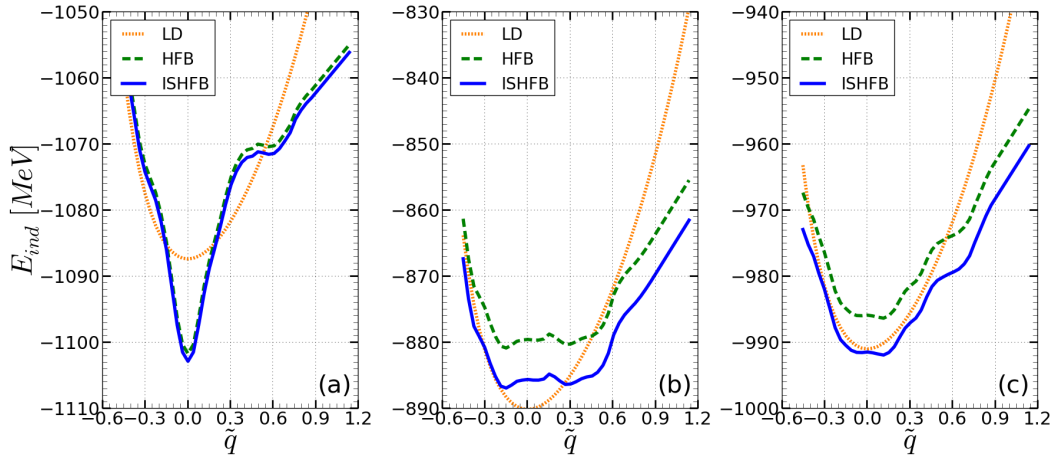


FIGURE 1.3 – Énergie individuelle de type goutte liquide (ligne orange), HFB (ligne verte) et HFB recalée (ligne bleue) en fonction de la déformation \tilde{q} pour ^{132}Sn (a), ^{104}Mo (b) et ^{118}Pd (c).

Énergie d'interaction nucléaire

Les fragments, séparés de quelques Fermi, sont soumis à l'interaction nucléaire qui est attractive. Elle est déterminée à partir du potentiel de proximité de Blocki [15] :

$$E_{\text{nucl}} = 4\pi\gamma\bar{R}b\phi(\zeta) \quad (1.5)$$

Cette énergie d'interaction dépend essentiellement de la distance inter-surface, de l'asymétrie d'isospin $I = (N_{\text{CN}} - Z_{\text{CN}})/A_{\text{CN}}$ du système fissionnant et de la courbure de la surface des fragments au niveau de l'axe de scission. Dans cette équation $\gamma = 0.9517(1 - 1.7826I^2)$ est le coefficient de tension de surface, \bar{R} le rayon de courbure réduit des deux fragments, b est la largeur moyenne de la surface diffuse fixée à 1 fm et ϕ la fonction nucléaire universelle :

$$\phi(\zeta) = \begin{cases} -0.5(\zeta - 2.54)^2 - 0.0852(\zeta - 2.54)^3 & \text{si } \zeta \leq 1.2511 \\ -3.437e^{-\zeta/0.75} & \text{si } \zeta \geq 1.2511 \end{cases} \quad (1.6)$$

avec $\zeta = d/b$ la distance inter-surface entre les fragments en unité de b .

Pour $d > 4$ fm, l'énergie d'interaction nucléaire est inférieure au MeV quelle que soit la déformation des fragments (Fig. 1.4). Bien que négligeable par rapport à l'énergie coulombienne, de l'ordre de 200 MeV, elle est malgré tout prise en compte dans le bilan en énergie.

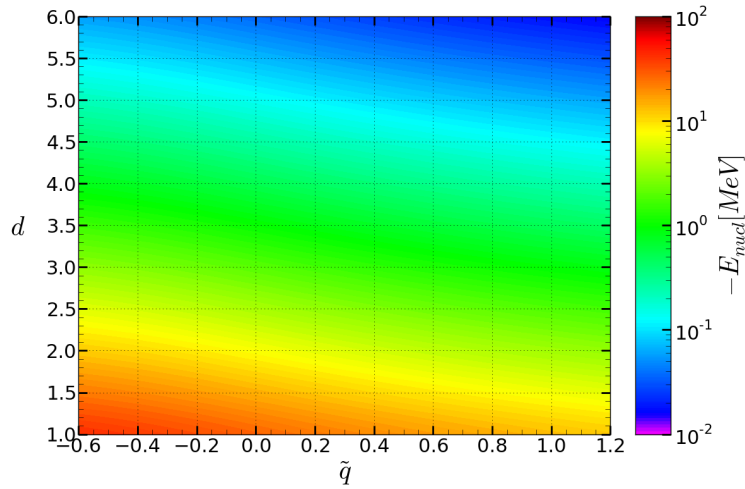


FIGURE 1.4 – Energie d’interaction nucléaire pour la fragmentation $^{132}\text{Sn} + ^{104}\text{Mo}$ en fonction de la déformation du ^{104}Mo , le ^{132}Sn étant sphérique, et de la distance inter-surface d .

Énergie d’interaction coulombienne

L’expression générale de l’énergie d’interaction coulombienne, notée E_{coul} , entre deux fragments, numérotés 1 et 2, s’exprime sous la forme d’une double intégrale sur le volume de chaque fragment :

$$E_{\text{coul}} = \frac{197}{137} \int_{\text{frag.2}} \int_{\text{frag.1}} \frac{\rho_{\pi,1}(\vec{r}_1)\rho_{\pi,2}(\vec{r}_2)}{\|\vec{r}_1 - \vec{r}_2\|} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \quad (1.7)$$

Dans cette expression, $\rho_{\pi,i}(\vec{r}_i)$ est la distribution de charge du fragment n° i , exprimée en nucléons par fermi cube (N/fm^3), les distances sont exprimées en fermi et E_{coul} en MeV. Cette énergie est fonction de la distribution de charges des deux fragments.

La distribution de charge au sein d’un fragment $\rho_i(\vec{r}_i)$ est soumise à deux hypothèses : la charge de chaque fragment est supposée uniformément répartie à l’intérieur de leur surface. De plus cette surface est supposée de forme quadrupolaire. Ainsi, la surface d’un fragment est paramétrée par $R(\theta, \varphi, \alpha_{20})$ dans le système des coordonnées sphériques (r, θ, φ) et s’exprime dans la base des polynômes de Legendre de la manière suivante :

$$R(\theta, \varphi, \alpha_{20}) = R_0 \lambda(\alpha_{20})^{-1} \left(1 + \alpha_{20} \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \frac{3 \cos(\theta)^2 - 1}{2} \right) \quad (1.8)$$

Le coefficient $\lambda(\alpha_{20})$ assure la conservation du volume du fragment selon sa déformation. Le facteur α_{20} est la composante quadrupolaire. Le lien entre \tilde{q} et α_{20} est détaillé en annexe A.2, au premier ordre en α_{20} , $\tilde{q} = \sqrt{\frac{9}{5\pi}} \alpha_{20} + o(\alpha_{20})$.

L’énergie d’interaction coulombienne (éq. 1.7) est calculée numériquement en sommant les interactions entre les charges élémentaires i et j : $(\rho_i \Delta V_i \times \rho_j \Delta V_j) / r_{ij}$, distantes de r_{ij} , sur l’ensemble des éléments de volume $\{\Delta V_i\}_{i:\text{frag.1}}$ du fragment 1

et sur l'ensemble des éléments de volume $\{\Delta V_j\}_{j:\text{frag},2}$ du fragment 2 :

$$E_{coul} = \frac{197}{137} \rho_{\pi,1} \rho_{\pi,2} \sum_{i:\text{frag},1} \sum_{j:\text{frag},2} \frac{\Delta V_i \Delta V_j}{r_{ij}} \quad (1.9)$$

La charge est supposée uniforme à l'intérieur de chaque fragment d'où $\rho_{\pi,k} = \frac{Z_k}{V_k} = \text{cste}$.

Le choix des coordonnées sphériques est préféré à l'utilisation du système de coordonnées cartésiennes (x, y, z) qui ne permet pas le pavage parfait du volume défini par l'équation 1.8. De manière analogue à la surface d'un fragment, les éléments de volumes ΔV_k sont définis dans le système de coordonnées sphériques de la manière suivante :

$$\Delta V_k = \frac{1}{3} \Delta(r^3) \Delta(-\cos(\theta)) \Delta\varphi \quad (1.10)$$

afin de s'affranchir des erreurs liées à une éventuelle non conservation du volume total. Dans un souci d'optimisation du temps de calcul et de l'erreur liée à la discrétisation des variables (r, θ, φ) , les éléments de volume ne peuvent être définies avec un pas constant en θ et en φ . Un pas constant pour les variables angulaires définirait un maillage où les éléments de volume au centre sont très petits alors que ceux à la périphérie sont grands. Ces derniers domineraient l'erreur d'intégration pour un temps de calcul donné alors que les éléments de volume centraux domineraient le temps de calcul pour une erreur donnée.

L'optimisation consiste à faire varier le pas d'intégration des variables angulaires en fonction du rayon afin que les volumes élémentaires aient un volume similaire. Quand le rayon r_i augmente, le pas en θ : $\Delta\theta_i$ doit diminuer. Quand le rayon r_i augmente et que l'angle θ_j est au voisinage de $\pi/2$, le pas en φ : $\Delta\varphi_{i,j}$ doit aussi diminuer. La discrétisation des variables :

$$\begin{aligned} r &= i\Delta r; \Delta r = i_{\max} \\ \theta &= j\Delta\theta_i; \Delta\theta_i = \frac{\pi}{\Omega i} \\ \varphi &= k\Delta\varphi_{i,j}; \Delta\varphi_{i,j} = \frac{2\pi}{f_i(j)} \end{aligned} \quad (1.11)$$

génère un maillage répondant à ces conditions, il est représenté sur la figure 1.5. La fonction $f_i(j)$:

$$\begin{aligned} f_i(j) &= j && \text{pour } j \in \left[0, \left\lfloor \frac{\Omega i}{2} \right\rfloor\right] \\ f_i(j) &= \Omega i - \frac{j}{2} && \text{pour } j \in \left[\left\lceil \frac{\Omega i}{2} \right\rceil, \Omega i\right] \end{aligned} \quad (1.12)$$

permet d'ajuster le pas en φ en fonction de la couche n° i et de la tranche n° j . Les coefficients i_{\max} et Ω sont ajustables pour optimiser le temps de calcul.

L'optimisation du temps de calcul de l'interaction coulombienne a été effectuée en tenant compte de la nécessité de calculer, en moyenne, 1000 fragmentations par

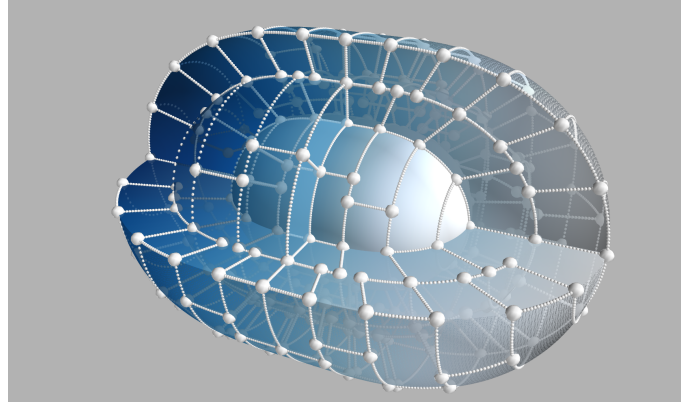


FIGURE 1.5 – Vue en écorché du maillage du noyau ^{132}Sn avec une déformation quadrupolaire $\tilde{q} = 0.4$. Les points et les lignes pointillées représentent les sommets et les côtés des volumes élémentaires.

système fissionnant avec une erreur inférieure à 0.1 MeV. Les valeurs offrant le meilleur compromis sont $i_{\max} = 4$ et $\Omega = 4$ (voir Tab. 1.1). L'erreur de calcul est de l'ordre de 0.1 MeV et le temps de calcul pour un système fissionnant ayant 1000 fragmentations énergétiquement possibles est de l'ordre de la minute, dans une configuration où 7 cœurs à 2.6 GHz du processeur (Intel® Core™i7) sont consacrés au calcul.

L'évolution régulière de l'énergie coulombienne en fonction de la déformation autorise de ne calculer qu'une partie de l'ensemble des valeurs $\{E_{\text{coul}}(\tilde{q}_1, \tilde{q}_2)\}$. Le calcul numérique est effectué avec un pas de $0.2 \times 3/\sqrt{5\pi}$ pour les variables $(\tilde{q}_1, \tilde{q}_2)$, les valeurs intermédiaires sont obtenues par interpolation. Finalement la variable de déformation \tilde{q} varie de $-0.6 \times 3/\sqrt{5\pi}$ à $1.5 \times 3/\sqrt{5\pi}$ par pas de $0.05 \times 3/\sqrt{5\pi}$.

i_{\max}	Ω	temps [s]	$E_{\text{coul}}^{\text{quad}}(0,0) - E_{\text{coul}}^{\text{sph-sph}}(0,0)$ [MeV]
4	2	0.017	0.818
4	4	0.038	0.13
4	8	0.262	0.029
6	2	0.067	0.22
6	4	0.334	0.046
6	8	2.92	0.011
8	2	0.313	0.103
8	4	1.755	0.024
8	8	16.739	0.006
$\Delta V = 0.5 \text{ fm}^3$		200	0.053
$\Delta V = 0.8 \text{ fm}^3$		12	-0.767

TABLE 1.1 – Temps de calcul de l'énergie coulombienne pour la fragmentation $^{132}\text{Sn} + ^{104}\text{Mo}$ sur l'ensemble des déformations $(\tilde{q}_1, \tilde{q}_2)$ pour différentes valeurs des coefficients Ω et i_{\max} . La dernière colonne est l'erreur associée au calcul dans le cas d'une interaction entre deux sphères. Les deux dernières lignes correspondent à un maillage cartésien.

La déformation de chaque fragment a un impact sur l'énergie d'interaction coulombienne pouvant, dans le cas de la fragmentation $^{132}\text{Sn} + ^{104}\text{Mo}$, induire une variation de plus de 100 MeV par rapport à l'interaction entre deux sphères, comme illustré par la figure 1.6. La variation de l'énergie coulombienne avec la déformation des fragments est plus brutale pour des fragments aplatis qu'allongés. Dans le cas de la fragmentation $^{132}\text{Sn} + ^{104}\text{Mo}$ le passage du couple de déformation $(-0.4, -0.4)$ au couple $(-0.2, -0.2)$ induit une variation d'environ 30 MeV (Fig 1.6). Alors que le passage du couple $(0.8, 0.8)$ au couple $(1.0, 1.0)$ induit une variation inférieure à 10 MeV.

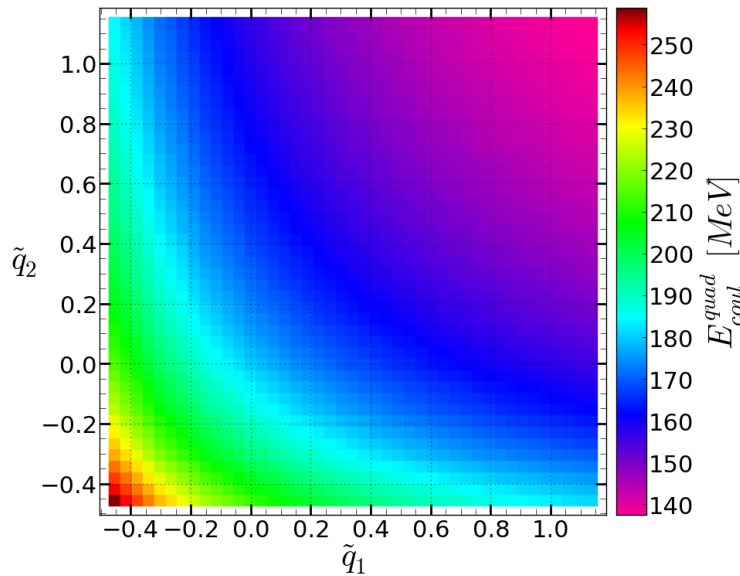


FIGURE 1.6 – Énergie d'interaction coulombienne pour la fragmentation $^{132}\text{Sn} + ^{104}\text{Mo}$ en fonction de leur déformation quadrupolaire \tilde{q} .

Surface d'énergie disponible

L'énergie disponible d'une fragmentation évolue en fonction de la déformation de chaque fragment ce qui se traduit par une surface dont deux exemples sont donnés à la figure 1.7 pour la fragmentation $^{132}\text{Sn} + ^{104}\text{Mo}$ et à la figure 1.8 pour la fragmentation $^{118}\text{Pd} + ^{118}\text{Pd}$. La structure d'une surface d'énergie disponible est principalement déterminée par l'opposition de deux effets. D'une part, l'énergie d'interaction, dominée par l'énergie coulombienne, décroît régulièrement depuis les déformations aplaties ($\tilde{q} < 0$) jusqu'aux déformations allongées ($\tilde{q} > 0$) ce qui favorise les déformations allongées. D'autre part, les énergies individuelles qui favorisent les déformations proches de la déformation de l'état fondamental de chaque fragment.

Par exemple la structure de la surface d'énergie disponible de la fragmentation $^{132}\text{Sn} + ^{104}\text{Mo}$ est très différente de celle de $^{118}\text{Pd} + ^{118}\text{Pd}$ (Fig. 1.7 et Fig. 1.8).

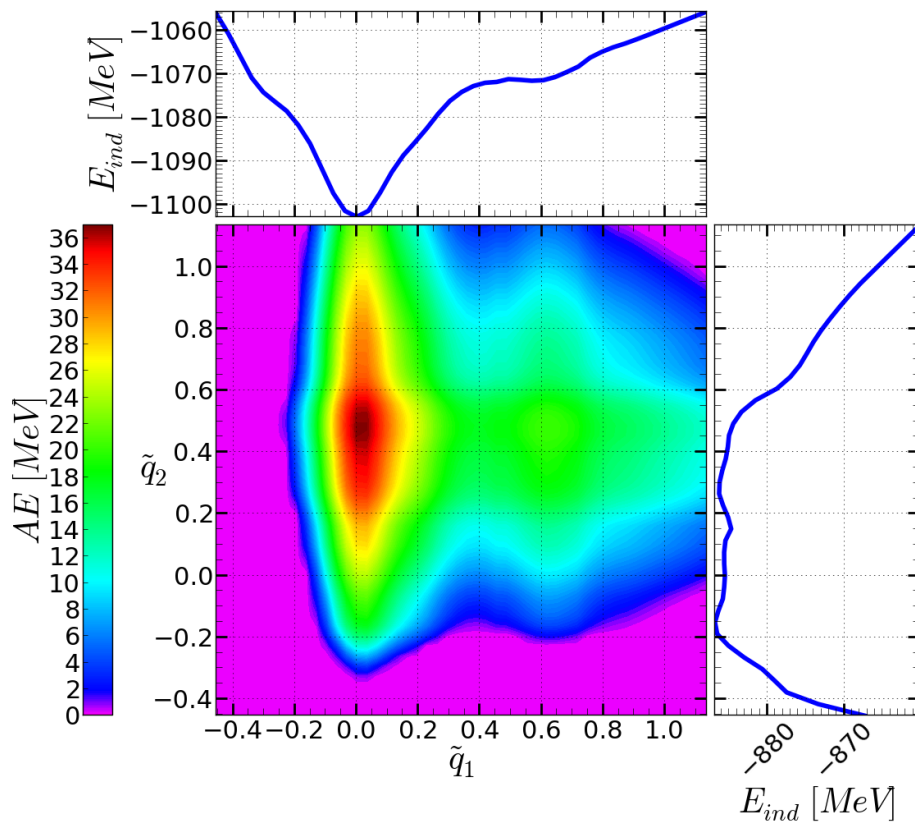


FIGURE 1.7 – Énergie disponible en fonction de la déformation de chaque fragment pour la fragmentation asymétrique : $^{132}\text{Sn} + ^{104}\text{Mo}$ issue de la réaction $^{235}\text{U}(n_{th}, f)$. En haut et à droite : énergie individuelle des fragments associés : ^{132}Sn (en haut) et ^{104}Mo (à droite).

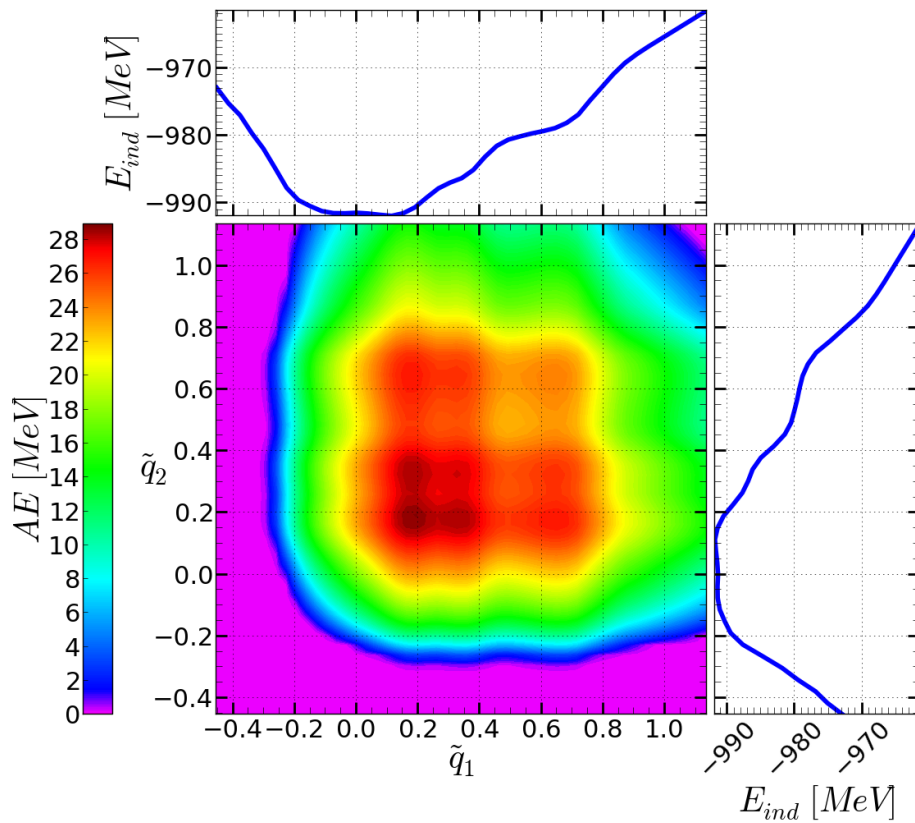


FIGURE 1.8 – Énergie disponible en fonction de la déformation de chaque fragment pour la fragmentation symétrique : $^{118}\text{Pd} + ^{118}\text{Pd}$ issue de la réaction $^{235}\text{U}(n_{th}, f)$. En haut et à droite : énergie individuelle des fragments associés : ^{118}Pd (en haut et à droite).

Dans les deux cas, la topologie de la surface d'énergie disponible est directement reliée à structure nucléaire de chaque fragment via leur énergie individuelle. Cette caractéristique est particulièrement visiblement sur les figures 1.7 et 1.8 où sont représentés, en plus de la surface d'énergie disponible, les énergies individuelles de chaque fragments. La différence de structure entre les deux surfaces d'énergie disponible est directement liée à la rigidité des fragments, c'est à dire l'évolution de l'énergie de déformation des fragments avec leur déformation, partiellement altérée par leur répulsion coulombienne. L'augmentation très rapide de l'énergie de déformation du ^{132}Sn avec sa déformation est la signature d'un noyau rigide, illustré à la figure 1.9. A l'opposé un noyau comme le ^{104}Mo est caractérisé par une très faible variation de l'énergie de déformation autour de son état fondamental. Entre ces deux cas, un noyau tel que le ^{118}Pd , se caractérise par l'augmentation régulière de l'énergie de déformation autour de son état fondamental, s'approchant du comportement de type goutte liquide, également illustré à la figure 1.9.

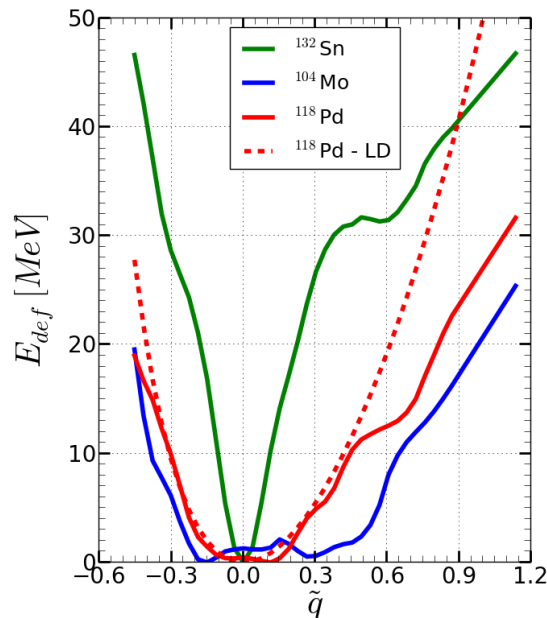


FIGURE 1.9 – Énergie de déformation HFB en fonction de la déformation pour les noyaux de ^{132}Sn , ^{104}Mo (lignes continues) et goutte liquide pour ^{118}Pd (tireté rouge).

Dans le premier cas, la surface présente un maximum assez piqué dans la direction de l'axe \tilde{q}_1 (déformation du ^{132}Sn) et très large dans la direction de l'axe \tilde{q}_2 (déformation du ^{104}Mo) centré autour du couple de déformations ($\tilde{q}_1 = 0, \tilde{q}_2 = 0.45$) (Fig. 1.7). La rigidité et la sphéricité du ^{132}Sn , toutes deux associées à la double fermeture de couche $Z = 50$ et $N = 82$, sont à l'origine de l'étroitesse du pic et de sa localisation en $\tilde{q}_1 = 0$. Cependant, selon l'axe \tilde{q}_2 la largeur du pic et sa localisation en $\tilde{q}_2 = 0.45$ sont dues à la "mollesse" du ^{104}Mo , amplifiée par l'interaction coulombienne. Selon l'axe \tilde{q}_1 , la structure de la surface est pilotée par la structure nucléaire du fragment ^{132}Sn alors que selon l'axe \tilde{q}_2 , c'est l'interaction coulombienne qui domine.

Dans le second cas, la surface présente un maximum légèrement piqué et lo-

calisé en ($\tilde{q}_1 = 0.2, \tilde{q}_2 = 0.2$) (Fig. 1.8). Ici, la structure de la surface résulte d'une compétition équilibrée entre l'énergie individuelle du ^{118}Pd et l'énergie d'interaction coulombienne.

La valeur absolue du maximum de la surface d'énergie disponible est lui aussi dépendante de cette compétition. D'une part, plus les effets de couches des fragments sont forts plus l'énergie disponible sera importante. D'autre part, plus la déformation de l'état fondamental des fragments est grande, moins l'énergie coulombienne sera importante, favorisant de grandes énergies disponibles. La fragmentation $^{132}\text{Sn} + ^{104}\text{Mo}$ réunit ces deux critères : les effets de couches du ^{132}Sn sont très importants et la grande déformation de l'état fondamental de ^{104}Mo atténue l'interaction coulombienne, d'où un maximum plus grand (36.5 MeV) pour la fission asymétrique que pour la fragmentation symétrique $^{118}\text{Pd} + ^{118}\text{Pd}$ (28.6 MeV).

Une fois que les surfaces d'énergie disponible ont été calculées pour l'ensemble des fragmentations énergétiquement accessibles, il est possible de déterminer quelles sont les fragmentations énergétiquement favorables en ne considérant que les maximums des surfaces d'énergie disponible. Dans le cas de la fission thermique de ^{235}U , ce sont les fragmentations proches de $^{132}\text{Sn} + ^{104}\text{Mo}$ qui sont les plus favorables d'un point de vue énergétique, comme illustré à la figure 1.10. Le caractère asymétrique de la fission de ^{235}U s'explique donc en partie par une préférence pour les fragmentations asymétriques qui sont énergétiquement plus favorables que les fragmentations symétriques. Cette préférence pour les fragmentations asymétriques est aussi à l'origine de la fission asymétrique de ^{180}Hg [16].

L'utilisation d'un modèle statistique permet d'aller au delà de ces considérations qualitatives et d'obtenir des grandeurs directement comparables aux données expérimentales.

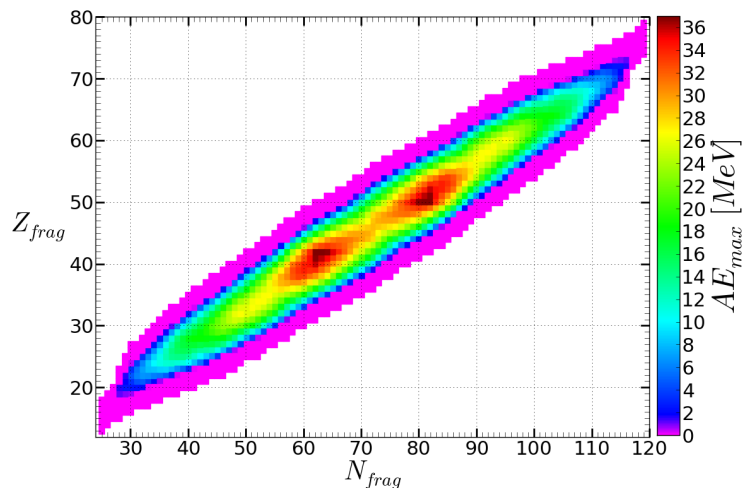


FIGURE 1.10 – Maximum d'énergie disponible d'une fragmentation issue de la réaction $^{235}\text{U}(n_{th}, f)$ en fonction du fragment.

1.2.2 Un modèle statistique

L'utilisation d'un modèle statistique au point de scission est justifiée par l'évolution lente du système, par rapport au temps caractéristique de réarrangement des degrés de liberté des nucléons, depuis le point selle jusqu'au point de scission. Cette évolution est suffisamment lente par rapport au temps de relaxation des degrés de libertés nucléoniques pour qu'un équilibre thermodynamique soit établi à la scission. L'état du système au point de scission est donc supposé indépendant de son état initial et de son évolution depuis le point selle jusqu'au point de scission. En d'autres termes, tout les aspects dynamiques de la fission sont supposés négligeables devant les aspects statiques du système au point de scission. La non prise en compte d'effets liés à la dynamique du système peut être à l'origine de l'étroitesse des pics des distributions des rendements de fission. Les modèles basées sur une marche aléatoire sur la surface d'énergie potentielle du système, en fonction de sa déformation, permettant de prendre en compte des effets dynamiques tels que des effets dissipatifs et inertiels. Ces effets sont dûs à l'évolution du système depuis le point selle jusqu'au point de scission. Cette évolution est régie soit par l'équation de transport de Fokker-Planck [17, 18] soit par celle de Langevin [19, 20]. Dans les deux cas, les distributions des rendements de fission sont bien reproduites. Cependant ces modèles ne sont pas pas mesure de prédire les distributions en énergie cinétique ou le nombre de neutrons évaporés par les fragments.

Dans une approche statistique, la probabilité de formation d'une fragmentation est supposée être directement liée à la probabilité de chaque état quantique associé à cette fragmentation. L'ensemble statistique choisi pour obtenir la probabilité de chaque état quantique est l'ensemble microcanonique car le système fissionnant est un système isolé sans échange d'énergie ou de particules avec son environnement. Dans ce cadre, les états quantiques, ou microétats, sont équiprobables et la probabilité d'une fragmentation est proportionnelle au nombre d'états disponibles (noté *AS* pour *Available States*) associés à cette fragmentation. Finalement seul le nombre d'états disponibles pour chaque fragmentation est nécessaire, la connaissance des fonctions d'ondes de ces états n'étant pas utile.

États disponibles

La modélisation du système au point de scission par deux fragments séparés l'un de l'autre autorise une hypothèse simplificatrice qui permet de calculer le nombre d'états disponibles d'une fragmentation tout en s'affranchissant du calcul des fonctions d'ondes du système à la scission. Cette hypothèse consiste à considérer les deux fragments isolés et où leur interaction n'a aucune influence sur leur propriétés intrinsèques (énergie individuelle et densité d'états). Le nombre d'états disponibles est alors le produit des densités d'états de chaque fragment :

$$AS = \rho_1(\varepsilon_1)\rho_2(\varepsilon_2)\delta E^2 \quad (1.13)$$

où ρ_i est la densité d'états du fragment i et δE est l'intervalle d'énergie, fixé à 1 MeV. Dans un premier temps, la densité d'états d'un fragment est obtenue en

modélisant le noyau par un gaz de Fermi où les nucléons n'interagissent pas entre eux et sont confinés dans une boîte :

$$\rho(\varepsilon) = \frac{\sqrt{\pi}}{12} \frac{e^{2\sqrt{a\varepsilon}}}{a^{1/4}\varepsilon^{5/4}} \quad (1.14)$$

où ε est l'énergie d'excitation du noyau et a est le paramètre de densité de niveaux (la démonstration de cette formule est donnée en annexe B). La densité d'états augmente de manière exponentielle avec l'énergie d'excitation (Fig. 1.11). Dans le cadre du modèle du gaz de Fermi, $a \approx A/13$, où A est le nombre de nucléons du noyau. Cependant, un gaz de fermions ne prend pas en compte les degrés de libertés collectifs. Une manière effective de les prendre en compte consiste à augmenter le paramètre de densité de niveaux. Une comparaison avec les données expérimentales montre que prendre $a = A/8$ permet d'inclure de manière effective les degrés de libertés collectifs [21]. Cette valeur du paramètre de densité de niveaux sera retenue pour la solution de référence.

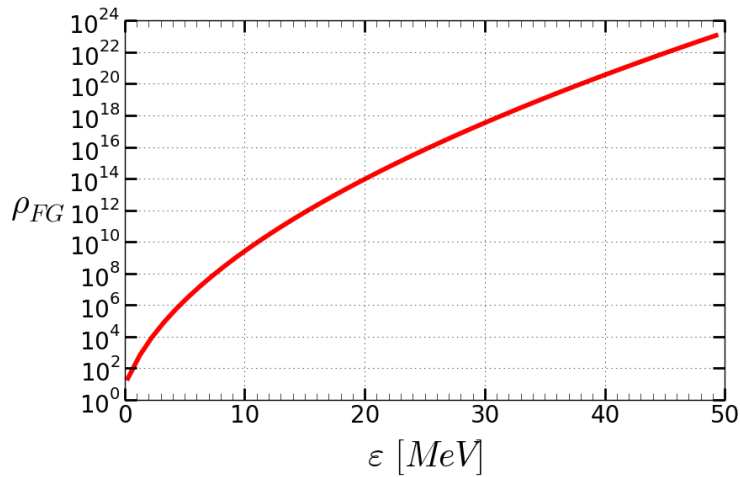


FIGURE 1.11 – Densité d'états d'un noyau $A = 150$ en fonction de l'énergie d'excitation ε dans le cadre du modèle du gaz de Fermi.

A la scission, chaque fragment possède une énergie d'excitation intrinsèque ε_i . Cette énergie provient du partage de l'énergie disponible $AE = \varepsilon_1 + \varepsilon_2$ entre les deux fragments. Il est donc possible de réécrire l'équation 1.13 en fonction de AE en introduisant la variable x qui correspond à la fraction d'énergie disponible emportée par le fragment 1 sous forme d'énergie d'excitation intrinsèque :

$$\pi(Z_1, N_1, Z_2, N_2, \tilde{q}_1, \tilde{q}_2, x) = \rho_1(xAE)\rho_2((1-x)AE)\delta E^2 \quad (1.15)$$

où π est la probabilité d'une fragmentation ${}_{Z_1}^{A_1}X + {}_{Z_2}^{A_2}Y$, pour une déformation donnée des fragments (\tilde{q}_1 et \tilde{q}_2) et pour une répartition (x) de l'énergie disponible entre les deux fragments. Puisque le nombre d'états associés à une fragmentation et sa probabilité ne diffèrent que d'un facteur de normalisation, il est permis de les confondre.

Pour une fragmentation (A_1, A_2) donnée et pour une énergie disponible donnée, la probabilité de cette fragmentation est, au premier ordre, maximale lorsque l'énergie disponible est répartie proportionnellement à la masse des fragments. Autrement dit, $\pi \propto e^{\sqrt{A_1 x} + \sqrt{A_2(1-x)}}$ est maximal pour $x = A_1/A_{CN}$. Cela est clairement illustré à la figure 1.12, où trois fragmentation sont envisagées : $(A_1 = 118, A_2 = 118)$, $(A_1 = 132, A_2 = 104)$ et $(A_1 = 150, A_2 = 86)$ avec la même énergie disponible de 20 MeV. Dans les trois cas le maximum est bien localisée en $x = A_1/A_{CN}$.

Dans le cas d'un ensemble de fragmentations ayant la même énergie disponible répartie de manière optimale ($x = A_1/A_{CN}$), la probabilité π est, au premier ordre, indépendante de l'asymétrie de masse A_1/A_{CN} de la fragmentation. Ainsi la probabilité π est proportionnelle à $e^{\sqrt{A_{CN}}}$. Cependant un calcul exact montre que $\pi(x = A_1/A_{CN})$ est minimal pour $A_1 = A_{CN}/2$ et que la fragmentation la plus asymétrique est la plus probable. Dans le cas des trois fragmentations considérées à la figure 1.12, le maximum de la courbe bleue, correspondant à la fragmentation symétrique, est bel et bien inférieur au deux autres. Le maximum de la courbe verte, correspondant à la fragmentation la plus asymétrique, est supérieur aux deux autres. Ce sont les fragmentations à grande asymétrie de masse qui sont favorisées à cause du terme en $a^{1/4}$ au dénominateur de la formule de la densité d'états (voir éq. 1.14). Toutefois cela demeure un effet marginal, la probabilité π étant dominée en premier lieu par l'énergie disponible : une baisse de 1 MeV de l'énergie disponible réduit le nombre d'états de 33% pour la fragmentation $(A_1 = 150, A_2 = 86)$. Cette légère baisse est suffisante pour rendre cette fragmentation bien moins probable que la fragmentation symétrique.

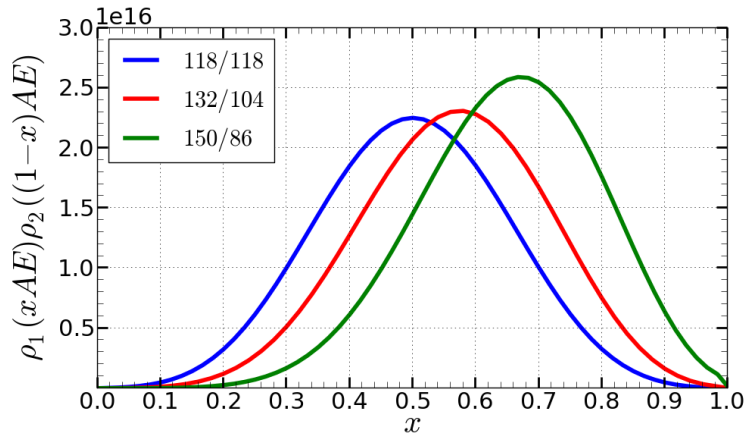


FIGURE 1.12 – Nombre d'états du système fissionnant à la scission en fonction de x pour les fragmentations $(A_1 = 118, A_2 = 118)$, $(A_1 = 132, A_2 = 104)$ et $(A_1 = 150, A_2 = 86)$ avec $AE=20$ MeV.

La valeur moyenne d'une grandeur \mathcal{G} , est, pour un fragment donné, la moyenne de cette grandeur, pondérée par la probabilité π :

$$\langle \mathcal{G} \rangle (Z, N) = \iiint \mathcal{G} \pi dx d\tilde{q}_1 d\tilde{q}_2 \quad (1.16)$$

La grandeur \mathcal{G} peut être observable, par exemple le rendement ou l'énergie cinétique d'un fragment. Les grandeurs, telles que la déformation ou l'énergie de déformation moyenne, ne sont pas des grandeurs observables mais peuvent être intéressantes pour analyser et mieux comprendre le processus de fission.

1.2.3 Observables accessibles par SPY

Il est possible de calculer les grandeurs moyennes associées à un fragment A_ZX excepté celles dépendantes du spin.

La majeure partie des données expérimentales dépendent du nombre de protons Z des fragments ou de leur nombre de nucléons A . Les principales grandeurs observables sont : les rendements de fission isotopiques $Y(Z)$ et isobariques $Y(A)$, la distribution en énergie cinétique des fragments $KE(A)$ et le nombre de neutrons évaporés par les fragments $\nu(A)$. L'étude de ces trois observables (Y , KE et ν) permette de sonder les relations entre les propriétés intrinsèques des fragments, telles que l'énergie individuelle, et leurs propriétés extrinsèques, telles que la déformation moyenne ou l'énergie de déformation.

Rendements de fission

La probabilité π de l'équation 1.15 n'est pas une observable, seule la probabilité $P(Z_1, N_1, Z_2, N_2)$ d'une fragmentation, appelée rendement de fission, et notée $Y(Z_1, N_1, Z_2, N_2)$ est mesurable. Cette probabilité, normalisée à 100%, est déduite de l'équation 1.15 en intégrant sur l'ensemble des répartitions possibles de l'énergie disponible et sur l'ensemble des déformations accessibles par les fragments. Dans le modèle SPY, \tilde{q} varie des formes aplaties ($\tilde{q} = -0.45$) jusqu'à des formes allongées ($\tilde{q} = 1.14$). De ce fait, le rendement de fission d'une fragmentation vaut :

$$P(Z_1, N_1, Z_2, N_2) = \int_{-0.45}^{1.14} \int_{-0.45}^{1.14} \int_0^1 \pi dx d\tilde{q}_1 d\tilde{q}_2 \quad (1.17)$$

Les rendements de fission des fragments $Y(Z, N)$ correspondent à la probabilité d'obtenir un fragment (Z, N) ; ils sont normalisés à 200% par convention. D'où $Y(Z_1, N_1) = 2Y(Z_1, N_1, Z_2, N_2)$. Ils peuvent être représentés de quatre manières différentes. Lorsque la distribution des rendements de fission est en fonction de la masse A_{frag} /du nombre de protons Z_{frag} /du nombre de neutrons N_{frag} des fragments, les rendements sont dit isobariques/isotopiques/isotoniques (Fig. 1.13). Lorsque la distribution des rendements de fission est en fonction du nombre de protons et de neutrons des fragments, les rendements sont qualifiés d'indépendants. Les relations entre les différentes représentations des rendements de fission sont représentés à la figure 1.13. Quelle que soit la représentation, une fission asymétrique se traduit toujours par la présence de deux pics dans la distribution. Les rendements indépendants de la réaction ${}^{235}\text{U}(n_{\text{th}}, f)$ issus du modèle SPY montrent que seul un nombre restreint de fragmentations est contributif. Cela se traduit par des pics étroits dans les trois autres distributions. Expérimentalement, les rendements isotopiques et isobariques sont les plus couramment mesurés. Les

rendement indépendants le sont moins et les rendements isotoniques ne sont pas directement mesurables.

Les ingrédients du modèle que sont l'énergie individuelle des fragments, l'énergie coulombienne entre les fragments et la densité d'états des fragments ont tous un impact sur les rendements de fission. Ainsi, la comparaison entre les rendements de fission prédit par le modèle SPY et les rendements expérimentaux renseigne sur la pertinence du modèle.

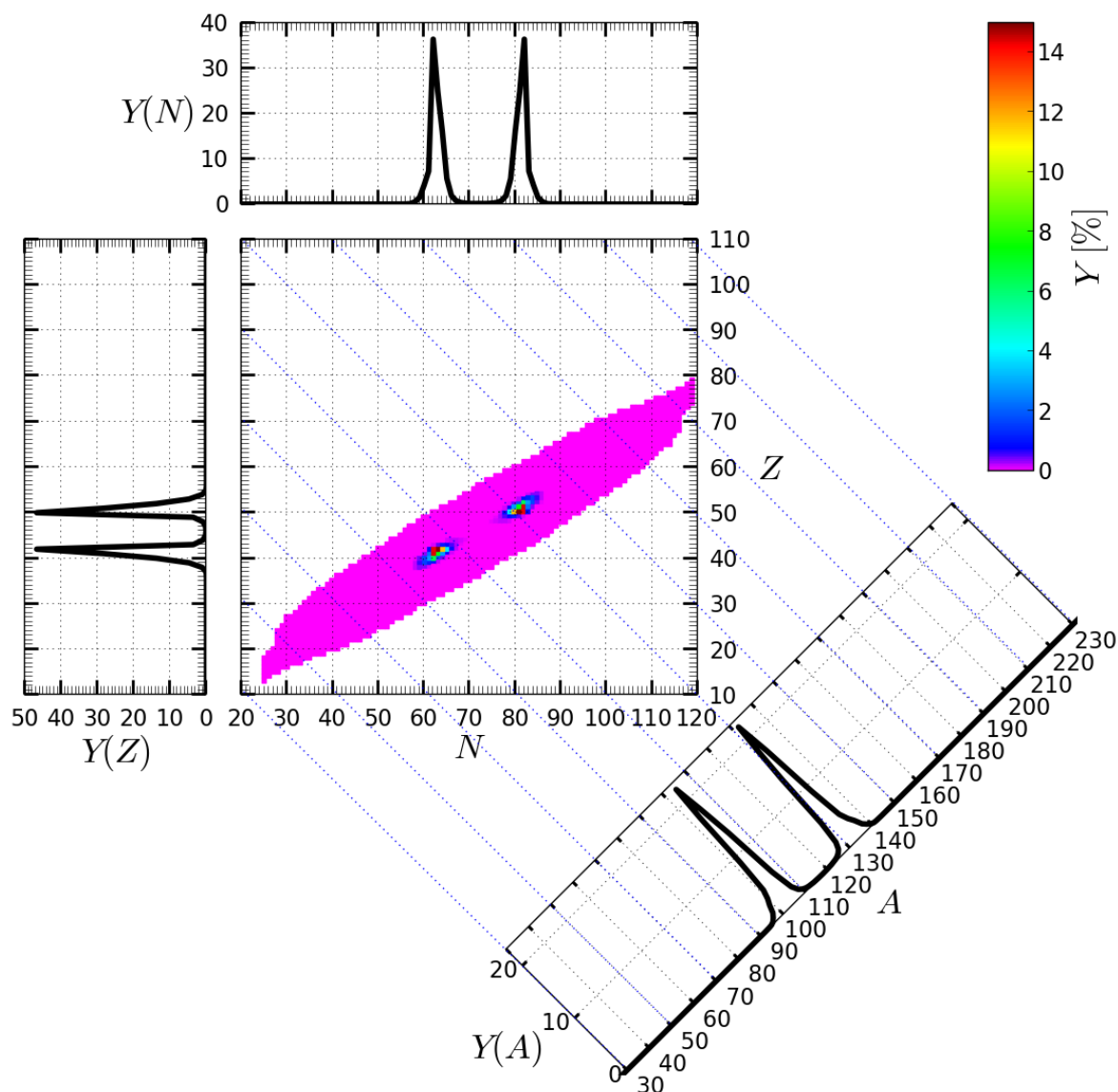


FIGURE 1.13 – Rendement de fission en fonction de nombre de protons et de neutrons : $Y(Z, N)$ (au centre), rendement isotopique $Y(Z)$ (à gauche), isotonique $Y(N)$ (en haut) et isobarique $Y(A)$ (en bas à droite) calculé par SPY pour la réaction $^{235}\text{U}(n_{th}, f)$.

Energie cinétique

L'énergie cinétique totale d'une fragmentation, notée $TKE(Z, N)$ pour *Total Kinetic Energy*, issue du modèle SPY est principalement corrélée à l'interaction coulombienne. Elle correspond à la valeur moyenne de l'énergie coulombienne pour cette fragmentation :

$$\begin{aligned} TKE(Z, N) &= \langle E_{\text{coul}} \rangle (Z, N) \\ &= \int_{-0.45}^{1.14} \int_{-0.45}^{1.14} E_{\text{coul}}(Z, N, \tilde{q}_1, \tilde{q}_2) P(Z, N, \tilde{q}_1, \tilde{q}_2) d\tilde{q}_1 d\tilde{q}_2 \end{aligned} \quad (1.18)$$

L'énergie cinétique d'un fragment, notée KE pour *Kinetic Energy*, et le TKE d'une fragmentation soient équivalents car reliées par la conservation de l'impulsion du système :

$$KE(Z, A) = \frac{A_{\text{CN}} - A}{A_{\text{CN}}} TKE(Z, A) \quad (1.19)$$

Seul le KE sera présenté puisqu'il est associé à un fragment et non à une fragmentation comme le TKE. L'avantage du KE est que son domaine de variation est plus important que celui du TKE, comme cela est visible à la figure 1.14, permettant de mieux voir des structures fines. Dans le cas de la réaction $^{235}\text{U}(n_{\text{th}}, f)$, le TKE calculé varie de 20 MeV alors que le KE varie de 50 MeV. Il est également plus aisé de corrélérer le KE d'un fragment avec sa déformation moyenne $\langle \tilde{q} \rangle (A)$ ou toute autre propriété spécifique à un fragment.

L'étude comparative entre les KE prédits par le modèle SPY et les KE expérimentaux renseigne sur la pertinence du calcul de l'interaction coulombienne.

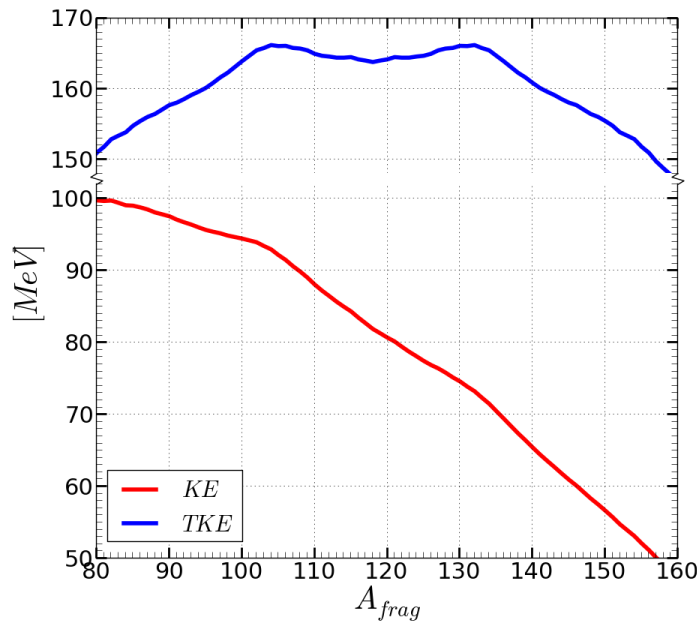


FIGURE 1.14 – TKE et KE calculés par SPY en fonction de la masse du fragment pour la réaction $^{235}\text{U}(n_{\text{th}}, f)$.

Neutrons évaporés

L'énergie d'excitation intrinsèque et de déformation ne sont pas directement mesurables. Seul le nombre de neutrons évaporés par un fragment permet d'avoir des informations sur ces énergies puisque ce nombre est lié à l'énergie d'excitation totale du fragment, notée E_{tot}^* , qui est la somme de l'énergie d'excitation et de déformation du fragment. Afin de faire le lien entre les distributions expérimentales du nombre de neutrons évaporés avec l'énergie d'excitation intrinsèque et de déformation des fragments issues du modèle SPY, il est nécessaire de modéliser le mécanisme d'évaporation de neutrons. Seule l'évaporation de neutrons est considérée car bien qu'il y ait compétition entre l'émission de neutrons et l'émission de photons gamma, l'émission de photons gamma est peu probable tant que la somme de l'énergie d'excitation et de l'énergie de déformation du fragment est supérieure à l'énergie de liaison d'un neutron. La modélisation simplifiée de ce mécanisme se base sur des considérations énergétiques : si l'énergie d'excitation totale est supérieure celle de l'énergie de liaison d'un neutron, notée S_n , et de son énergie cinétique, noté E_c^n , alors un neutron sera évaporé.

L'énergie cinétique du neutron E_c^n est tirée aléatoirement selon la loi de probabilité [22] :

$$P_T(E_c^n) = \frac{E_c^n}{T^2} e^{-E_c^n/T} dE_c^n \quad (1.20)$$

où la température $T = \sqrt{(E_{\text{tot}}^* - S_n)/a}$ est celle du noyau après évaporation avec $a = A/8$. L'allure de cette loi de probabilité est donné à la figure 1.15, courbe rouge, avec $T = 1$ MeV. Cette étape est répétée pour le noyau fils ${}^A_Z X$ tant qu'il est possible d'évaporer des neutrons.

Le nombre moyen de neutrons évaporé $\nu(Z, N)$ par le fragment ${}^A_Z X$ est obtenu à partir d'un échantillon de n fragments identiques. Le nombre de neutrons évaporé est calculé pour chaque fragment, où l'énergie cinétique de chaque neutron émis est tiré aléatoirement. Ainsi le nombre moyen de neutrons évaporé $\nu(Z, N)$ est la valeur moyenne du nombre de neutrons évaporés par les fragments de l'échantillon.

L'échantillon doit être assez important pour s'affranchir de tout biais statistique. Pour un échantillon de 1000 fragments, la distribution statistique de l'énergie cinétique est en bon accord avec la densité de probabilité. La comparaison entre la loi de probabilité $P_T(E_c^n)$ (éq. 1.20) et un tirage aléatoire de 1000 énergies cinétiques différentes, illustré à la figure 1.15, montre que le tirage échantillonne correctement la loi de probabilité. La distribution de neutrons évaporés n'est quasiment pas impactée par le passage d'un échantillon de 1000 à 10000 événements : le nombre de neutrons évaporés par un fragment de masse A ne diffère que de ± 0.02 neutron dans le cas de la réaction ${}^{235}\text{U}(n_{\text{th}}, f)$.

La différence de traitement de l'évaporation de neutrons est illustrée à la figure 1.16. La description simplifiée de l'évaporation de neutrons, courbe bleue sur la figure 1.16, par les fragments en l'absence de traitement de la compétition entre neutrons et photons permet d'obtenir des $\nu(A)$ à 0.2-0.3 neutron près par rapport à un traitement de cette compétition, points verts sur la figure 1.16. La partie évaporative du code Fifrelin [23] a été utilisée afin de traiter cette compétition où les

rendements et les énergies d'excitation des fragments sont fournis par le modèle SPY. L'erreur sur la valeur de $\nu(A)$ est suffisamment petite pour ne pas induire de structure non physique dans la distribution des $\nu(A)$.

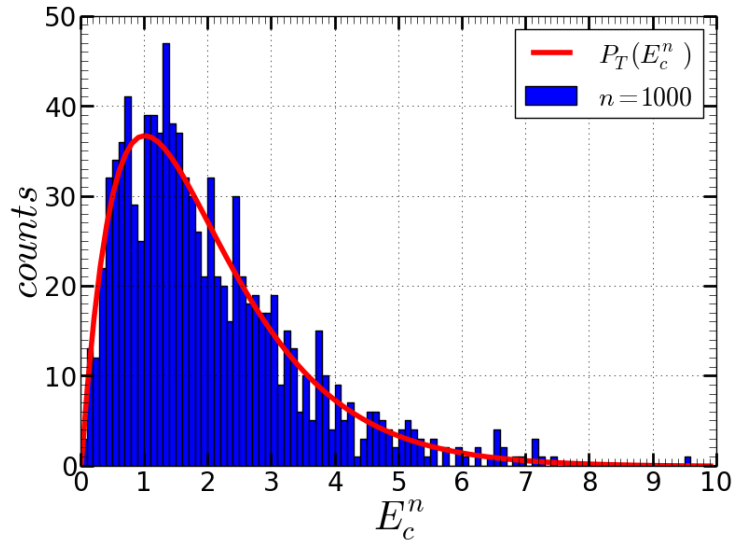


FIGURE 1.15 – Tirage monte carlo selon la loi $P_T(E_c^n)$ (éq. 1.20) avec $T = 1$ MeV pour une taille d'échantillon $n = 1000$.

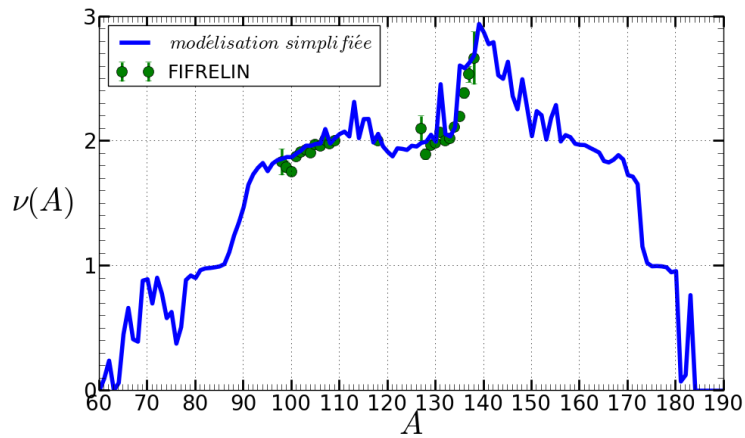


FIGURE 1.16 – Distribution de neutrons évaporés par les fragments issues de la réaction $^{235}\text{U}(n_{\text{th}}, f)$, calculée dans le cadre d'une description simplifiée du mécanisme d'évaporation de neutron (ligne bleu) sans compétition entre l'évaporation d'un neutron et d'un photon gamma ou en prenant en compte cette compétition grâce au code Fifrelin (ligne verte).

1.3 SYNTHÈSE

Le modèle SPY consiste en une description statique du système fissionnant au point de scission. La solution de référence correspond à une modélisation du système au point de scission par deux fragments coaxiaux à bord franc séparés par une distance inter-surface d de 5 fm. La description statistique des états accessibles par le système est effectuée dans le cadre d'un ensemble microcanonique où tous les microétats sont équiprobables. Les propriétés des fragments sont obtenues par un bilan en énergie disponible au point de scission suivi d'un traitement statistique. Comme l'illustre le schéma à la figure 1.17, il existe des relations d'interdépendance entre les différentes observables décrites dans la section 1.2.3 puisqu'elles dépendent toutes des propriétés intrinsèques des fragments. Les observables n'ont pas la même sensibilité aux propriétés intrinsèques comme illustré sur la figure 1.17 par des flèches de différentes épaisseurs selon la sensibilité. Le TKE est principalement déterminé par le calcul de l'énergie d'interaction coulombienne (E_{coul}) et le nombre de neutrons évaporés est principalement déterminé par l'énergie de déformation des fragments ainsi que la répartition de l'énergie disponible entre les deux fragments (x). Dans le cas des rendements de fission, les propriétés intrinsèques des fragments ont toutes une influence similaire sur ces derniers.

La comparaison de ces trois observables avec les données expérimentales renseigne sur l'importance de la structure nucléaire des fragments dans le processus de fission. Il est également possible, à l'aide de grandeurs complémentaires telle que la déformation moyenne des fragments, de corrélérer les tendances observées à l'évolution des diverses grandeurs fournies par le modèle SPY. La boucle de rétroaction partant des observables vers les cases "AE" et "AS", flèche grise sur la figure 1.17, illustre le fait que la comparaison entre les prédictions du modèle SPY et les données expérimentales peut servir de guide pour améliorer le modèle.

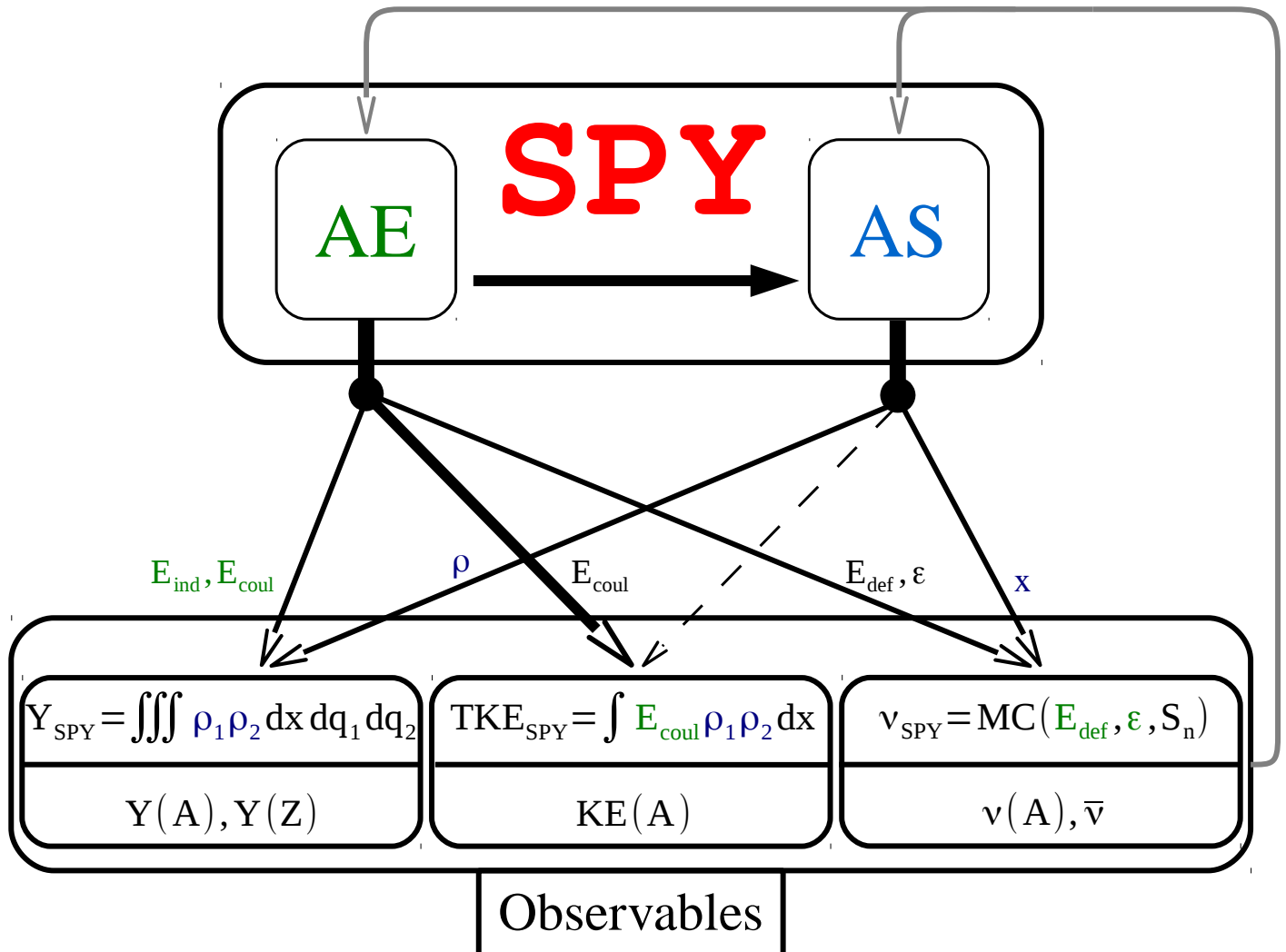


FIGURE 1.17 – Vue schématique du modèle SPY.

Résultats & systématiques

2

SOMMAIRE

2.1	CAS DE L'URANIUM 235 ET DU CALIFORNIUM 252	33
2.1.1	Rendements de fission	33
2.1.2	Energie cinétique	36
2.1.3	Neutrons évaporés	37
2.2	EXTENSION À L'ENSEMBLE DES NOYAUX SYNTHÉTISABLES	40
2.2.1	Fission des actinides	40
2.2.2	Fission des actinides légers et des transuraniens	40
2.2.3	TKE des transuraniens	43
2.3	SYSTÉMATIQUES SUR L'ENSEMBLE DES NOYAUX LIÉS	44
2.3.1	Mode de fission	44
2.3.2	Incomplétude des distributions des rendements de fission	47
2.3.3	Neutrons évaporés	48
2.3.4	Energie cinétique totale & déformation moyenne	48
2.4	ÉTUDE DE QUELQUES CHAÎNES ISOTOPIQUES ET ISOTONIQUES	52
2.4.1	Chaîne isotopique de l'uranium	52
2.4.2	Chaîne isotopique du dubnium	54
2.4.3	Chaîne isotopique du mercure	56
2.4.4	Chaîne isotopique $N_{CN} = 165$	57
2.5	SYNTHÈSE DES RÉSULTATS OBTENUS	58



Le modèle SPY est basé sur une description du système dans un état statique au point de scission, dans le cadre d'un ensemble microcanonique. Les aspects dynamiques du processus de fission ne sont pas pris en compte. Les résultats et systématiques présentés par la suite sont tous obtenus dans le cadre de la solution de référence. La modélisation de la fission proposée par la solution de référence du modèle SPY est-elle suffisante pour rendre compte des propriétés des fragments de fission malgré l'absence de description des effets dynamiques? Dans quelle mesure la structure nucléaire des

fragments de fission déterminent-elle leurs propriétés au point de scission, en particulier les rendements de fission ?

Ce chapitre sera consacré dans un premier temps à l'étude de la fission de l'uranium 235 induite par un neutron thermique et de la fission spontanée du californium 252. Pour ces deux cas, les principales observables seront comparées aux données expérimentales, permettant d'apporter des réponses concernant le lien entre la structure nucléaire des fragments et leurs propriétés extrinsèques telles que les rendements de fission ou leur énergie cinétique. Puis l'étude sera généralisée à l'ensemble des noyaux expérimentalement synthétisables avant d'être étendue à l'ensemble des noyaux liés, depuis le mercure jusqu'au meitnerium. Quelques chaînes isotopiques seront également étudiées afin de discuter l'origine de la corrélation entre la structure nucléaire des fragments et le système fissionnant.

2.1 CAS DE L'URANIUM 235 ET DU CALIFORNIUM 252

La fission de l'uranium 235 induite par un neutron thermique : $^{235}\text{U}(n_{\text{th}}, f)$ et la fission spontanée du californium 252 : $^{252}\text{Cf}(sf)$ vont être étudiées dans cette section.

2.1.1 Rendements de fission

Expérimentalement, il a été observé que la fission de ces deux noyaux est préférentiellement asymétrique avec un fragment lourd contenant environ 140 nucléons. Les rendements de fission expérimentaux présentés par la suite, sont ceux après évaporation de neutrons alors que ceux issus du modèle SPY sont avant évaporation. La comparaison entre ces rendements doit être effectuée en tenant compte de ce fait.

Dans les deux cas (Fig. 2.1 et Fig. 2.2), le modèle SPY reproduit bien le comportement asymétrique de la fission. Bien que les pics dans les distributions de rendements isobariques (Fig. 2.1, a et Fig. 2.2, a) soient très étroits par rapport aux données expérimentales, leur largeur est plus grande dans le cas du californium conformément aux données évaluées. Dans les deux distributions, le pic lourd est centré autour de 132 alors qu'expérimentalement il est centré autour de 140. L'écart est dû, dans les deux cas, au fort impact du ^{132}Sn qui présente une double fermeture de couche sphérique ($Z_{\text{frag}} = 50$ et $N_{\text{frag}} = 82$) rendant la fragmentation (^{132}Sn + complémentaire) énergétiquement très favorable. De plus le fragment complémentaire (Mo ou Cd) est mou donc facilement déformable. Ainsi, sous l'action de la répulsion coulombienne, les grandes déformations sont favorisées, augmentant l'énergie disponible de ces fragmentation. Les distributions isotopiques prédites par le modèle SPY (Fig. 2.1, b et Fig. 2.2, b) présentent les mêmes caractéristiques : les pics sont étroits et leurs positions sont déterminées par la fermeture de couche $Z_{\text{frag}} = 50$. Contrairement à ce qui est observé expérimentalement, il n'y a pas d'effets pair-impair dans les distributions de rendements prédites par le modèle SPY puisque l'appariement des fragments a été préalablement supprimé (voir section 1.2.1) car celui-ci avait un trop grand impact sur les rendements de fission.

Selon l'hypothèse UCD (*Unchanged Charge Density*) [25], la densité de charge Z/A est supposée conservée au cours de la fission : il est alors possible de déduire les rendements isotopiques à partir des rendements isobariques et réciproquement puisque $Z_{\text{frag}}^{\text{UCD}} = A_{\text{frag}}Z_{\text{CN}}/A_{\text{CN}}$. Expérimentalement, cette hypothèse n'est que partiellement vérifiée, il existe un écart entre la charge moyenne d'un fragment de masse A_{frag} et celle calculée avec l'hypothèse UCD. Pour les fragments légers ($A_{\text{frag}} < A_{\text{CN}}/2$), il y a une polarisation, *ie* un écart à l'hypothèse UCD, de +0.5 et de -0.5 pour les fragments lourds ($A_{\text{frag}} > A_{\text{CN}}/2$) [25]. Cette polarisation est liée à la faible énergie de liaison des fragments lourds ayant une grande densité de charge qui les rendent énergétiquement peu favorables. En effet plus un noyau a un nombre de protons élevé, plus il doit y avoir des neutrons pour contrer la répulsion entre les protons et assurer la cohésion du noyau. Ainsi, il est plus favorable de former une fragmentation dont le fragment lourd a une densité de charge plus

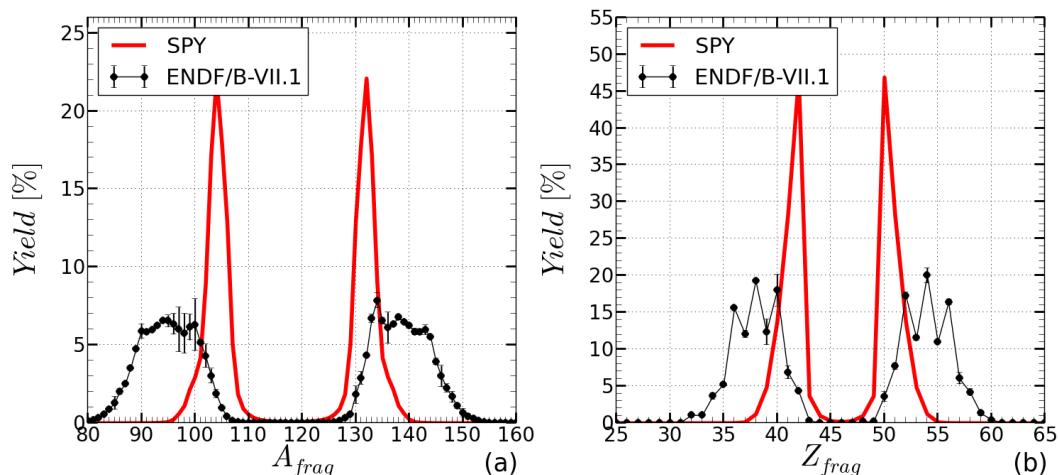


FIGURE 2.1 – Rendements (pré-neutron) de fission isobarique (a) et isotopique (b) pour la réaction $^{235}\text{U}(n_{th}, f)$, comparés aux données évaluée (post-neutron) [24].

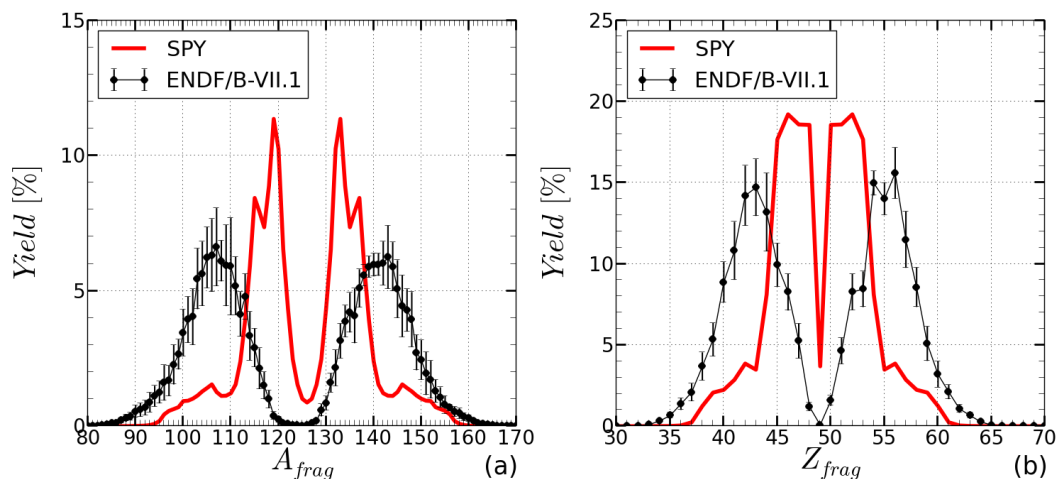


FIGURE 2.2 – Rendements (pré-neutron) de fission isobarique (a) et isotopique (b) pour la réaction $^{252}\text{Cf}(sf)$, comparés aux données expérimentales (post-neutron) [24].

petite (polarisation négative) que le fragment léger (polarisation positive) même si ils sont tous les deux riches en neutrons.

Le modèle SPY reproduit bien cette polarisation par rapport à l'hypothèse UCD, visible à la figure 2.3 où, en moyenne, il y a une polarisation de ± 0.5 . Cela indique que cette polarisation peut être obtenue à partir de considérations énergétiques sans prendre en compte les effets dynamiques du processus de fission. Cette polarisation est modulée par des effets de structure nucléaire, particulièrement importante pour le fragment de masse $A_{frag} = 132$, à cause de la double fermeture de couche du ^{132}Sn . Dans le cas de la réaction $^{235}\text{U}(n_{th}, f)$, il y a une polarisation moins importante pour les fragments de masse $A_{frag} \approx A_{CN}/2$ de 115 à 125 car les fragments ont des propriétés de structure nucléaire et une densité de charge similaires. Cette baisse de la polarisation autour des fragments symétriques n'est

pas constatée dans le cas de la réaction $^{252}\text{Cf}(sf)$, où les fermetures de couches $Z_{\text{frag}} = 50$ et $N_{\text{frag}} = 82$ interviennent dans les fragmentations quasi-symétriques induisant une polarisation.

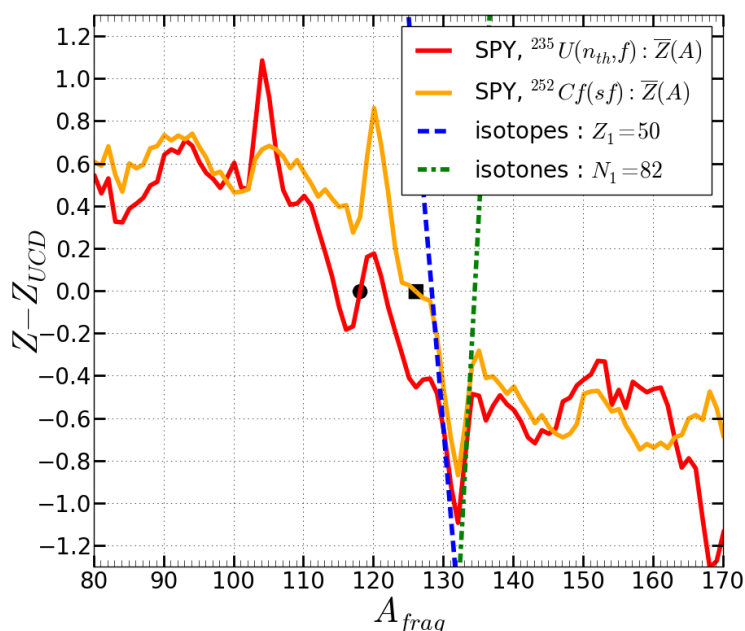


FIGURE 2.3 – Ecart de la charge moyenne $\bar{Z}(A_{\text{frag}})$ d'un fragment de masse A_{frag} par rapport à la charge UCD. Les symboles noirs indiquent la fragmentation symétrique : un cercle pour la réaction $^{235}\text{U}(n_{\text{th}}, f)$ et un carré pour la réaction $^{252}\text{Cf}(sf)$. Les lignes pointillées indiquent l'écart à UCD de l'ensemble des isotopes $Z = 50$ (bleu) ou des isotones $N = 82$ (vert).

Etant donné que les densités d'états sont indépendantes de la structure nucléaire du noyau, l'allure des rendements de fission prédits par SPY est due seulement à la présence de la structure nucléaire dans les énergies individuelles. Compte tenu du comportement exponentiel des densités d'états, il existe un lien direct entre les rendements de fission et le maximum d'énergie disponible de chaque fragmentation (Fig. 2.4) : les fragmentations les plus probables sont celles qui possèdent la plus grande énergie disponible. Une baisse globale de l'énergie disponible impacte faiblement les rendements.

Les maximums d'énergie disponible dépendent de la structure nucléaire des fragments notamment de la présence de fermetures de couche. La présence de fragments à couche fermée et sphérique est facilement identifiable grâce à leur déformation moyenne proche de zéro ($\bar{q} < 0.05$). Les fragments mous sont repérables grâce à leur grande déformation moyenne ($\bar{q} > 0.45$). La figure 2.5 représente la déformation moyenne des fragments en fonction de leur nombre de neutrons et de protons pour les deux réactions considérées. Une comparaison entre cette figure et la figure 2.4 révèle que les fragmentations les plus probables, *ie* libérant le plus d'énergie disponible, sont celles dont le fragment lourd est proche du noyau doublement magique ^{132}Sn . Le fragment léger associé est mou donc facilement déformable ($\bar{q} = 0.5$), ce qui permet de réduire l'énergie coulombienne sans pour autant augmenter l'énergie de déformation et ainsi augmenter l'énergie disponible.

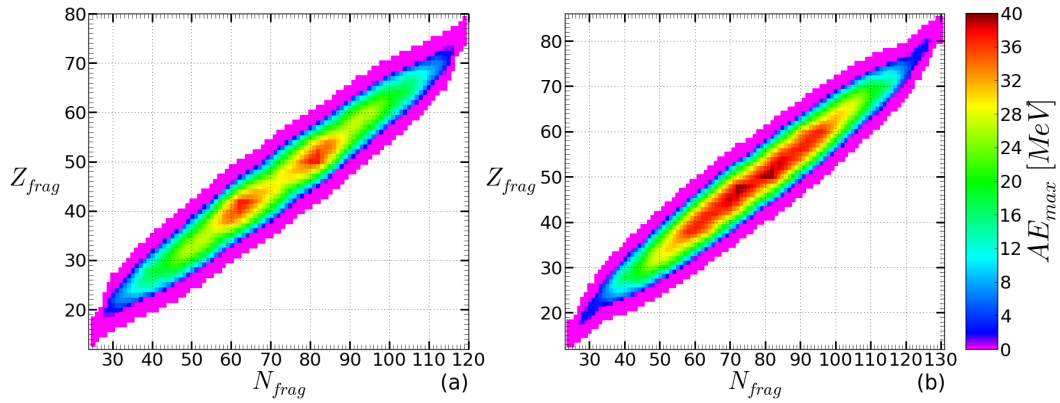


FIGURE 2.4 – Maximum d'énergie disponible de chaque fragmentation pour la réaction $^{235}\text{U}(n_{th}, f)$ (a) et pour la réaction $^{252}\text{Cf}(sf)$ (b).

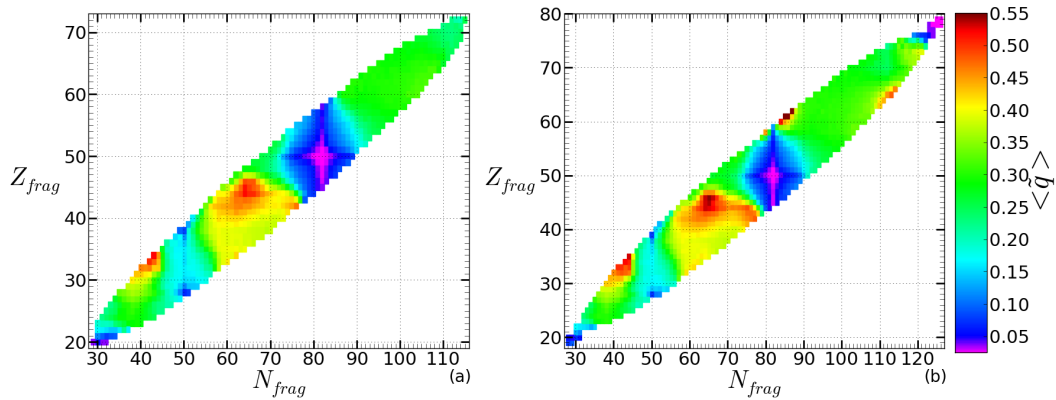


FIGURE 2.5 – Déformation moyenne $\langle \bar{q} \rangle (N_{frag}, Z_{frag})$ d'un fragment de masse A_{frag} pour la réaction $^{235}\text{U}(n_{th}, f)$ (a) et pour la réaction $^{252}\text{Cf}(sf)$ (b).

2.1.2 Energie cinétique

A présent, l'étude des distributions en énergie cinétique va apporter des renseignements sur deux points clé du modèle : la pertinence d'une distance de scission fixée à 5 fm et de la validité de la modélisation des fragments. Les distributions expérimentales en énergie cinétique des fragments (Fig. 2.6), en fonction de leur masse, présentent une structure particulière : l'énergie cinétique est constante pour les fragments légers ($A_{frag} < 105$), formant un plateau, et elle décroît linéairement pour les fragments lourds ($A_{frag} > 130$). Dans la zone de masse symétrique ($105 < A_{frag} < 130$), l'énergie cinétique chute rapidement de 20 MeV puis augmente d'environ de 10 MeV dans le cas de la réaction $^{235}\text{U}(n_{th}, f)$ (Fig. 2.6, a) formant un creux dans la distribution. Pour la réaction $^{252}\text{Cf}(sf)$ (Fig. 2.6, b), ce creux est moins important. Une distribution en énergie cinétique structurée est *a priori* la signature de la variabilité de la déformation des fragments en fonction de leur masse. La déformation moyenne des fragments en fonction de leur masse, calculé par SPY (Fig. 2.7, courbe rouge), indique que la variation de la déformation des fragments pour les deux réactions considérées est similaire. Les distributions

en énergie cinétique ne sont pas pour autant similaires puisque les fragmentations en jeu ne sont pas les mêmes. La distribution en énergie cinétique calculée par SPY est, dans les deux cas, globalement en accord avec la distribution expérimentale, justifiant le choix de $d = 5$ fm. La sensibilité à la distance d sera discutée à la section 3.2.1. La structure des distributions : plateau et creux n'est pas reproduite. Néanmoins de petites inflexions, visibles autour des masses 105 et 130 pour la réaction $^{235}\text{U}(n_{\text{th}}, f)$ (Fig. 2.6, a), coïncident avec la transition plateau-creux et creux-pente de la distribution expérimentale. Dans l'état actuel du modèle, la modélisation des fragments par des quadrupoles à bords francs et à densité de charge uniforme distant de 5 fm ne permet pas de reproduire de manière satisfaisante la structure des distributions en énergie cinétique mais le choix d'une distance d fixée à 5 fm quel que soit le système fissionnant est justifié par la bonne reproduction globale des distributions expérimentales.

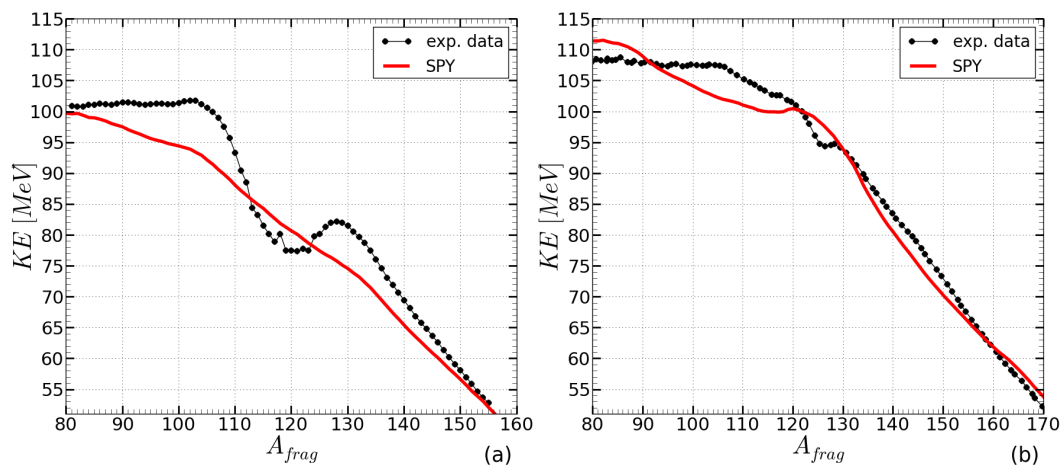


FIGURE 2.6 – Distribution en énergie cinétique moyenne en fonction de la masse A_{frag} du fragment pour la réaction $^{235}\text{U}(n_{\text{th}}, f)$ (a) et pour la réaction $^{252}\text{Cf}(sf)$ (b) comparées aux données expérimentales [26] (a) et [27] (b).

2.1.3 Neutrons évaporés

Désormais, les liens entre la distribution de neutrons évaporés par les fragments, en fonction de leur masse, leur déformation, leur énergie de déformation et leur énergie d'excitation vont être étudiés. A la figure 2.7, la comparaison entre la déformation moyenne $\langle \tilde{q} \rangle$ (A_{frag}) des fragments et la distribution expérimentale de neutrons évaporés semble indiquer que le nombre de neutrons évaporés est associé à la déformation des fragments. La corrélation entre déformation et nombre de neutrons évaporés est remarquable dans le cas de la réaction $^{235}\text{U}(n_{\text{th}}, f)$ (Fig. 2.7, a). Cette corrélation est trompeuse. D'une part, la déformation d'un fragment ne renseigne pas sur la valeur de son énergie de déformation. En effet, pour une déformation moyenne donnée $\langle \tilde{q} \rangle$ (A_{frag}), l'énergie de déformation d'un fragment peut varier de plusieurs MeV selon sa structure nucléaire. De ce fait, le nombre de neutrons évaporés peut varier de 1 ou 2 neutrons. Par exemple, les masses 90 et 160

ont la même déformation ($\tilde{q} = 0.3$) (Fig. 2.7, a ou b, courbe rouge) mais ils n'ont pas la même énergie de déformation (Fig. 2.8, a ou b, courbe orange). D'autre part, l'énergie d'excitation totale d'un fragment est la somme de son énergie de déformation E_{def} et de son énergie d'excitation intrinsèque ε .

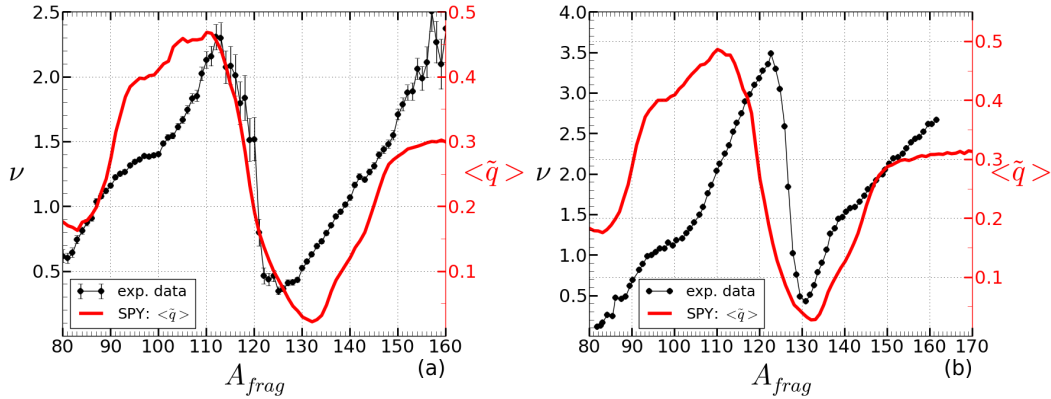


FIGURE 2.7 – Comparaison entre la distribution de neutrons évaporés et la déformation de la moyenne (\tilde{q}) (A_{frag}) en fonction de la masse A_{frag} du fragment pour la réaction $^{235}\text{U}(n_{\text{th}}, f)$ (a) et pour la réaction $^{252}\text{Cf}(sf)$ (b). Les distributions de neutrons évaporés expérimentaux est issues de [28] (a) et [27] (b)

Selon le modèle SPY, l'énergie d'excitation d'un fragment est toujours supérieure à son énergie de déformation (Fig. 2.8, courbe bleue). Seuls les fragments légers ont une énergie de déformation significative (> 1 MeV) en particulier pour les fragments tels que $110 < A_{\text{frag}} < 120$. L'énergie disponible entre les deux fragments, dans la description statistique actuelle, se répartit proportionnellement à la masse des fragments d'où l'accroissement de l'énergie d'excitation avec la masse A_{frag} du fragment comme cela a été mentionné à la section 1.2.2. L'énergie d'excitation totale d'un fragment de masse A_{frag} (Fig. 2.8, courbe verte) présente une structure à double pics localisées en $A_{\text{frag}} = 110$ et 130 pour la réaction $^{235}\text{U}(n_{\text{th}}, f)$ et en $A_{\text{frag}} = 118$ et 150 pour la réaction $^{252}\text{Cf}(sf)$.

A la figure 2.9 est représenté la comparaison entre les distributions expérimentales du nombre de neutrons évaporés par les fragments et celles obtenues à partir de l'énergie d'excitation totale des fragments. La méthode de calcul du nombre de neutrons évaporés a été détaillée à la section 1.2.3. Dans les deux cas, le nombre de neutrons évaporés par les fragments lourds prédit par SPY est bien supérieur à celui observé. La structure caractéristique des distributions de neutrons évaporés, en dent de scie, n'est pas visible pour la réaction $^{235}\text{U}(n_{\text{th}}, f)$ et légèrement visible pour la réaction $^{252}\text{Cf}(sf)$. Le grand nombre de neutrons évaporés par les fragments lourds prédit par SPY signifie que l'énergie d'excitation prédite est importante. Ceci implique que la répartition de l'énergie disponible entre les deux fragments n'est pas forcément proportionnelle à la masse des fragments et que l'énergie disponible semble être légèrement surestimée. Cela peut également signifier qu'une description statistique de la fission au point de scission n'est forcément bien adapté.

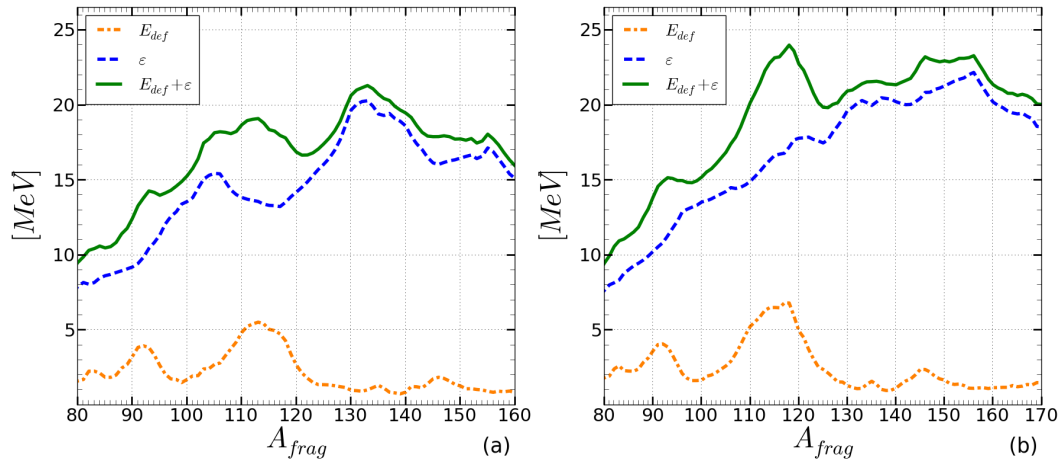


FIGURE 2.8 – Energie de déformation, d'excitation et totale en fonction de la masse A_{frag} du fragment pour la réaction $^{235}\text{U}(n_{th}, f)$ (a) et pour la réaction $^{252}\text{Cf}(sf)$ (b).

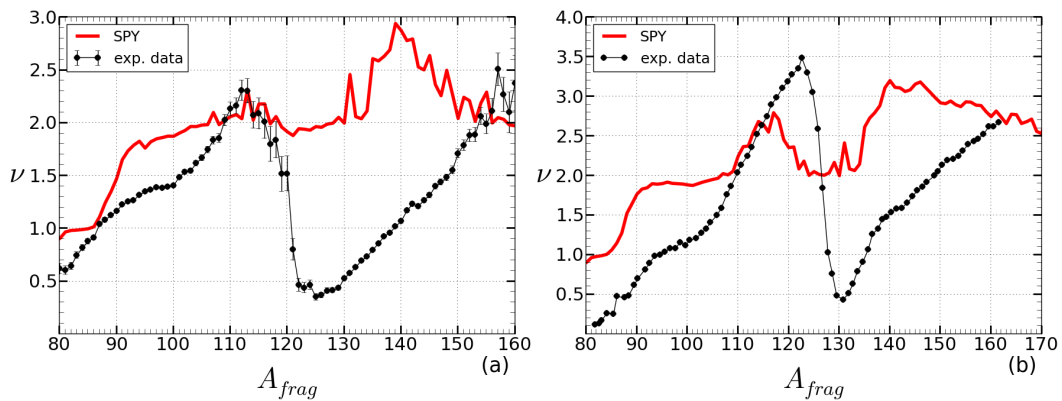


FIGURE 2.9 – Distribution de neutrons évaporés en fonction de la masse A du fragment pour la réaction $^{235}\text{U}(n_{th}, f)$ (a) et pour la réaction $^{252}\text{Cf}(sf)$ (b) comparés aux données expérimentales [28] (a) et [27] (b).

Qualitativement, le modèle SPY reproduit assez bien les caractéristiques générales des fragments de fission. Grâce à la rapidité de calcul des rendements de fission, il est possible d'étendre les prédictions du modèle SPY à l'ensemble des systèmes fissionnant expérimentalement synthétisés afin d'interpréter les tendances observées telles que la stabilisation du pic lourd des rendements de fission d'actinides ou l'évolution de la largeur des pics en fonction de la fissilité du système fissionnant.

2.2 EXTENSION À L'ENSEMBLE DES NOYAUX SYNTHÉTISABLES

Dans cette section, les prédictions du modèle SPY vont être étendues à l'ensemble des systèmes fissionnant actuellement mesurés. Les prédictions concerneront, dans un premier temps, la fission des actinides et, dans un second temps, la fission de noyaux riches en protons et les transuraniens ($Z_{CN} > 92$).

2.2.1 Fission des actinides

La figure 2.10 compile les rendements de fission isobariques des actinides évalués et ceux prédits par le modèle SPY. Dans les deux cas, la stabilisation du pic lourd est observée, centré autour de $A_{frag} = 140$ d'après les données évaluées. Selon les prédictions du modèle SPY, la stabilisation du pic lourd est centré autour de la masse $A_{frag} = 132$ à cause de la double fermeture de couches sphériques $Z_{frag} = 50$ et $N_{frag} = 82$. En effet, l'énergie disponible est maximale lorsque le fragment lourd est proche du ${}_{50}^{132}\text{Sn}$.

La largeur des pics σ_γ des rendements de fission expérimentaux augmente avec la fissilité (Fig. 2.11) de 8 à 14. Celles issues du modèle SPY sont systématiquement plus étroites dû à la prépondérance du ${}^{132}\text{Sn}$. Elle tend également à augmenter avec la fissilité. Cette augmentation est due à la baisse de la domination des fragmentations autour de $({}^{132}\text{Sn} + X)$. Ainsi les pics sont moins hauts et donc plus larges étant donné que les rendements sont normalisés à 200 %. Les fragmentations très différentes de cette dernière ont des énergies disponibles maximales de plus en plus proche de $({}^{132}\text{Sn} + X)$ avec la fissilité. Cette baisse de la domination des fragmentations autour de $({}^{132}\text{Sn} + X)$ est visible en comparant la carte des énergies disponibles maximales pour la réaction ${}^{235}\text{U}(n_{th}, f)$ et celle de la réaction ${}^{252}\text{Cf}(sf)$ (Fig. 2.5). Dans le cas de la réaction ${}^{252}\text{Cf}(sf)$, il y a davantage de fragmentations qui ont une énergie disponible maximale proche de celle de la fragmentation $({}^{132}\text{Sn} + X)$.

2.2.2 Fission des actinides légers et des transuraniens

La mesure des rendements isotopiques issus de la fission d'actinides légers par excitation coulombienne [29] permet d'étudier des tendances à plus grande échelle, en particulier d'observer la transition entre la fission symétrique vers la fission asymétrique. La comparaison entre les rendements isotopiques expérimentaux et ceux calculés avec le modèle SPY (Fig. 2.12) montre que cette transition est assez bien reproduite dans cette région des actinides, en particulier pour la chaîne isotopique du protactinium.

Dans la région des transuraniens, les rendements de fission isobariques expérimentaux permettent d'observer la transition entre la fission asymétrique vers la fission symétrique. Elle est bien reproduite par le modèle SPY pour la chaîne isotopiques des fermiums (Fig. 2.13). Pour la chaîne des nobéliums, la transition est également reproduite. Cependant, selon le modèle SPY, cette transition s'effectue via un passage par une fission à trois pics où la fission asymétrique et symétrique

sont en compétition. Cela ne semble pas être le cas expérimentalement. Cependant, dans cette région, les noyaux fissionnants sont difficilement synthétisables d'où une statistique des rendements de fission faible.

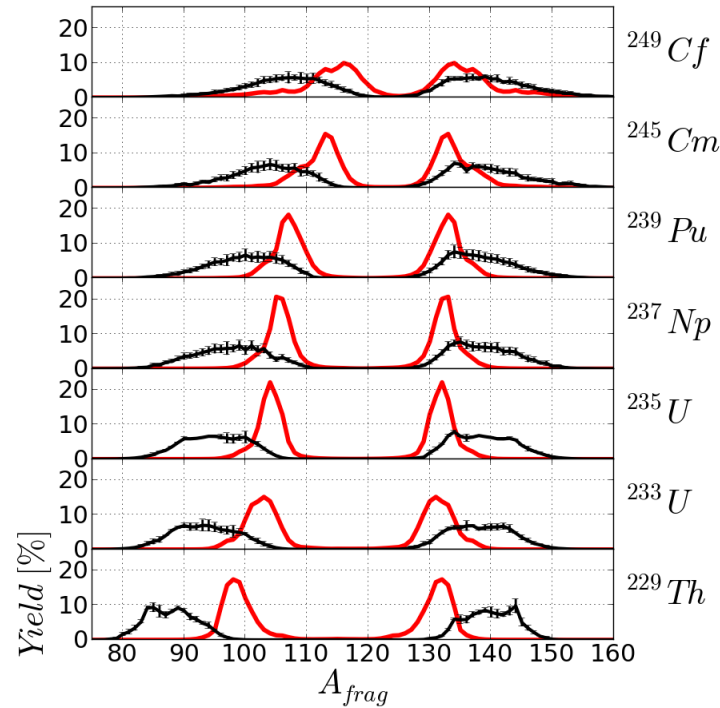


FIGURE 2.10 – Rendement de fission induite par capture d'un neutron thermique calculés par SPY (rouge) comparés aux données expérimentales (noir) issues de la librairie ENDF/B-VII.1.

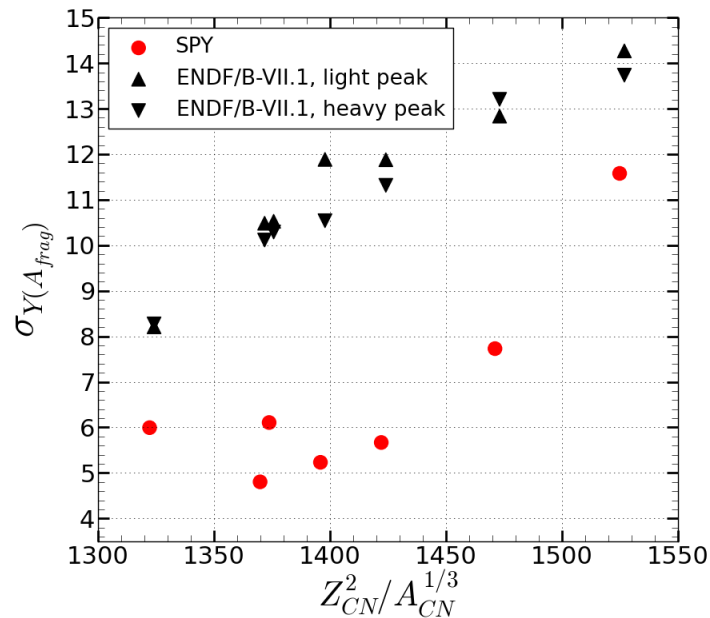


FIGURE 2.11 – Evolution de la largeur des pics σ_Y des rendements de fission présentés à la figure 2.10 en fonction de la fissilité du noyau fissionnant.

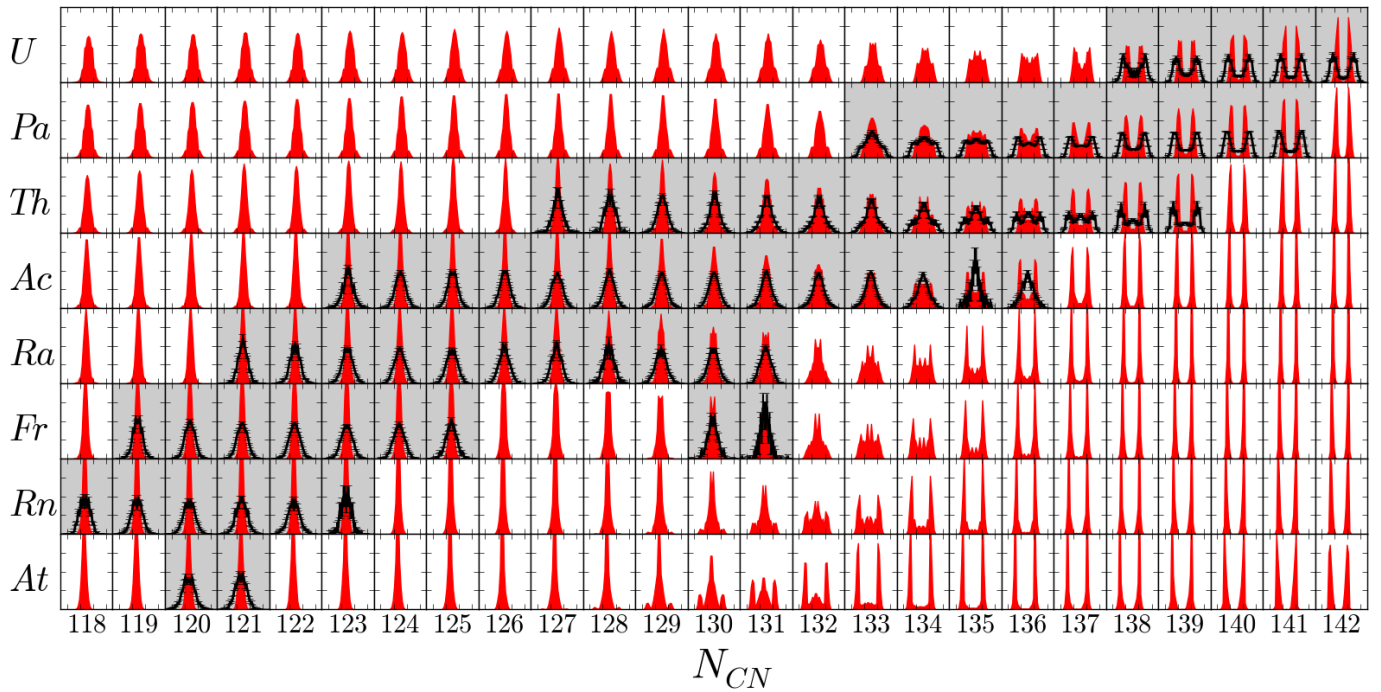


FIGURE 2.12 – Rendements de fission isotopiques ($Y(Z)$) d'actinides légers calculés avec SPY (rouge) comparés aux données expérimentales [29] (noir).

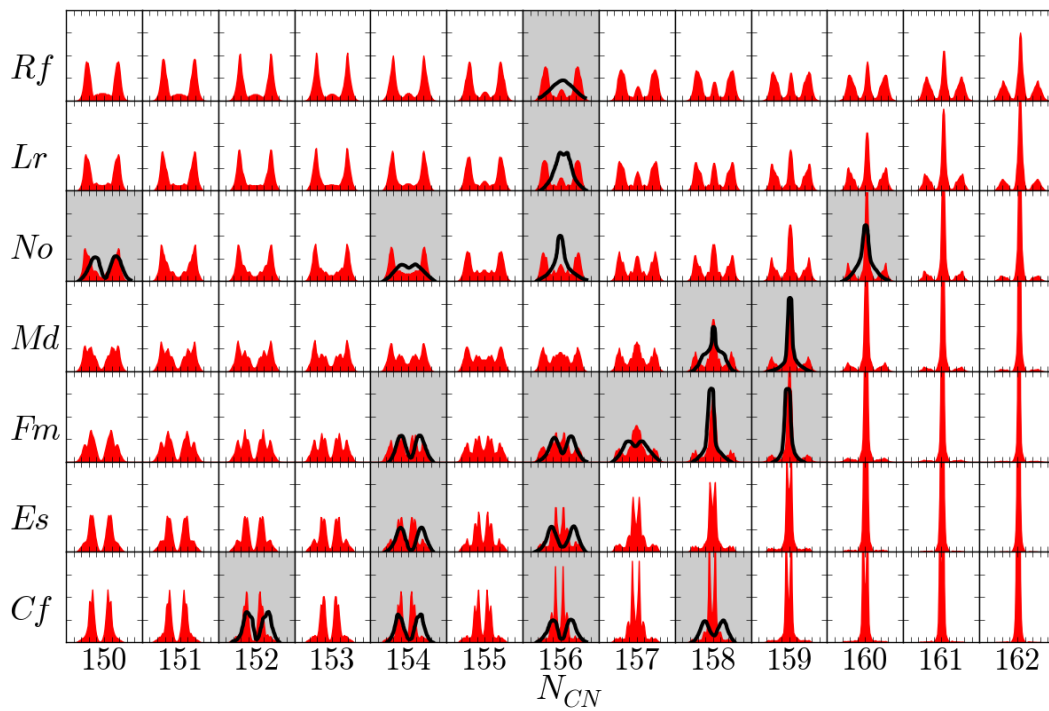


FIGURE 2.13 – Rendements de fission isobariques ($Y(A)$) d'actinides calculés avec SPY (rouge) comparés aux données expérimentales [30] (noir).

2.2.3 TKE des transuraniens

La comparaison des TKE expérimentaux [30] et de la formule de Viola [31] avec les TKE obtenues avec le modèle SPY montre un bon accord (Fig. 2.14). Les écarts observés sont liés au problème de reproduction des KE et des rendements de fission qui impactent le calcul du TKE. En effet, les distributions des rendements de fission prédites par les modèle SPY présentent des pics étroits. De plus les KE prédits par le modèle SPY présentent quelques écarts avec les KE expérimentaux.

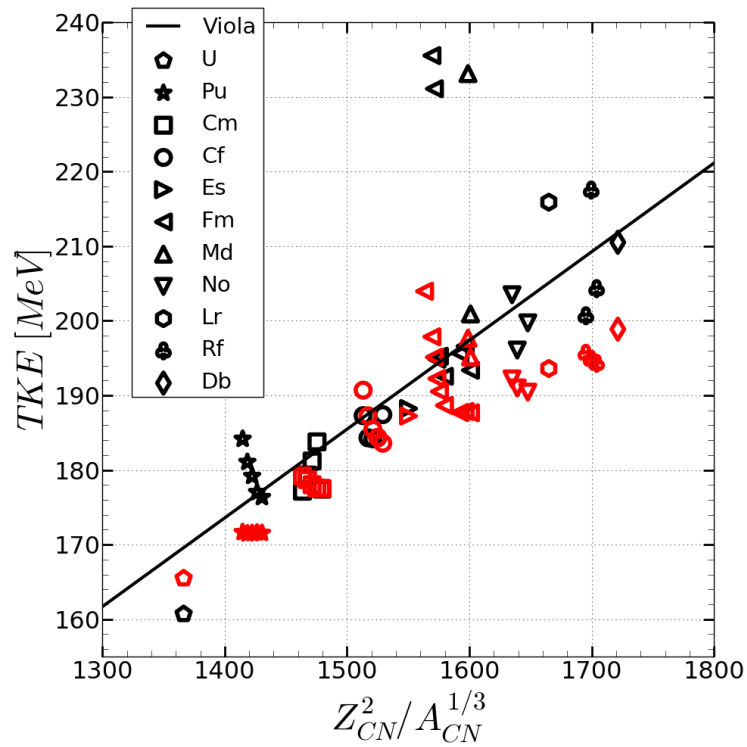


FIGURE 2.14 – Energie cinétique moyenne en fonction de la fissilité du système fissionnant calculée avec SPY (rouge) comparées aux données expérimentales [30] (noir) et à la formule de Viola [31] (ligne noire).

2.3 SYSTÉMATIQUES SUR L'ENSEMBLE DES NOYAUX LIÉS

Trois systématiques vont être étudiées : l'évolution du mode de fission (symétrie, asymétrique ...) caractérisé par le nombre de pics dans la distribution des rendements de fission isobariques, l'énergie cinétique totale et le nombre moyen de neutrons évaporés en fonction du nombre de protons et de neutrons du système fissionnant.

2.3.1 Mode de fission

Le nombre de pics d'une distribution est déterminé à l'aide de la fonction répartition $Y_r(A_{\text{frag}})$ des rendements de fission $Y(A_{\text{frag}})$. La fonction de répartition, courbe bleue de la figure 2.15, (notée CDF pour *Cumulative distribution function*) :

$$Y_r(A_{\text{frag}}) = \sum_0^{A_{\text{frag}}} Y(A') dA' \quad (2.1)$$

correspond à la somme des rendements jusqu'à la masse A_{frag} . Elle a une structure en marche d'escalier où chaque marche est associée à un pic de la distribution $Y(A_{\text{frag}})$.

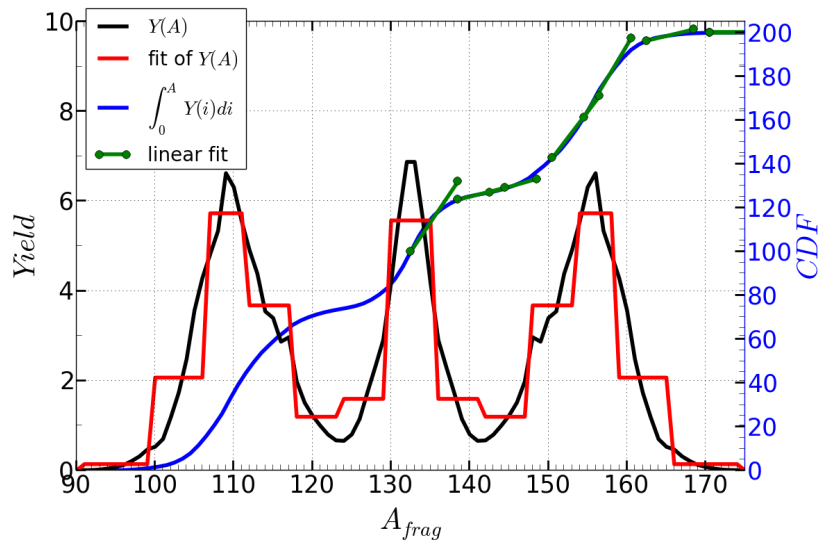


FIGURE 2.15 – Lien entre les rendements de fission isobarique de ^{265}Db avec une énergie d'excitation de 8 MeV (courbe noire) et sa fonction de répartition (CDF= Cumulative distribution function) (courbe bleu). Est également représenté la courbe d'ajustement des rendements de fission isobariques par une fonction en escalier (courbe rouge).

Le calcul du nombre de pics s'effectue en trois étapes, en commençant par l'ajustement de la fonction de répartition par une fonction définie par morceaux où chaque morceau est une fonction linéaire (Fig. 2.15, ensemble des courbes vertes). Les différents intervalles sont définis par l'intersection entre deux fonctions linéaires successives. Puis dans chaque intervalle, la valeur moyenne des rendements de fission est calculée (Fig. 2.15, courbe rouge) ainsi la distribution

des rendements de fission est ajustée par une fonction en escalier (*ie* constante par morceaux). A partir de cette fonction, il est possible de dénombrer les pics : un pic est caractérisé par un accroissement puis une décroissance de la fonction en escalier. Divers critères sur l'ajustement de la fonction de répartition et sur le comptage des pics permettent d'éliminer les petites structures de la distribution des rendements telles que de petites fluctuations localisées sur un intervalle de quelques masses (par exemple, la fluctuation autour de la masse 150, Fig. 2.15)

L'algorithme décrit ci-dessus permet d'établir la systématique du mode de fission en fonction du nombre de neutrons et de protons du système fissionnant pour l'ensemble des noyaux liés de l'ytterbium jusqu'au dubnium. D'une part, le modèle SPY reproduit la fission asymétrique des actinides (Fig. 2.16). La distribution des rendements de fission isobariques d'un noyau fissionnant asymétriquement présente deux pics : un léger ($A_{\text{frag}} < A_{\text{CN}}/2$) et un lourd ($A_{\text{frag}} > A_{\text{CN}}/2$). D'autre part, il reproduit la fission symétrique des noyaux légers, la distribution des rendements de fission isobariques présente un seul pic. La fission asymétrique inattendue des noyaux très légers tel que le mercure 180, dont le mode de fission a été découvert récemment [32], est également prédit par le modèle SPY, cela montre que la nature asymétrique de la fission pour ces noyaux peut être comprise uniquement en considérant la structure nucléaire des fragments [16].

Dans certains cas, il y a compétition entre la fission symétrique et la fission asymétrique donnant naissance à une fission à trois pics. En plus de ces trois modes de fission connus, le modèle SPY prédit un quatrième mode correspondant à une fission doublement asymétrique, résultant de la compétition entre une fission asymétrique et une fission très asymétrique. Ce mode de fission concerne les systèmes fissionnant ayant entre 85 et 95 protons et autour de 175 neutrons, dans la région de masse 280. Cette fission à quatre pics offre, dans le cadre d'un modèle de nucléosynthèse stellaire par coalescence d'étoiles à neutrons, une possible explication des taux de production des éléments lourds ($A > 130$) dans le système solaire, en particulier la production des terres rares ($A \approx 160$) [33].

De manière générale, le mode de fission est principalement régi par le nombre de neutrons du système fissionnant où cinq transitions sont observées. Une transition asymétrique-symétrique autour de $N_{\text{CN}} = 100$ dans la région des noyaux légers, une transition symétrique-asymétrique autour de $N_{\text{CN}} = 130$ dans la région des noyaux légers et des actinides. Dans la zone des noyaux exotiques, il y a la présence d'une bande entre $N_{\text{CN}} = 160$ et $N_{\text{CN}} = 175$ à l'intérieure de laquelle la fission symétrique et à trois pics sont en compétition, dépendant du nombre de protons. Au delà de $N_{\text{CN}} = 190$, la fission est globalement symétrique. L'étude détaillée des divers transitions observées sera effectuée à la section 2.4.

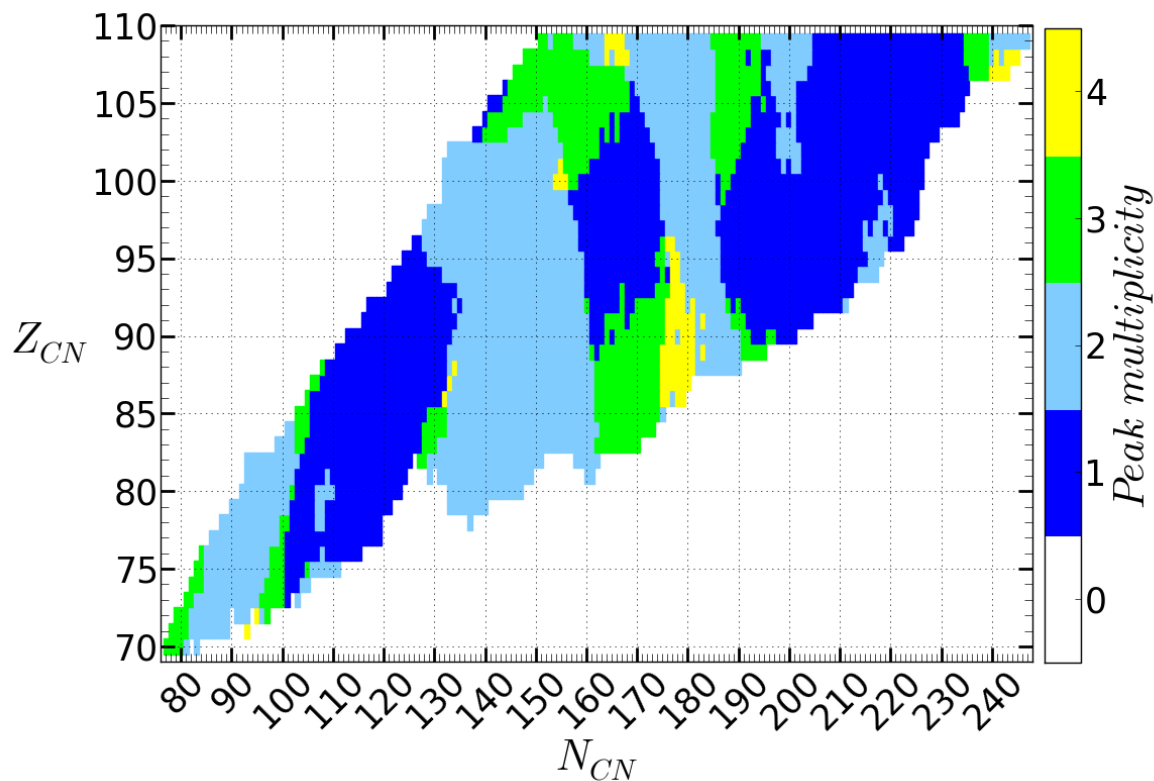


FIGURE 2.16 – Nombre de pics dans les distributions de rendements de fission isobariques en fonction du système fissionnant pour une énergie d'excitation de 8 MeV.

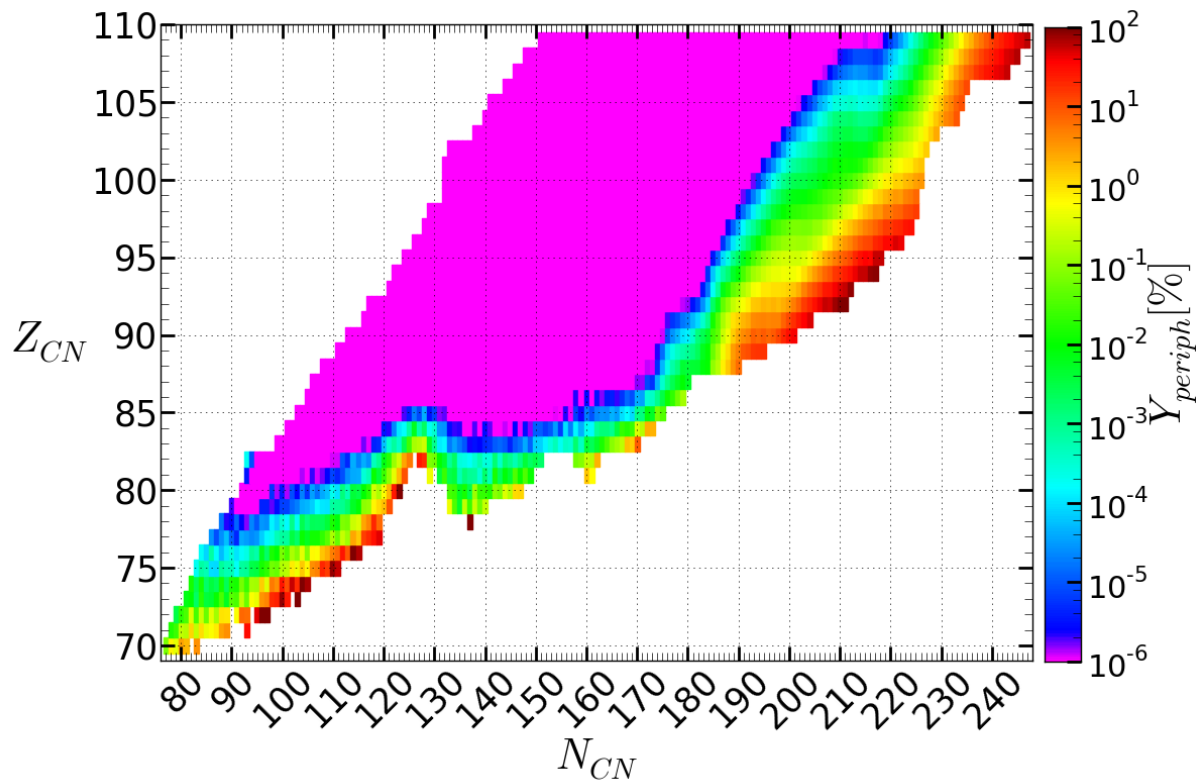


FIGURE 2.17 – Somme des rendements des fragmentations périphériques (Y_{periph}) en fonction du système fissionnant pour une énergie d'excitation de 8 MeV.

2.3.2 Incomplétude des distributions des rendements de fission

Dans le modèle SPY, seuls les fragments liés sont pris en compte, ce qui distord les distributions des rendements de fission dans le cas de la fission d'un noyau très riche en neutrons. Dans ce cas, les distributions sont incomplètes. Par exemple, la figure 2.18 montre la distribution des rendements de fission du plutonium 274 où certaines fragmentations sont absentes notamment dans la zone symétrique. Elles sont absentes car l'un des deux fragments est non lié car trop riche en neutrons. Ainsi, la validité des prédictions effectuées par le modèle SPY est discutable pour de tels noyaux. Dans le cas du plutonium 274, les fragmentations manquantes ont un rendement négligeable donc elles n'ont aucun impact sur les prédictions.

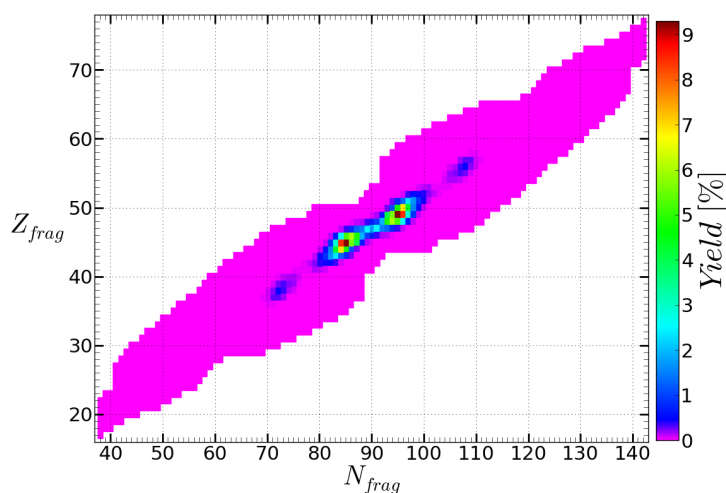


FIGURE 2.18 – Distributions des rendements de fission de $^{274}_{94}\text{Pu}$ pour une énergie d'excitation de 8 MeV.

La somme des rendements des fragmentations périphériques (Y_{periph}) constitue un critère permettant de quantifier l'importance des fragmentations non liées. Une fragmentation est dite périphérique dans le cas où elle correspond à la fragmentation la plus asymétrique (énergétiquement possible) pour un couple (Z_1, Z_2) donné. Lorsque $Y_{\text{periph}} < 0.1\%$ l'impact des fragmentations non liées est négligeable. La figure 2.17 montre que peu de systèmes fissionnant sont réellement impactés.

La validité des prédictions effectuées par le modèle SPY est également critiquable dans le cas où peu de fragmentations (< 300) sont énergétiquement accessibles. D'après la figure 2.19, où figure le nombre de fragmentations énergétiquement accessibles en fonction du système fissionnant, seuls les noyaux légers ($Z_{\text{CN}} < 85$) et riches en neutrons sont particulièrement sensibles au nombre de fragmentations disponibles. Pour ces noyaux, possédant 8 MeV d'énergie d'excitation, peu d'énergie est disponible est libérée au cours de la fission. Dans certains cas la fission est énergétiquement impossible, comme dans la région $N_{\text{CN}} = 125$ et $Z_{\text{CN}} = 80$.

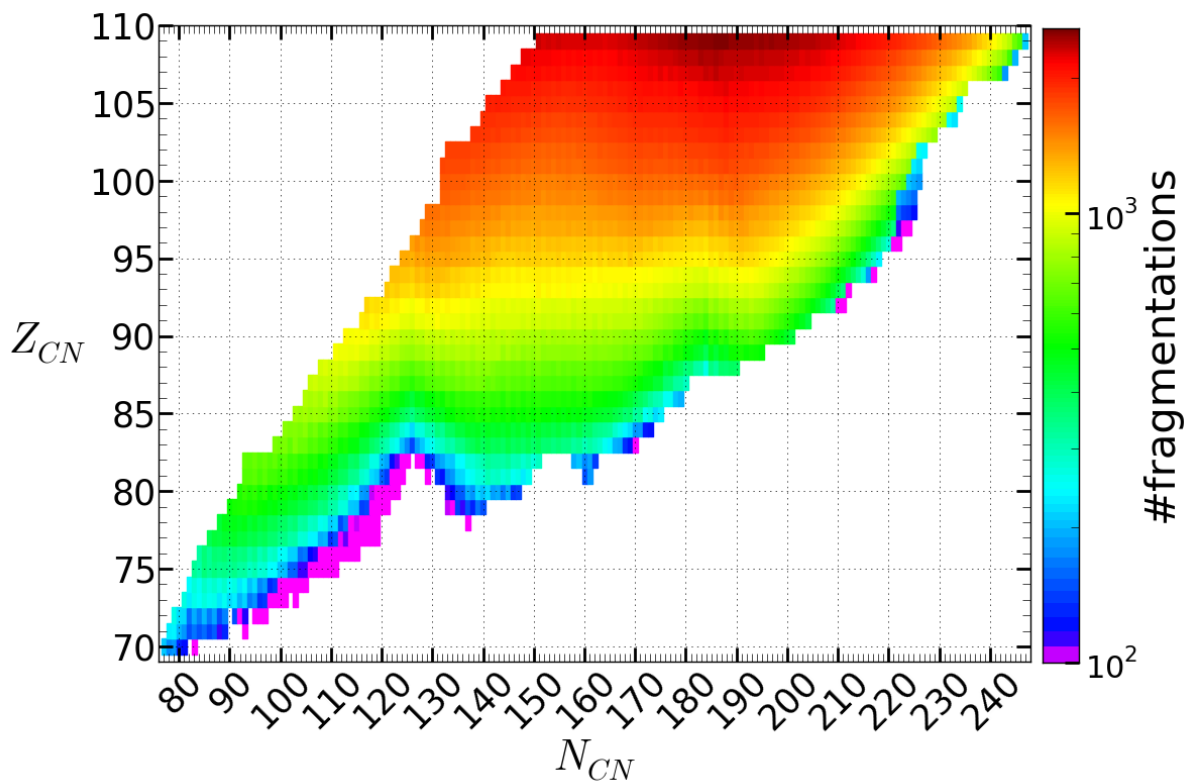


FIGURE 2.19 – Nombre de fragmentations énergétiquement (#fragmentations) possibles en fonction du système fissionnant pour une énergie d'excitation de 8 MeV.

2.3.3 Neutrons évaporés

De manière analogue à la systématique du mode de fission, il est possible d'établir la systématique du nombre de neutrons évaporés $\bar{\nu}$ en fonction du système fissionnant. Cette systématique montre que le nombre de neutrons évaporés augmente de manière régulière avec la masse A_{CN} du système fissionnant à cause de l'augmentation de l'énergie disponible moyenne avec la masse du système fissionnant (fig. 2.20). L'effet pair/impair est induit par les énergies de liaison des neutrons. En outre, plus le système fissionnant est riche en neutrons, plus les fragments le sont, évaporant plus facilement des neutrons. En effet, plus un fragment est riche en neutrons, plus l'énergie de liaison du dernier neutron lié diminue. Il ne semble pas y avoir de corrélation entre le mode de fission et le nombre de neutrons évaporés. Le nombre de neutrons évaporés est globalement surestimé.

2.3.4 Energie cinétique totale & déformation moyenne

La systématique du TKE en fonction du système fissionnant présente une structure assez régulière (Fig. 2.21). Le TKE augmente en fonction du nombre de protons du système fissionnant à cause de la dépendance en $Z_1 \times Z_2$ de l'énergie coulombienne. L'évolution régulière du TKE est perturbée par un accroissement brutal pour $160 < N_{CN} < 170$ et $Z_{CN} > 95$. Cet accroissement brutal a déjà été

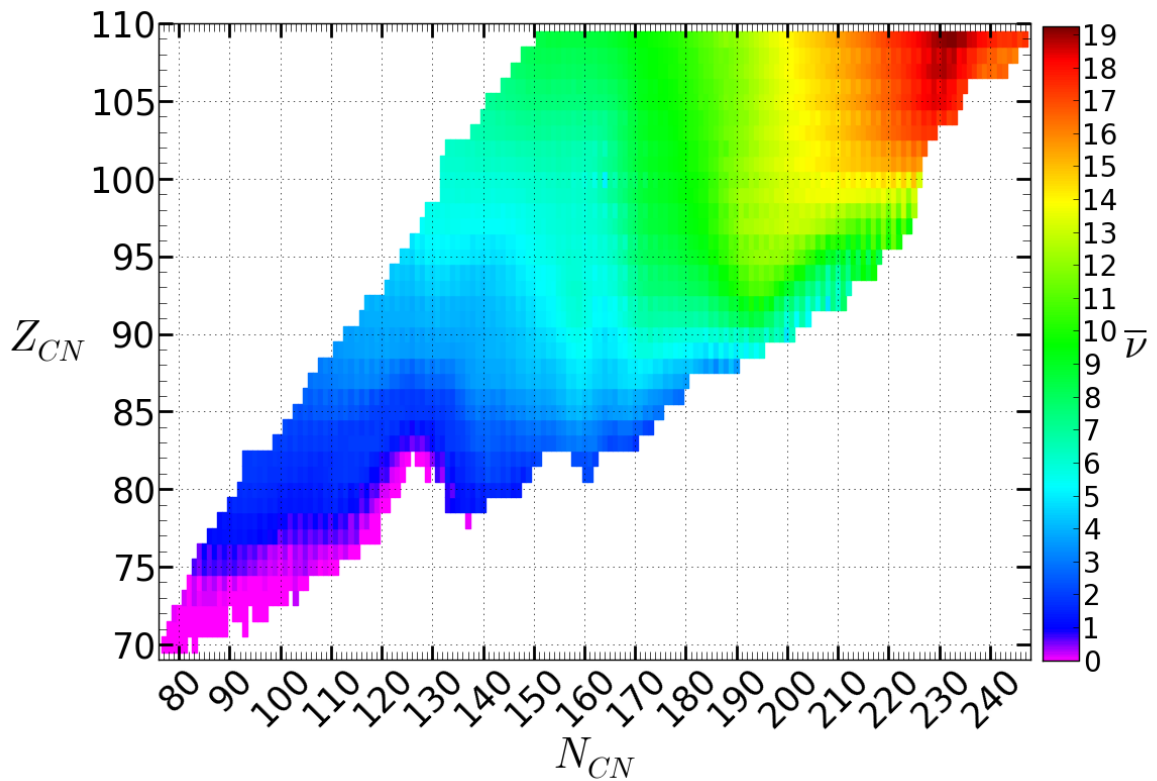


FIGURE 2.20 – Nombre moyen de neutrons prompts évaporés $\bar{\nu}$ en fonction du système fissionnant pour une énergie d'excitation de 8 MeV.

observé pour trois noyaux : ^{258}Fm , ^{259}Fm et ^{260}Md qui s'écartent significativement de la systématique de Viola (Fig. 2.14).

L'origine de cet accroissement brutal est la production de fragments symétriques et sphériques (Fig. 2.16 et Fig. 2.22) par les systèmes fissionnants situés dans cette zone. Dans la zone $155 < N_{\text{CN}} < 175$ et $85 < Z_{\text{CN}} < 105$ les fragments sont peu déformés ($\tilde{q} < 0.15$) à cause de la proximité de la fermeture de couche $N_{\text{frag}} = 82$ d'où la position de cette zone autour de $N_{\text{CN}} = 164 = 2 \times 82$. A l'intérieur de cette zone, les fragments sont sphériques ($\tilde{q} < 0.05$) lorsque $155 < N_{\text{CN}} < 175$ et $98 < Z_{\text{CN}} < 103$ où la fermeture de couche $Z_{\text{frag}} = 50$ vient s'ajouter à la couche $N_{\text{frag}} = 82$, le cas extrême étant le $^{264}_{100}\text{Fm}_{164}$. Dans la zone $110 < N_{\text{CN}} < 140$ et $80 < Z_{\text{CN}} < 90$, les fragments sont, successivement et en fonction du nombre de neutrons N_{CN} , moyennement déformés ($\tilde{q} = 0.25 - 0.30$) puis très déformés ($\tilde{q} = 0.40 - 0.45$) finalement faiblement déformés ($\tilde{q} = 0.10$) avant de revenir moyennement déformés. Cette variation de la déformation moyenne a un impact visible sur le TKE bien que moins important que l'accroissement brutal mentionné plus haut. Elle est corrélée à la transition asymétrique - symétrique - asymétrique dans cette même zone (Fig. 2.16).

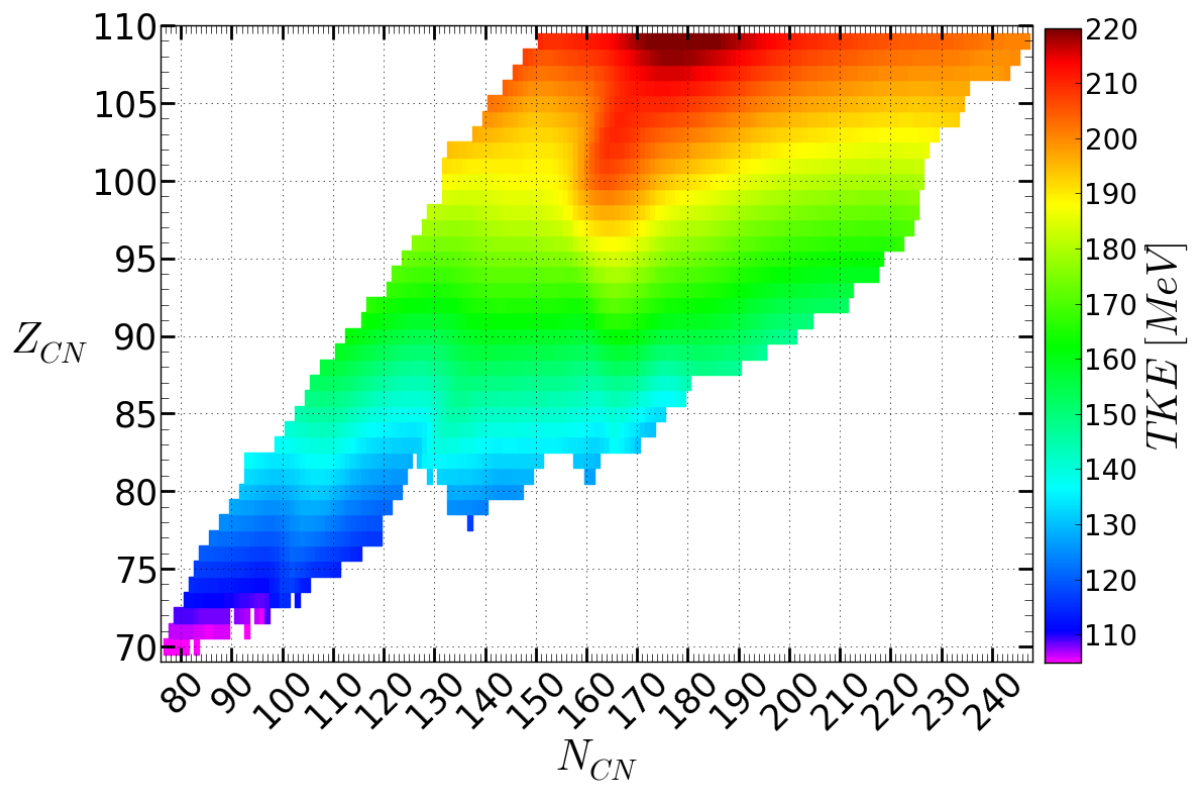


FIGURE 2.21 – Energie cinétique totale moyenne en fonction du système fissionnant pour une énergie d'excitation de 8 MeV.

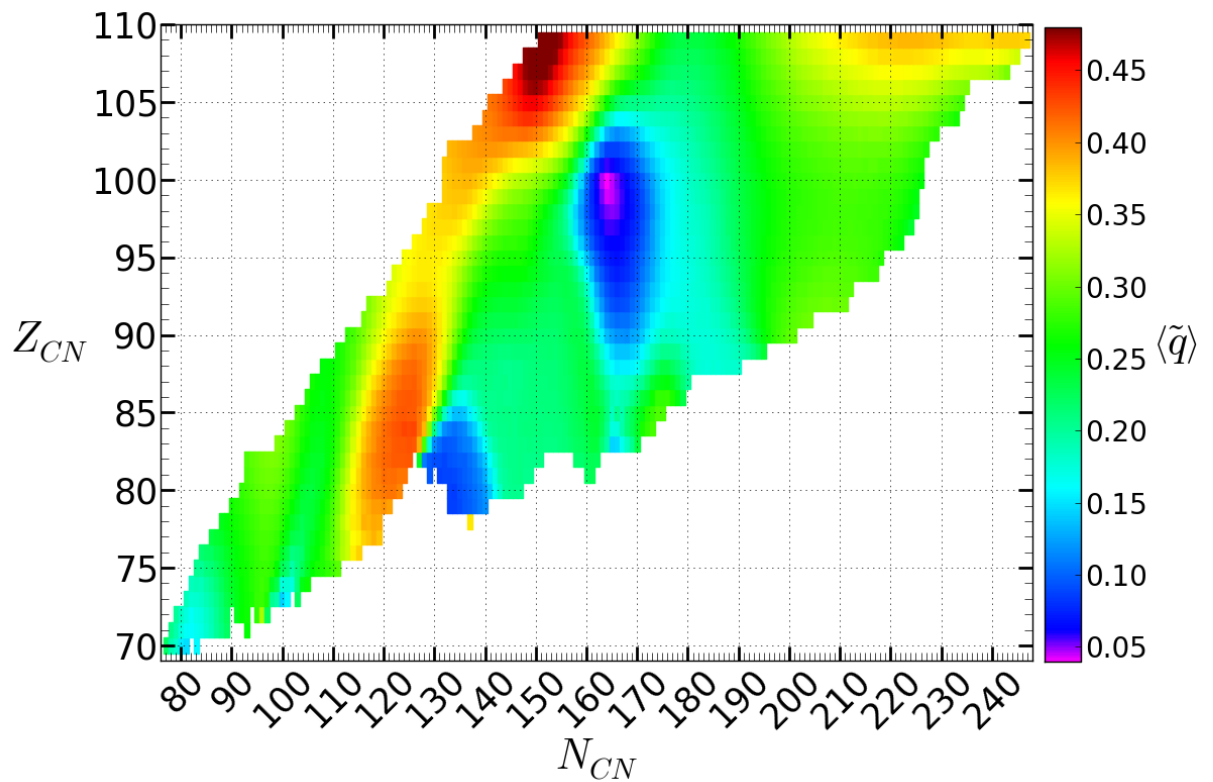


FIGURE 2.22 – Déformation moyenne des fragments en fonction du système fissionnant pour une énergie d'excitation de 8 MeV.

Une sélection sur le mode de fission, symétrique (Fig. 2.23, a) ou asymétrique (Fig. 2.23, b), met en évidence une régularité remarquable du TKE en fonction de la fissilité. Les noyaux fissionnant symétriquement peuvent être regroupés en trois groupes en fonction de leur nombre de neutrons : $100 < N_{CN} < 150$, $150 < N_{CN} < 180$ et $180 < N_{CN} < 250$. Chacun de ces groupes suit la systématique de Viola à un décalage global près. Le groupe $150 < N_{CN} < 180$ est un peu plus dispersé que les deux autres puisqu'un certain nombre de noyaux sont dans la périphérie de la zone d'accroissement brutal mentionnée plus haut. Les noyaux fissionnant asymétriquement peuvent être regroupés en quatre groupes : $80 < N_{CN} < 103$, $103 < N_{CN} < 120$, $120 < N_{CN} < 165$ et $165 < N_{CN} < 250$. Chacun de ces groupes suit la systématique de Viola à un décalage global près, à part la population $120 < N_{CN} < 165$ qui suit moins bien la systématique de Viola où les TKE sont assez dispersés par rapport à la tendance générale car la zone de fission asymétrique $130 < N_{CN} < 160$ est étendue. Les noyaux du groupe $120 < N_{CN} < 165$ ayant une fissilité supérieure à 1700, s'écartent davantage de la systématique de Viola car il sont dans la zone d'accroissement brutal. Le groupe $165 < N_{CN} < 250$ se superpose de manière très satisfaisante à la systématique de Viola.

La systématique de Viola et les TKE des systèmes fissionnant symétriquement ou asymétriquement calculés par le modèle SPY sont en adéquation. Cela conforte la pertinence de l'hypothèse d'une distance d constante quel que soit le système fissionnant.

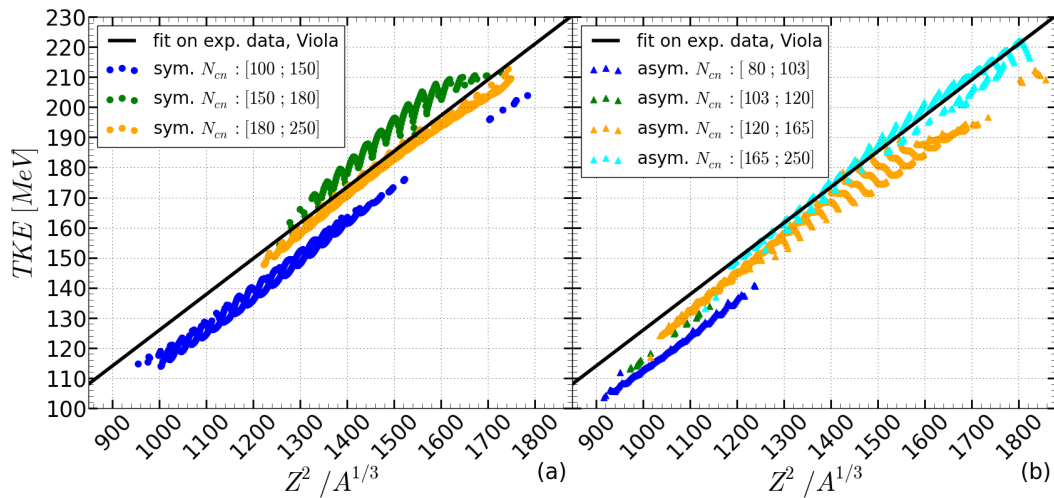


FIGURE 2.23 – Energie cinétique totale moyenne en fonction du système fissionnant pour une énergie d'excitation de 8 MeV pour les noyaux fissionnant symétriquement (a) ou asymétriquement (b) comparée à la formule de Viola [31] (ligne noire).

2.4 ÉTUDE DE QUELQUES CHAÎNES ISOTOPIQUES ET ISOTONIQUES

La systématique des modes de fission présente une structure qui dépend du nombre de neutrons du système fissionnant. Afin de corrélérer la transition entre deux modes avec la structure nucléaire des fragments, trois chaînes isotopiques représentatives de l'ensemble de la systématique vont être étudiées : la chaîne des uraniums ($Z_{CN} = 92$), des dubniums ($Z_{CN} = 105$) et des mercures ($Z_{CN} = 80$). De plus la chaîne isotopique $N_{CN} = 165$ sera également discutée.

2.4.1 Chaîne isotopique de l'uranium

En fonction du nombre de neutrons, un isotope de l'uranium va successivement (Fig. 2.25) fissionner symétriquement pour $208 < A_{CN} < 227$ puis asymétriquement pour $227 < A_{CN} < 252$ où il y a stabilisation du pic lourd autour de $A_{frag} = 132$. Il fissionne à nouveau symétriquement pour $252 < A_{CN} < 260$, la fission est à trois puis quatre pics pour $260 < A_{CN} < 272$ avant de redevenir asymétrique pour $274 < A_{CN} < 280$ où il y a stabilisation du pic léger. Finalement pour les isotopes très riches en neutrons avec $A_{CN} > 280$, la fission est symétrique.

Les rendements isobariques ne permettent pas de faire clairement le lien entre les variations du mode de fission et la structure nucléaire des fragments. Seule l'étude des rendements isotopiques (Fig. 2.26) le permet puisque c'est le nombre de neutrons qui pilote le mode de fission, comme cela a été mentionné à la section 2.3.1. L'étude de la déformation des fragments en fonction de leur nombre de protons (Fig. 2.27) ou de neutrons (Fig. 2.28) permet d'observer l'impact de la structure nucléaire en fonction de l'isotope fissionnant. Dans les distributions de rendements isotopiques des isotopes tels que $227 < A_{CN} < 280$, l'un des pics est toujours centré autour de $N_{frag} = 82$. La fermeture de couche sphérique détermine les modes de fission dans cette région. Lorsque $N_{CN}/2 < 82$, ie pour $227 < A_{CN} < 256$, le pic à 82 neutrons est le pic lourd de la fission asymétrique et pour $N_{CN}/2 > 82$ c'est le pic léger qui est le pic à 82 neutrons. Quand $N_{CN}/2 \approx 82$, la distribution de rendement de fission présente un grand pic symétrique. Dans la zone $260 < A_{CN} < 272$, les fissions à trois ou quatre pics sont dues à la compétition entre les fragmentations où l'un des fragments a environ 82 neutrons avec des fragmentations où le fragment léger a environ 72 neutrons. $N_{frag} = 72$ correspond à une fermeture de couche déformée $\tilde{q} \approx 0.45$ de faible amplitude. De plus, pour $A_{CN} \approx 268$, une fermeture de couche $Z_{frag} = 38$ à la même déformation que précédemment vient s'ajouter. Ainsi le $^{110}_{38}\text{Sr}_{72}$ présente une double fermeture de couche déformée comme l'indique la figure 2.24. Dans tout les cas, les fermetures de couche protons, en particulier $Z_{frag} = 50$, jouent un rôle marginal (Fig. 2.27) puisqu'elles n'ont aucun pouvoir stabilisant contrairement aux fermetures de couche neutron, en particulier $N_{frag} = 82$ (Fig. 2.28). Dans les zones où $208 < A_{CN} < 227$ ou $A_{CN} > 280$, la fission est symétrique à cause de l'absence de fermeture de couche capable de favoriser les fragmentations asymétriques. Dans cette zone, les fragmentations où l'un des fragments possède 82 neutrons sont bien trop asymétriques pour que la fermeture de couche $N_{frag} = 82$ soit en mesure de les rendre énergétiquement favorables.

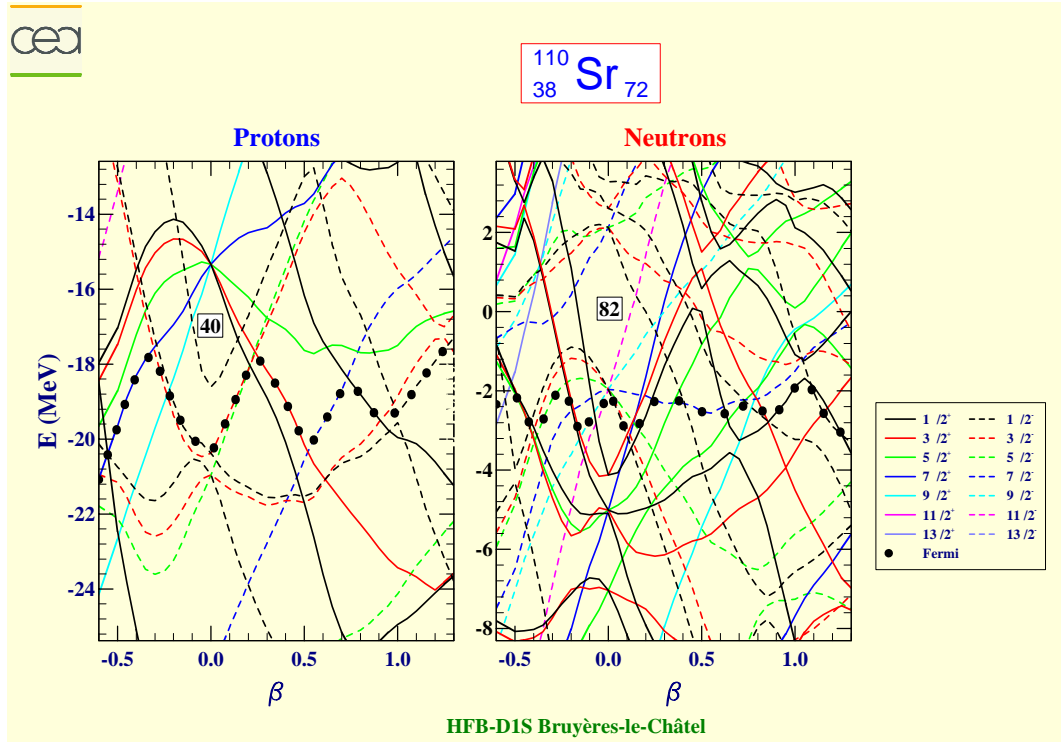


FIGURE 2.24 – Schéma de niveau proton et neutron du $^{110}_{38}\text{Sr}_{72}$ en fonction de sa déformation β issue de la base de donnée AME2003 [13]. La ligne en pointillée représente le niveau de Fermi. Ce noyau présente une double fermeture de couche déformée à $\beta = 0.5$.

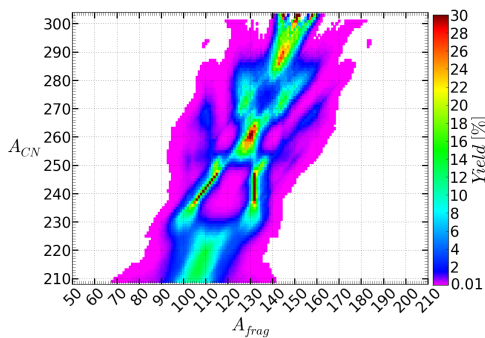


FIGURE 2.25 – Distributions de rendements de fission isobariques de l'ensemble des isotopes de l'uranium avec une énergie d'excitation de 8 MeV.

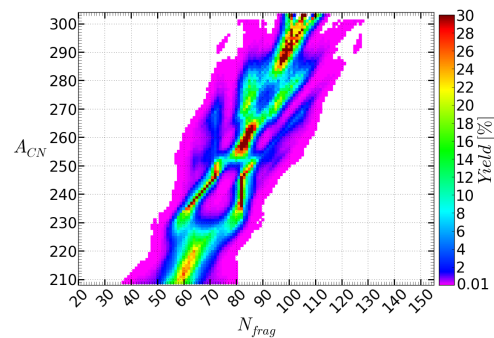


FIGURE 2.26 – Distributions de rendements de fission isotoniques de l'ensemble des isotopes de l'uranium avec une énergie d'excitation de 8 MeV.

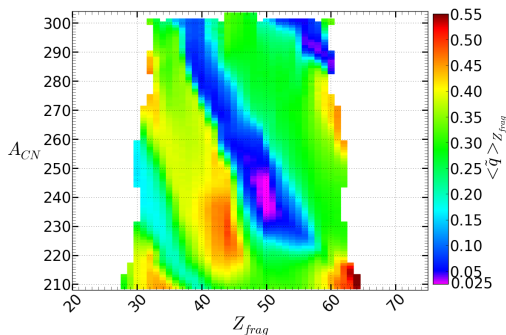


FIGURE 2.27 – Déformation moyenne des fragments en fonction du nombre de protons des fragments pour l'ensemble des isotopes de l'uranium avec une énergie d'excitation de 8 MeV.

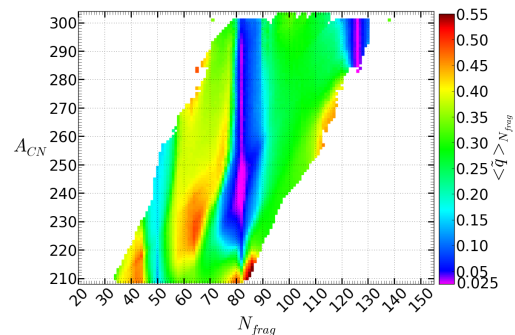


FIGURE 2.28 – Déformation moyenne des fragments en fonction du nombre de neutrons des fragments pour l'ensemble des isotopes de l'uranium avec une énergie d'excitation de 8 MeV.

2.4.2 Chaîne isotopique du dubnium

Les modes de fission accessibles pour les isotopes du dubnium ($Z_{\text{CN}} = 105$) sont la fission à trois pics, la fission symétrique et la fission asymétrique (Fig. 2.29). Tout comme les isotopes de l'uranium, la fermeture de couche $N_{\text{frag}} = 82$ joue un rôle important dans la détermination du mode de fission. Elle intervient pour les isotopes de masse telle que $265 < A_{\text{CN}} < 300$. (Fig. 2.30 et Fig. 2.32). Au delà de la masse 300, la fission est symétrique puisque les fragmentations asymétriques dont le fragment léger possède 82 ont peu d'énergie disponible. Pour $275 < A_{\text{CN}} < 290$, la fermeture de couche $N_{\text{frag}} = 82$ est à l'origine de la fission asymétrique où il y a stabilisation du pic léger (Fig. 2.30). Entre ces zones de fission symétrique et asymétrique, *ie* $290 < A_{\text{CN}} < 300$, ces deux modes sont en compétition d'où la fission à trois pics. En deçà de $A_{\text{CN}} < 275$, cette fermeture de couche est responsable du pic symétrique. Cependant la fission n'est pas symétrique mais à trois pics. Les fragmentations symétriques sont en compétition avec des fragmentations asymétriques à fragments très déformés où le fragment léger possède environ 65 neutrons qui est une fermeture de couche déformée de faible amplitude accompagnée d'une fermeture de couche proton $Z_{\text{frag}} = 46$ également de faible amplitude. La combinaison de ces deux fermetures de couche déformées ($\tilde{q} \approx 0.5$) est importante lorsque $250 < A_{\text{CN}} < 270$ (Fig. 2.31 et Fig. 2.32). L'absence de fragments sphériques avec $N_{\text{frag}} = 82$ est due à la disparition progressive de cette fermeture de couche pour les noyaux riches en protons. Pour $A_{\text{CN}} < 250$, la fission devient symétrique à cause de la disparition de la fermeture de couche $N_{\text{frag}} = 65$. La couche déformée $N_{\text{frag}} = 72$, déjà mentionnée dans l'étude de la chaîne isotopiques des uranium, est responsable des petits pics visibles pour $275 < A_{\text{CN}} < 290$ (Fig. 2.30). Cependant ces pics sont de faible amplitude ce qui ne permet pas de considérer la fission de ces isotopes comme une fission à quatre pics comme c'est le cas pour les isotopes de l'uranium. Tout comme pour les isotopes de l'uranium, les fermetures de couches proton ne jouent aucun rôle stabilisateur (Fig. 2.31).

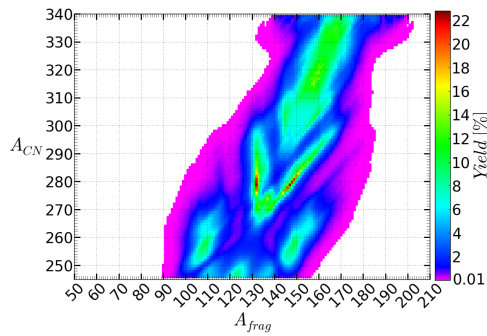


FIGURE 2.29 – Distributions de rendements de fission isobariques de l'ensemble des isotopes du dubnium avec une énergie d'excitation de 8 MeV.

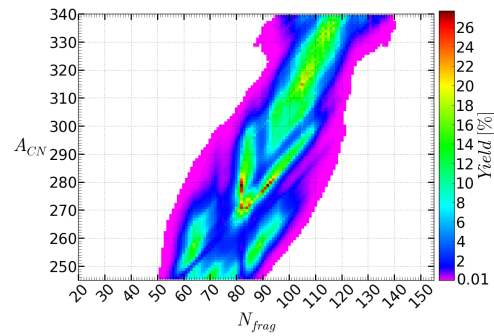


FIGURE 2.30 – Distributions de rendements de fission isotoniques de l'ensemble des isotopes du dubnium avec une énergie d'excitation de 8 MeV.

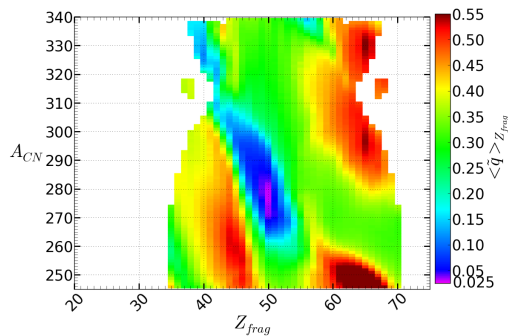


FIGURE 2.31 – Déformation moyenne des fragments en fonction du nombre de protons des fragments pour l'ensemble des isotopes du dubnium avec une énergie d'excitation de 8 MeV.

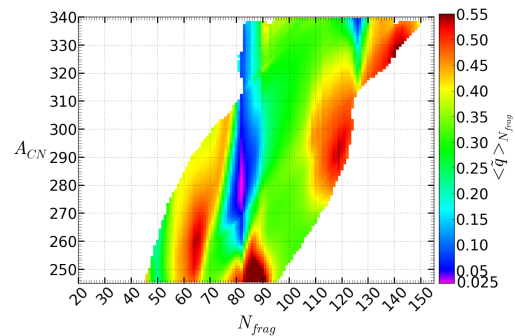


FIGURE 2.32 – Déformation moyenne des fragments en fonction du nombre de neutrons des fragments pour l'ensemble des isotopes du dubnium avec une énergie d'excitation de 8 MeV.

2.4.3 Chaîne isotopique du mercure

L'étude de la fission des isotopes du mercure permet d'interpréter la fission asymétrique des noyaux très légers en termes de fermetures de couche (Fig. 2.33). Dans la zone de masse $A_{CN} > 210$, la fission est asymétrique à cause de la présence de la fermeture de couche $N_{frag} = 82$ (Fig. 2.34 et Fig. 2.36) qui, tout comme pour les isotopes de l'uranium, est responsable de la stabilisation du pic lourd. Entre les masses 204 et 210, la fission est énergétiquement impossible puisqu'aucune fragmentation possède de l'énergie disponible, d'où l'absence de résultats. Les isotopes ayant une masse entre 191 et 203 fissionnent symétriquement. La fermeture de couche $N_{frag} = 82$ n'est plus présente car les fragmentations avec 82 neutrons dans le fragment lourd sont trop asymétriques donc énergétiquement peu favorables voire impossibles pour les isotopes légers du mercure. La fermeture de couche sphérique $N_{frag} = 50$ n'est pas assez forte pour contraindre le mode de fission. Les isotopes de masse comprise entre 173 et 191, fissionnent à nouveau de manière asymétrique à cause de l'apparition de nouvelles fermetures de couche déformées. Ces fermetures de couche sont localisées en $N_{frag} = 58$ et $Z_{frag} = 42$ (Fig. 2.35 et Fig. 2.36) pour $A_{CN} > 186$. Pour $A_{CN} < 186$, c'est la double fermeture $N_{frag} = 42$ et $Z_{frag} = 36$ qui est à l'origine de la fission asymétrique du ^{180}Hg [16].

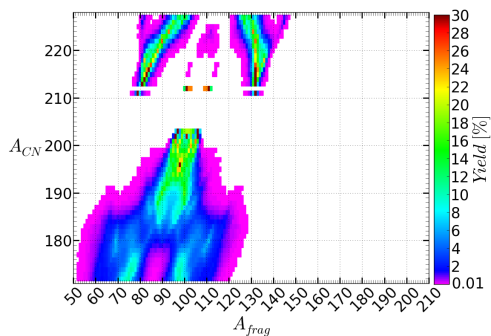


FIGURE 2.33 – Distributions de rendements de fission isobariques de l'ensemble des isotopes du mercure avec une énergie d'excitation de 8 MeV.

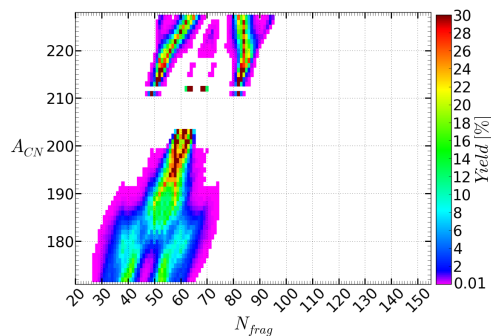


FIGURE 2.34 – Distributions de rendements de fission isotoniques de l'ensemble des isotopes du mercure avec une énergie d'excitation de 8 MeV.

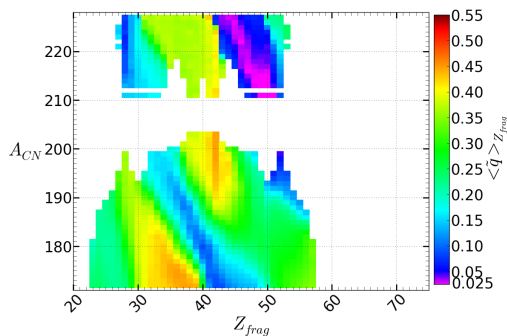


FIGURE 2.35 – Déformation moyenne des fragments en fonction du nombre de protons des fragments pour l'ensemble des isotopes du mercure avec une énergie d'excitation de 8 MeV.

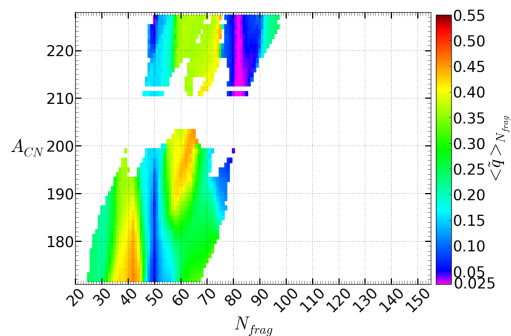


FIGURE 2.36 – Déformation moyenne des fragments en fonction du nombre de neutrons des fragments pour l'ensemble des isotopes du mercure avec une énergie d'excitation de 8 MeV.

2.4.4 Chaîne isotonique $N_{CN} = 165$

Le mode de fission symétrique ou à trois pics pour les systèmes fissionnants ayant entre 150 et 180 neutrons semble dépendre, dans une certaine mesure, du nombre de protons Z_{CN} (Fig. 2.37). L'étude de la chaîne isotonique $N_{CN} = 165$ va identifier les fermetures de couche responsables de la transition trois pics - symétrique - trois pics dans cette zone. Le mode de fission est symétrique pour les systèmes fissionnant entre 90 et 104 protons, *ie* entre les masses 255 et 269 (Fig. 2.37), la fission est à trois pics pour les isotones plus lourds et plus légers. Quelle que soit la masse de l'isotone, le pic symétrique est dû à la fermeture de couche $N_{frag} = 82$ dans les deux fragments (Fig. 2.38 et Fig. 2.40). La partie asymétrique des fissions à trois pics est dû à la fermeture de couche déformée $N_{CN} = 72$, déjà mentionnée lors de l'étude des chaînes isotopique de l'uranium et de dubnium. Dans la zone $255 < A_{CN} < 270$, la fermeture de couche $Z_{frag} = 50$ s'ajoute à la fermeture $N_{frag} = 82$ (Fig. 2.39) ce qui rend la fragmentation symétrique extrêmement favorable, en particulier dans le cas de la fission du ${}^{265}_{100}\text{Fm}$, où les fragmentations asymétriques deviennent négligeables.

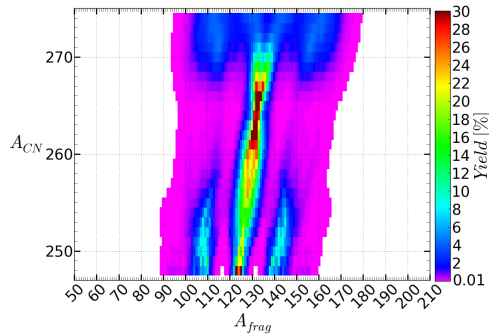


FIGURE 2.37 – Distributions de rendements de fission isobariques de l'ensemble des isotones $N_{CN} = 165$ avec une énergie d'excitation de 8 MeV.

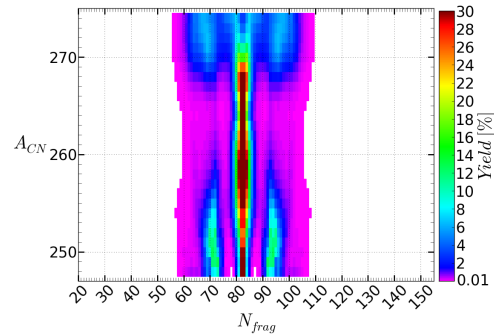


FIGURE 2.38 – Distributions de rendements de fission isotoniques de l'ensemble des isotones $N_{CN} = 165$ avec une énergie d'excitation de 8 MeV.

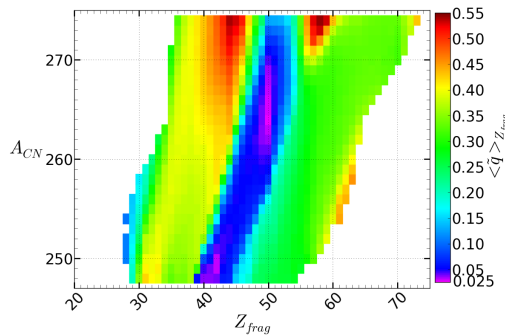


FIGURE 2.39 – Déformation moyenne des fragments en fonction du nombre de protons des fragments pour l'ensemble des isotones $N_{CN} = 165$ avec une énergie d'excitation de 8 MeV.

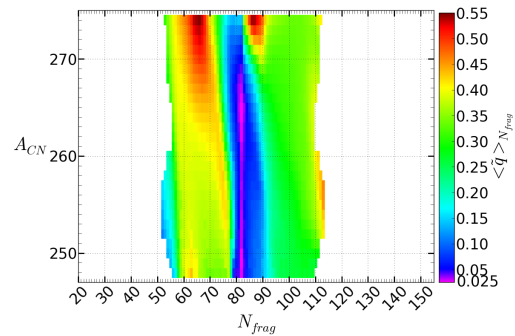


FIGURE 2.40 – Déformation moyenne des fragments en fonction du nombre de neutrons des fragments pour l'ensemble des isotones $N_{CN} = 165$ avec une énergie d'excitation de 8 MeV.

2.5 SYNTHÈSE DES RÉSULTATS OBTENUS

La confrontation des prédictions du modèle SPY aux données expérimentales montre que la modélisation de la fission au point de scission où les fragments sont séparés par une distance d est compatible avec les données expérimentales. L'étude des KE et des TKE montre que la valeur de cinq fermi pour la distance de scission est pertinente. L'étude des rendements de fission a prouvé que le modèle SPY offre un cadre théorique en accord avec les tendances globales expérimentalement observées. Ainsi l'évolution de la structure nucléaire, c'est à dire des fermetures de couches, des fragments est corrélée aux transitions entre la fission symétrique et la fission asymétrique, à la stabilisation du pic lourd dans les actinides et à l'écart à UCD. La corrélation apparente entre la déformation et la distribution du nombre de neutrons évaporés est trompeuse car l'énergie d'excitation intrinsèque des fragments intervient autant voire plus que l'énergie de déformation dans le processus d'évaporation de neutrons dans le cadre du modèle.

Divers points sont susceptibles d'être améliorés notamment le calcul de l'énergie coulombienne afin de mieux reproduire les KE. Bien que cela ne soit pas trop préjudiciable pour la compréhension des tendances globales, la largeur et la position des pics peuvent faire l'objet d'améliorations par un meilleur calcul de l'énergie disponible, en particulier l'énergie coulombienne, et/ou une meilleure description des densités d'états. L'étude des distributions du nombre de neutrons évaporés a montré qu'il y a une mauvaise répartition de l'énergie d'excitation entre les deux fragments ce qui est un argument supplémentaire pour améliorer la description des densités d'états des fragments.

Considérations sur la distribution de charge du système à la scission

3

SOMMAIRE

3.1	IMPACT DE LA DESCRIPTION DE LA CHARGE D'UN FRAGMENT	61
3.1.1	Distribution de charge des fragments	61
3.1.2	Impact de la nature de la déformation des fragments	62
3.2	IMPACT DE LA DÉFINITION DU POINT DE SCISSION	68
3.2.1	Effet de la distance de scission	68
3.2.2	Utilisation des distributions de charge HFB	70
3.2.3	Redéfinition de la scission	76
3.3	SYNTHÈSE DE L'ÉTUDE SUR LA DISTRIBUTION DE CHARGE DU SYSTÈME À LA SCISSION	79



JUSQU'À présent, la distribution de charge de chaque fragment a été supposée uniforme à l'intérieur d'une surface ayant de forme d'un quadrupole. De plus les surfaces des fragments ont été considérées comme distantes de 5 fm. La description en quadrupoles a été privilégiée aux ellipsoïdes utilisées par Wilkins [6] et dans la thèse de Sophie Heinrich [3] dans un souci de cohérence avec les calculs HFB. Un tel changement était-il nécessaire? Faut-il encore améliorer la modélisation de la distribution de charge des fragments? Dans quelle mesure ces choix de modélisation ont-ils un impact sur les observables prédites par le modèle SPY? Quel est le degré de raffinement nécessaire pour décrire de manière satisfaisante la distribution en énergie cinétique des fragments de fission? Quel est l'impact de la définition du point de scission sur le calcul de la distribution en énergie cinétique?

L'objectif de ce chapitre est d'analyser ces différents aspects de modélisation et leurs impacts sur la prédiction des observables. Pour cela, plusieurs solutions seront étudiées. Concernant l'influence de la nature de la forme des fragments, des formes ellipsoïdales vont être considérées, puis l'hypothèse sur la répartition uniforme de la charge sera abandonnée au profit d'une répartition hétérogène dans laquelle les fragments seront à bords diffus (section 3.1). L'impact de la distance d sur les observables sera ensuite étudié avant d'envisager une nouvelle définition du point de scission (section 3.2).

3.1 IMPACT DE LA DESCRIPTION DE LA CHARGE D'UN FRAGMENT

Dans le cadre du modèle SPY, la distribution de charge au sein d'un fragment $\rho_{\pi,i}(\vec{r}_i) [N/fm^3]$ fait l'objet de deux hypothèses : la première sur la géométrie du fragment, la seconde sur la répartition de la charge au sein des fragments. Pour étudier l'impact des ces hypothèses, les autres hypothèses du modèle demeurent inchangées par rapport à la solution de référence.

3.1.1 Distribution de charge des fragments

A partir des calculs HFB de l'énergie individuelle des noyaux, il est possible d'obtenir leur distribution de charge (ou de protons) en fonction de leur déformation. Les figures 3.1 et 3.2 représentent la distribution de charge du ^{132}Sn et du ^{104}Mo pour trois déformations différentes.

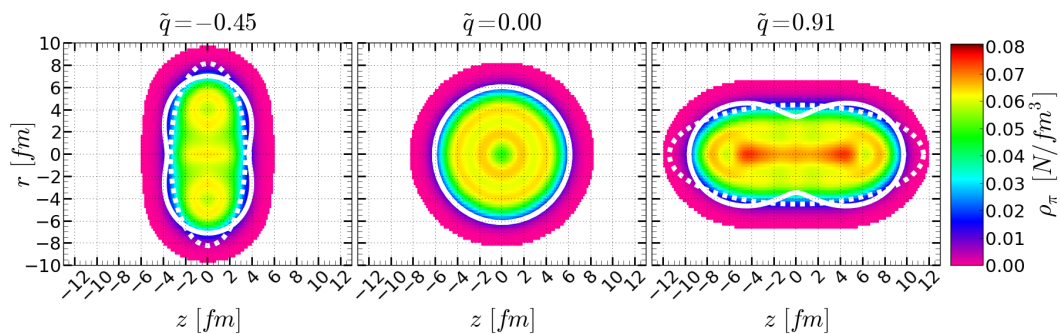


FIGURE 3.1 – Distribution de la charge du ^{132}Sn à trois déformations différentes : aplatie, sphérique et allongée en fonction de (z,r) . La limite de la distribution de charge uniforme ($\rho_{\pi} = 0.052 \text{ N/fm}^3$) de forme ellipsoïdale/quadrupolaire équivalente est représentée par la ligne blanche en pointillé/continue.

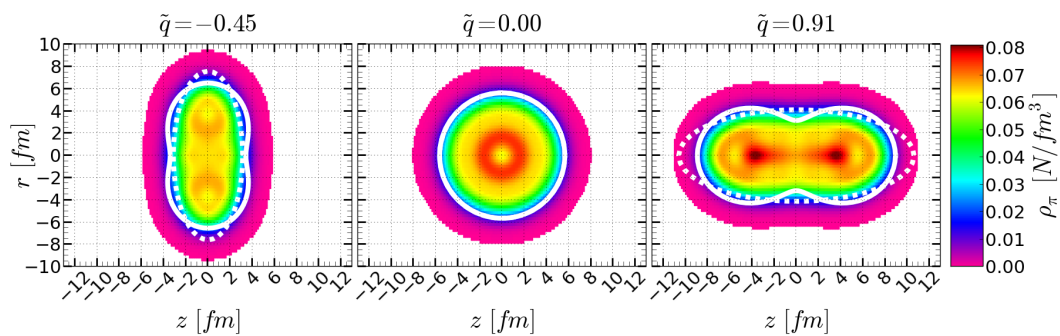


FIGURE 3.2 – Distribution de la charge du ^{104}Mo à trois déformations différentes : aplatie, sphérique et allongée en fonction de (z,r) . La limite de la distribution de charge uniforme ($\rho_{\pi} = 0.056 \text{ N/fm}^3$) de forme ellipsoïdale/quadrupolaire équivalente est représentée par la ligne blanche en pointillé/continue.

La distribution de charge $\rho_\pi(z, r)$ d'un noyau ne dépend que de deux coordonnées z et r du fait de la symétrie axiale du noyau qui est imposée lors du calcul HFB. La coordonnée z est la coordonnée selon l'axe de symétrie et r est la distance par rapport à l'axe de symétrie. La comparaison entre la distribution de charge HFB, la distribution de charge uniforme de forme ellipsoïdale (ligne blanche en pointillé) et la distribution uniforme de forme quadrupolaire (ligne blanche continue) sur les figures 3.1 et 3.2, indique qu'un quadrupole est une meilleure approximation de la distribution de charge HFB qu'un ellipsoïde. En plus de présenter une diffusivité, les distributions de charge HFB possèdent des zones à forte densité particulièrement visibles dans le cas du ^{104}Mo allongé (Fig 3.2, $\tilde{q} = 0.91$), localisées en $z = \pm 4$ fm et $r = 0$. Ces zones sont la manifestation du moment quadrupolaire du noyau. Deux zones à forte densité sont également visibles dans le cas d'une déformation aplatie, alignés selon $z = 0$, signature du moment quadrupolaire négatif du noyau.

3.1.2 Impact de la nature de la déformation des fragments

La forme quadrupolaire constitue une meilleure approximation de la distribution de charge HFB que la forme ellipsoïdale. Afin de mettre en évidence l'importance de la nature de la déformation des fragments, des déformations ellipsoïdales vont cependant être considérées. Tout comme pour les déformations quadrupolaires étudiées précédemment, la distribution de charge au sein d'un fragment est uniforme.

Une déformation ellipsoïdale est caractérisée par ses trois demi-axes a , b et c , illustrée sur la figure 3.3 et paramétrée de la manière suivante :

$$\begin{cases} x = a \sin(\theta) \cos(\varphi) \\ y = b \sin(\theta) \sin(\varphi) \\ z = c \cos(\theta) \end{cases} \quad (3.1)$$

Les fragments possèdent une symétrie de révolution selon leur axe z qui est confondu avec l'axe de scission du système si bien que les demi-axes a et b sont égaux. Les demi-axes a et c sont interdépendants à cause de la conservation du volume du fragment. Tout comme la déformation quadrupolaire, la déformation ellipsoïdale est paramétrée par \tilde{q} . Le lien entre \tilde{q} et les demi-axes est détaillé en annexe A.1.

L'énergie d'interaction coulombienne entre deux ellipsoïdes de révolution est donnée par la formule de Cohen & Swiatecki [34] dont quelques éléments de démonstration sont donnés en annexe A.3. Elle s'exprime sous la forme d'une double série :

$$E_{coul} = \frac{197}{137} \frac{Z_1 Z_2}{R_{12}} S(x_1, x_2) \quad (3.2)$$

$$S(x_1, x_2) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{3}{(2n+1)(2n+3)} \frac{3}{(2m+1)(2m+3)} \frac{(2n+2m)!}{(2n)!(2m)!} x_1^{2n} x_2^{2m} \quad (3.3)$$

et dépend du nombre de protons Z_1 et Z_2 de chaque fragment, de leurs deux

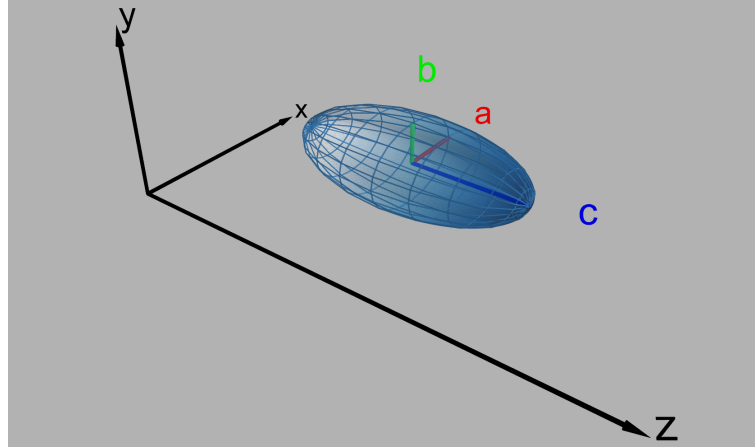


FIGURE 3.3 – Représentation des trois demi-axes (a, b, c) d'un ellipsoïde allongée dont l'axe de révolution est aligné selon l'axe z .

demi-axes (c_1, a_1) et (c_2, a_2) ainsi que de la distance entre leurs barycentres R_{12} :

$$x_i = \frac{c_i^2 - a_i^2}{R_{12}} \text{ (cas allongé) ou } x_i = \frac{a_i^2 - c_i^2}{R_{12}} \text{ (cas aplati)} \quad (3.4)$$

$$R_{12} = c_1 + d + c_2 \quad (3.5)$$

Dans la pratique, le terme $S(x_1, x_2)$ (éq. 3.2) converge de manière satisfaisante dès que les indices n et m atteignent 10. Il peut être vu comme un facteur de correction par rapport à l'interaction entre deux sphères uniformément chargées. Il est égal à 1 lorsque \tilde{q}_1 et \tilde{q}_2 sont nuls.

Tout comme les déformations quadrupolaires, les déformations ellipsoïdales changent l'énergie d'interaction coulombienne. Elle varie de plusieurs dizaines de MeV selon que les fragments soient allongés ou aplatis, voir par exemple avec la fragmentation $^{132}\text{Sn} + ^{104}\text{Mo}$ illustré à la figure 3.4. L'augmentation de l'énergie d'interaction coulombienne lorsqu'un fragment est aplati est due à la diminution de la longueur de son demi-axe c : il est plus proche de son partenaire (éq. 3.5). Lorsque le fragment est allongé, la longueur de son demi-axe c augmente, éloignant ainsi les deux fragments et diminuant l'énergie coulombienne. L'énergie coulombienne entre deux ellipsoïdes présente une caractéristique, visible sur la figure 3.4, qui n'est pas présente pour des déformations quadrupolaires : l'allongement d'un fragment est compensé par l'aplatissement de son partenaire lorsque la valeur absolue des paramètres de déformation varie de manière proportionnelle à l'énergie coulombienne constante.

Quel que soit le couple de déformations $(\tilde{q}_1, \tilde{q}_2)$ considéré, l'interaction coulombienne entre deux fragments déformés quadrupolairement est toujours plus importante que celle obtenue avec des déformations ellipsoïdales comme le montre la figure 3.5. La différence entre les deux types de déformations est négligeable tant que $|\tilde{q}| < 0.2$. Aux grandes déformations, l'hypothèse d'une surface quadrupolaire induit environ 10 MeV d'énergie coulombienne supplémentaire par rapport à l'hypothèse d'une surface ellipsoïdale. Cela est dû à plus la grande compacité

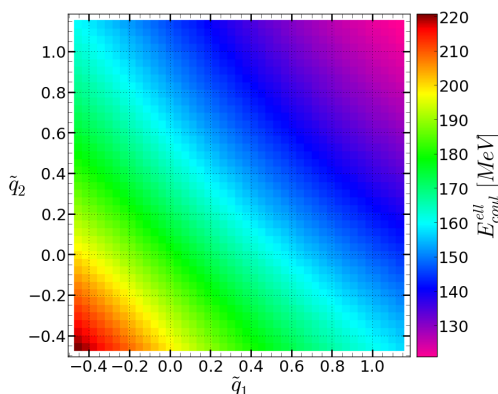


FIGURE 3.4 – Energie d'interaction coulombienne pour la fragmentation $^{132}\text{Sn} + ^{104}\text{Mo}$ en fonction de leur déformation ellipsoïdale.

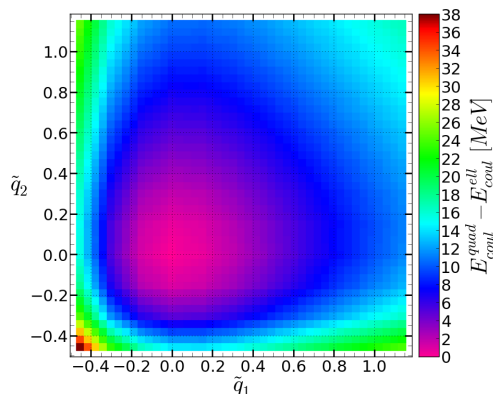


FIGURE 3.5 – Différence d'énergie d'interaction coulombienne calculée en considérant des déformations soit quadrupolaires soit ellipsoïdales pour la fragmentation $^{132}\text{Sn} + ^{104}\text{Mo}$ en fonction de la déformation des deux fragments.

des distributions de charge quadrupolaire aux grandes déformations (Fig. 3.6). De plus, contrairement aux déformations ellipsoïdales, les déformations quadrupolaires très aplaties sont caractérisées par la présence d'une dépression au niveau des pôles limitant l'éloignement des barycentres des deux fragments.

La description de la déformation des fragments induit donc une différence d'énergie coulombienne si leurs déformations moyennes sont suffisamment grandes : $|\tilde{q}| > 0.2$. Les rendements de fission de l'uranium sont faiblement impactés. Seules les fragmentations quasi symétriques sont moins probables pour des déformations de nature quadrupolaire, le rapport pic/vallée passe de 62 à 360 (Fig. 3.7, a). Les rendements de fission du californium sont légèrement différents au niveau de la partie symétrique et autour des masses 104 et 148 (Fig. 3.8, a).

Les distributions en énergie cinétique en fonction de la masse du fragment (noté KE) sont nettement plus impactées puisque l'interaction coulombienne a un rôle important dans le calcul de ces dernières. Les KE obtenus à partir de déformations ellipsoïdales présentent plusieurs structures autour des masses 90, 120, 150 dans le cas de la réaction $^{235}\text{U}(n_{\text{th}}, f)$ (Fig. 3.7, b, courbe bleue) et autour des masses 108 et 145 dans le cas de la réaction $^{252}\text{Cf}(sf)$ (Fig. 3.8, b, courbe bleue). Ces structures sont liées à l'évolution de la déformation moyenne des fragments en fonction de leur masse. Au regard des données expérimentales [26, 27], seule la structure autour de $A_{\text{frag}} = 120$ est observée dans les KE expérimentaux de la réaction $^{235}\text{U}(n_{\text{th}}, f)$. Aucune structure dans les KE prédit par le modèle SPY pour la réaction $^{252}\text{Cf}(sf)$ a de lien avec les données expérimentales.

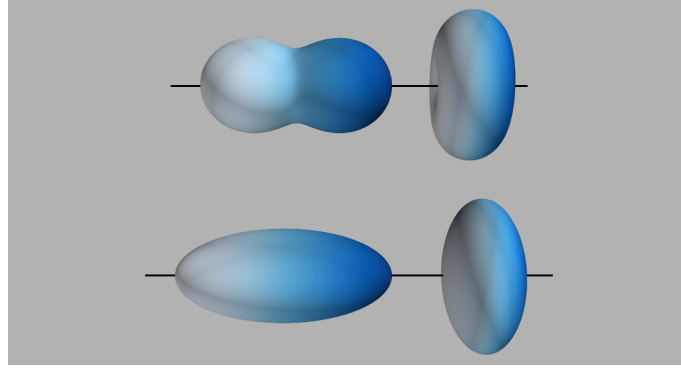


FIGURE 3.6 – Comparaison entre les déformations quadrupolaires (au haut) et les déformations ellipsoïdales (en bas) avec le même moment quadrupolaire réduit $\bar{q} = 1$ (à gauche) et $\bar{q} = -0.45$ (à droite). La distance intersurface d est identique dans les deux cas et vaut 5 fm. Les déformations quadrupolaires sont plus compactes que les déformations ellipsoïdales. Les pôles des fragments sont définis comme étant l'intersection entre leur axe de révolution et leur surface.

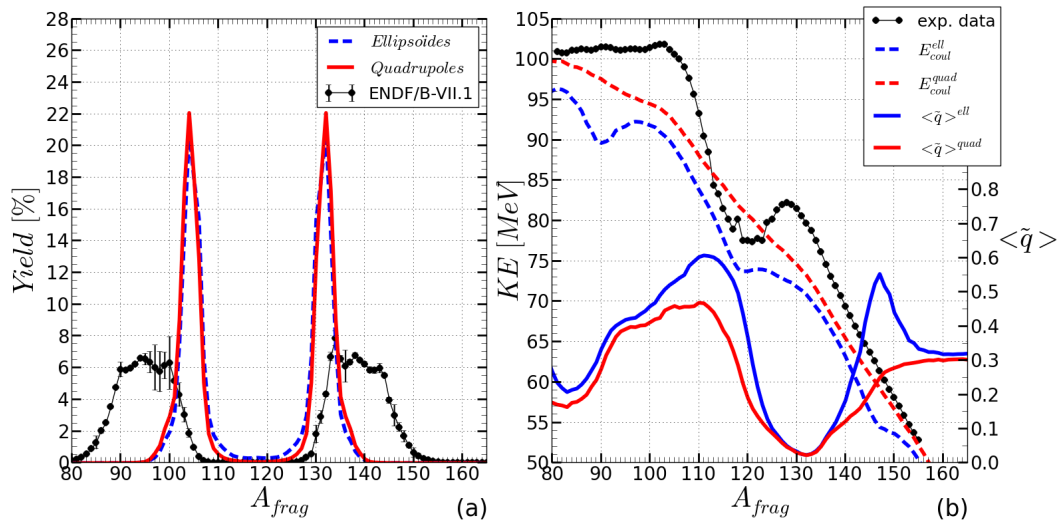


FIGURE 3.7 – Rendements isobariques (à gauche) ou distribution en énergie cinétique et déformation moyenne (à droite) pour la réaction $^{235}\text{U}(n_{th}, f)$ pour les deux formes de surface, comparés avec les données évaluées [24] ou expérimentales [26].

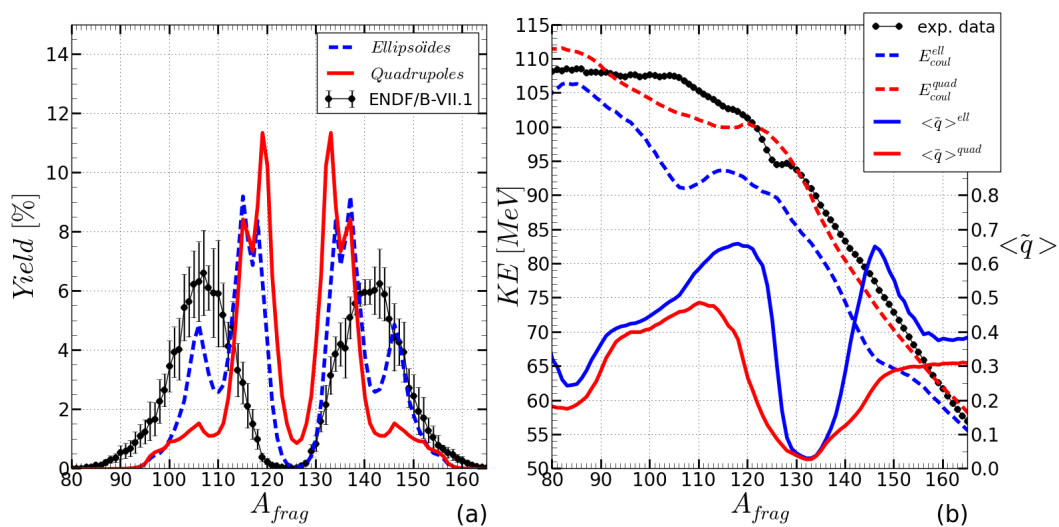


FIGURE 3.8 – Rendements isobariques (à gauche) ou distribution en énergie cinétique et déformation moyenne (à droite) pour la réaction $^{252}\text{Cf}(sf)$ pour les deux formes de surface, comparés avec les données évaluées [24] ou expérimentales [27].

Cette étude d'impact spécifique à l'uranium et au californium n'est pas forcément valable pour tous les systèmes fissionnants, en particulier lorsqu'il y a compétition entre la fission symétrique et la fission asymétrique. Seule une étude systématique permet d'observer l'impact général de la description de la déformation.

La comparaison entre la figure 3.9 et la figure 3.10 révèle que l'évolution du mode de fission en fonction du nombre de neutrons et protons du système fissionnant est similaire, ce qui est rassurant quant à la robustesse des prédictions, sauf dans la région $160 < N_{CN} < 185$. Les noyaux très légers fissionnent asymétriquement ($N_{CN} < 100$). Pour $N_{CN} < 140$, il y a, dans les deux cas, une transition entre la fission asymétrique et la fission symétrique vers $N_{CN} = 105$. Pour les déformations de nature ellipsoïdales, il y a mélange entre la fission asymétrique et la fission à trois pics dans la zone $130 < N_{CN} < 145$ (Fig. 3.10). L'apparition de la fission à trois pics est due aux fragmentations symétriques déformées rendues favorables lorsqu'elles sont de nature ellipsoïdale (Fig. 3.11 et Fig. 3.12).

De manière générale, le passage de formes quadrupolaires à des formes ellipsoïdales favorise de plus grandes déformations, comme visible à la figure 3.11 où est représenté la déformation moyenne des fragments de forme quadrupolaire et à la figure 3.12 lorsqu'ils sont de nature ellipsoïdale. Cette préférence pour les grandes déformations est particulièrement marquée lorsque $Z_{CN} > 95$ (Fig. 3.12). Le mode de fission est particulièrement impacté pour $160 < N_{CN} < 185$, où la fission symétrique disparaît au profit d'une fission à trois pics à cause de la persistance de la couche déformée $N_{frag} = 72$ pour $90 < Z_{CN} < 104$. L'apparition d'une fission à quatre pics au lieu d'une fission asymétrique pour $95 < Z_{CN} < 109$ et $160 < N_{CN} < 185$ est liée à des fragmentations très asymétriques avec des fragments très déformés, rendues énergétiquement favorables dans le cas de déformations de nature ellipsoïdales.

Le changement de la nature de la déformation impacte significativement les TKE comme le montre la comparaison entre la figure 3.13 et la figure 3.14. Avec des déformations ellipsoïdales, le TKE est globalement inférieur de 20 à 40 MeV et augmente plus lentement avec le nombre de protons du système fissionnant Z_{CN} . De plus, la zone d'accroissement brutal, localisée en $160 < N_{CN} < 170$ et $Z_{CN} > 95$ (Fig. 3.13), observée dans le cas des déformations quadrupolaires est très fortement atténuée dans le cas des déformations ellipsoïdales.

Au delà de la meilleure approximation des distributions de charge HFB par des formes quadrupolaires, cette étude comparative démontre que cette modélisation est plus adaptée qu'avec des ellipsoïdes. En effet, les déformations ellipsoïdales favorisent des déformations très importantes dont la validité physique est douteuse. De plus, les TKE sont en bien meilleur accord avec les données expérimentales lorsque les déformations quadrupolaires sont considérées.

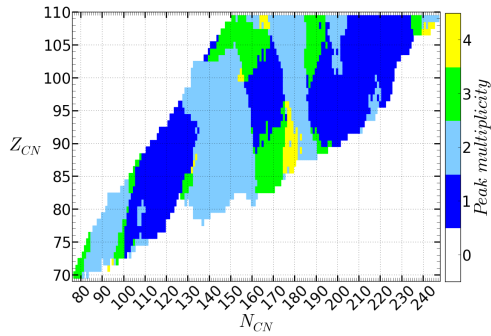


FIGURE 3.9 – Nombre de pics dans les distributions de rendements de fission isobariques en fonction du système fissionnant pour une énergie d'excitation de 8 MeV avec des déformations quadrupolaires (solution de référence).

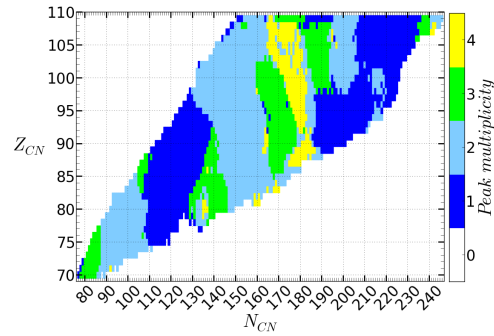


FIGURE 3.10 – Nombre de pics dans les distributions de rendements de fission isobariques en fonction du système fissionnant pour une énergie d'excitation de 8 MeV avec des déformations ellipsoïdales.

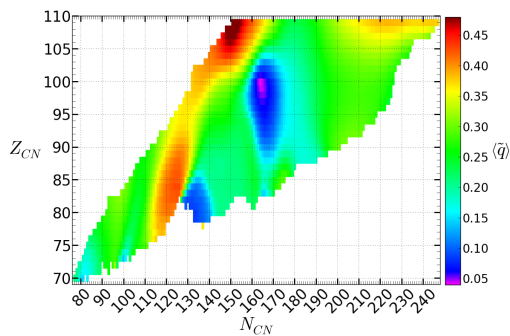


FIGURE 3.11 – Déformation moyenne des fragments en fonction du système fissionnant pour une énergie d'excitation de 8 MeV avec des déformations quadrupolaires (solution de référence).

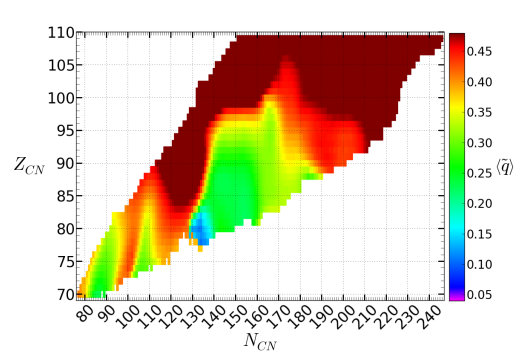


FIGURE 3.12 – Déformation moyenne des fragments en fonction du système fissionnant pour une énergie d'excitation de 8 MeV avec des déformations ellipsoïdales.

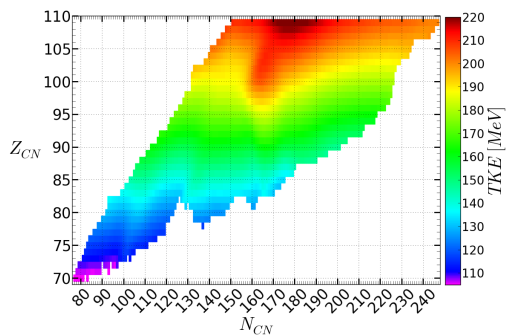


FIGURE 3.13 – Energie cinétique totale moyenne en fonction du système fissionnant pour une énergie d'excitation de 8 MeV avec des déformations quadrupolaires (solution de référence).

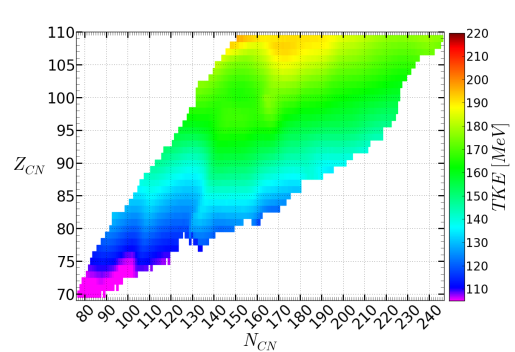


FIGURE 3.14 – Energie cinétique totale moyenne en fonction du système fissionnant pour une énergie d'excitation de 8 MeV avec des déformations ellipsoïdales.

3.2 IMPACT DE LA DÉFINITION DU POINT DE SCISSION

Les résultats précédents indiquent que les déformations quadrupolaires sont plus adaptées, néanmoins la description par une forme à bord franc est très réductive comme l'est la définition précédente du point de scission. Il est nécessaire d'améliorer cette modélisation notamment en prenant en compte la diffusivité du noyau. La diffusivité du noyau ainsi que la distribution spatiale de la charge en son sein peuvent avoir un impact sur l'énergie coulombienne. L'utilisation de noyaux à bords diffus impose d'étudier et de repenser la définition de la scission. Pour commencer, l'impact de la distance intersurface va être étudié en gardant des noyaux à bords francs. Puis, de nouvelles définitions de la scission seront proposées.

3.2.1 Effet de la distance de scission

L'étude d'impact va être effectuée en considérant les fragments de forme quadrupolaire uniformément chargés. Ce cadre permet de mettre en évidence uniquement l'impact global d'une variation de la distance intersurface.

Les résultats de cette étude sont présentés aux figures 3.16, 3.15 et 3.17 où trois valeurs pour la distance intersurface ont été envisagées : 3, 5 et 7 fm. Une variation de la distance a pour effet majeur d'induire, en moyenne, une variation de l'énergie coulombienne totale d'environ 10 MeV/fm. Cela se traduit par une augmentation de l'énergie cinétique des fragments légers de 15 MeV et de 5 MeV pour les fragments lourds lorsque la distance diminue de 5 à 3 fm, indépendamment de la réaction considérée, comme visible sur la figure 3.15. Les structures des KE, autour des masses 105 et 135 pour la réaction $^{235}\text{U}(n_{\text{th}}, f)$ et autour de 125 pour la réaction $^{252}\text{Cf}(sf)$, sont légèrement accentuées lorsque la distance diminue. L'énergie disponible d'une fragmentation varie de manière inverse par rapport à l'énergie coulombienne. La variation de la distance intersurface n'induit pas de nouvelle structure ce qui conforte la validité des prédictions. Comme l'illustre la figure 3.16, les rendements sont modérément impactés, les seuls effets observés sont la modification du rapport pic/vallée et l'amplification ou l'atténuation des structures de la distribution des rendements de fission. Le mode de fission n'est pas impacté par une modification de quelques fermis de la distance d sauf dans le cas où il y a compétition entre deux modes de fission. De manière similaire aux KE, la distribution de neutrons évaporés ne subit qu'un décalage global. Il y a davantage de neutrons évaporés lorsque la distance augmente puisque qu'il y a plus d'énergie disponible pour exciter les fragments.

De manière générale une diminution de la distance a pour effet d'accentuer les effets de structure, sans porter atteinte aux caractéristiques globales des observables.

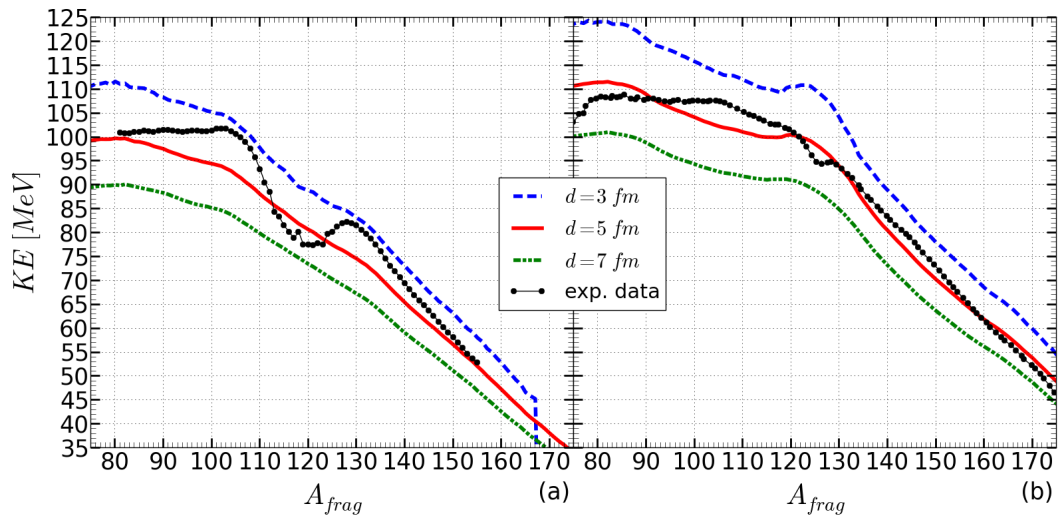


FIGURE 3.15 – Energie cinétique en fonction de la distance d pour la réaction $^{235}\text{U}(n_{th}, f)$ (a) et $^{252}\text{Cf}(sf)$ (b). Les données expérimentales sont issues de [26, 27].

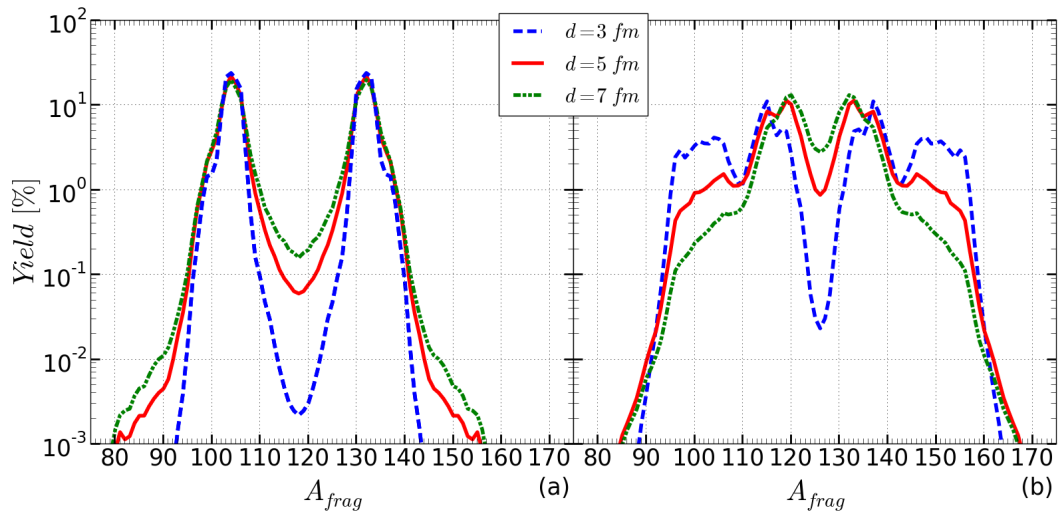


FIGURE 3.16 – Rendements isobariques en fonction de la distance d pour la réaction $^{235}\text{U}(n_{th}, f)$ (a) et $^{252}\text{Cf}(sf)$ (b).

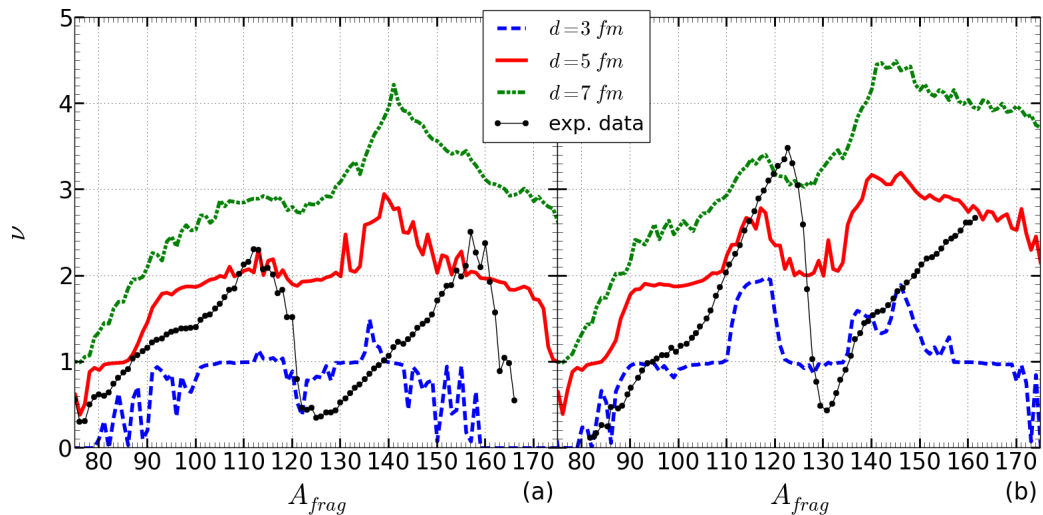


FIGURE 3.17 – Nombre de neutrons évaporés en fonction de la distance d pour la réaction $^{235}\text{U}(n_{th}, f)$ (a) et $^{252}\text{Cf}(sf)$ (b). Les données expérimentales sont issues de [28, 27].

3.2.2 Utilisation des distributions de charge HFB

L'évolution du système du point selle jusqu'au point de scission est due à la répulsion coulombienne entre les protons. En effet, l'attraction nucléaire entre les nucléons n'est plus assez forte pour contenir les nucléons ensemble, en particulier les protons. Ainsi la répulsion coulombienne entre les protons a pour effet de déformer la distribution de charge à un point tel qu'elle se scinde en deux. Les deux distributions de charge ainsi formées correspondent à celles des fragments de fission. La scission peut donc être redéfinie en ne considérant que la configuration de la distribution de charge du système à la scission, elle-même définie à partir de la position relative des distributions de charge des fragments. Pour positionner les distributions de charge des deux fragments l'une par rapport à l'autre, seule la distance entre le barycentre et le pôle de chaque fragment, notée R^i pour le fragment $i = \{1, 2\}$, est nécessaire. La configuration du système à la scission correspond à deux fragments coaxiaux, où le critère de scission consiste à définir la distance inter-barycentre $d_{1,2}$ comme : $d_{1,2} = R^1 + d + R^2$.

Dans le cas de fragments modélisés par un volume uniformément chargé, dont la surface est paramétrée par $r(\theta)$, le pôle d'un fragment est l'intersection entre son axe de révolution et sa surface, ie $R^i = r(\theta = 0)$. Lorsque les fragments présentent une diffusivité, R^i correspond au rayon effectif R_{eff}^i . Le rayon effectif est obtenu par l'ajustement du profil de densité de charge le long de l'axe de symétrie, ie pour $r = 0$ et $z \geq 0$ (courbe noire, Fig. 3.18), par une fonction sigmoïde (courbe rouge, Fig. 3.18) dont l'expression est donnée ci-dessous :

$$\rho_{\pi}(z) = \frac{\rho_0}{1 + e^{\frac{z - R_{\text{eff}}}{a}}} \quad (3.6)$$

Cette fonction d'ajustement a trois paramètres. ρ_0 correspond à la densité centrale, R_{eff} au rayon effectif où $\rho_{\pi}(R) = \rho_0/2$ et le paramètre a est lié à la diffusivité δ du noyau : $\delta = 2a \ln(9)$. La diffusivité correspond à la distance telle que la densité de charge chute de $\rho_{\pi}(x) = 0.9\rho_0$ à $\rho_{\pi}(x + \delta) = 0.1\rho_0$.

Le rayon effectif d'un noyau augmente avec sa déformation (Fig. 3.19). Son évolution est similaire à celle d'un quadrupole de volume $\frac{4}{3}\pi(R_{\text{eff}}(\tilde{q} = 0))^3$ pour $-0.2 < \tilde{q} < 0.4$ dans le cas du ^{104}Mo . Pour les déformations allongées ($\tilde{q} > 0.4$), les distributions de charge HFB sont moins étalées le long de leur axe de symétrie que le quadrupole équivalent. L'étude systématique des distributions de charge HFB montre que cet écart est présent quel que soit le noyau, localisé autour de ($\tilde{q} = 0.5$) et d'amplitude variable. L'origine de cet écart n'est actuellement pas clairement comprise. Des études complémentaires plus poussées sont nécessaires pour comprendre la nature de cet écart. Grâce à la connaissance des rayons effectifs des fragments, il est possible de positionner les distributions de charge des fragments à 5 fm l'une de l'autre comme illustré par figure 3.20.

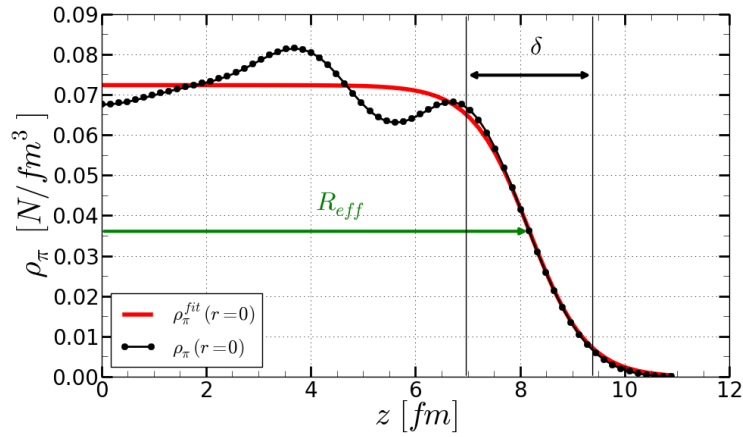


FIGURE 3.18 – Ajustement du profil de densité de charge en $r = 0$ du ^{104}Mo avec $\tilde{q} = 0.91$ (courbe noire) par une fonction sigmoïde (courbe rouge) avec $\rho_0 = 0.073 \text{ N/fm}^3$, $R_{\text{eff}} = 8.165 \text{ fm}$, $a = 0.55 \text{ fm}$ et $\delta = 2.42 \text{ fm}$.

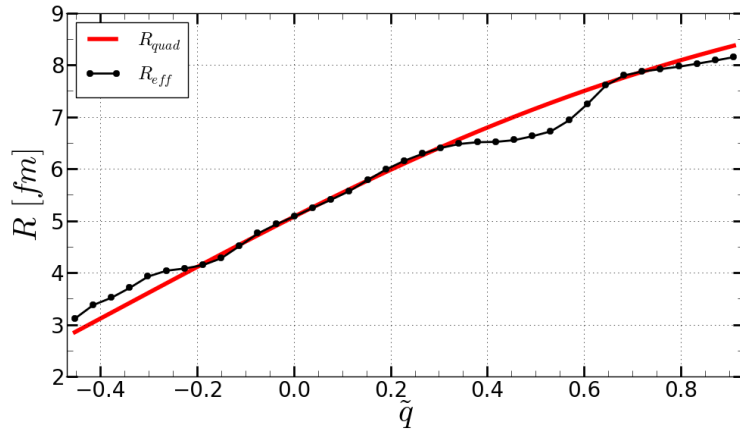


FIGURE 3.19 – Evolution du rayon effectif ajusté R_{eff} (courbe noire) et du rayon R_{quad} d'un quadrupole recalé sur le rayon effectif au point sphérique (courbe rouge) en fonction de la déformation pour le ^{104}Mo .

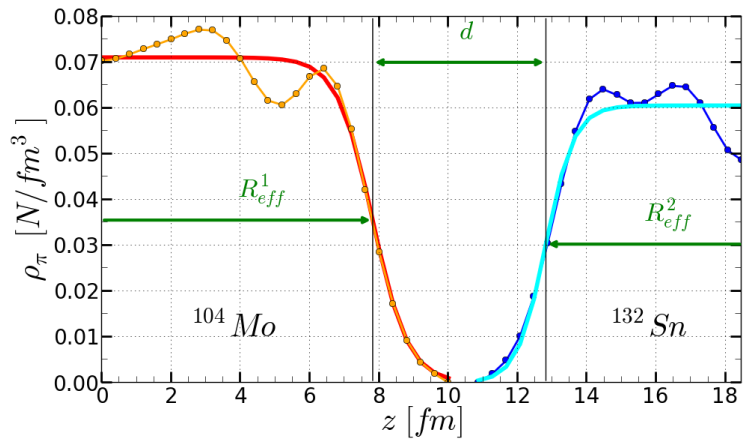


FIGURE 3.20 – Profil de densité de charge le long de l'axe de scission pour la fragmentation ^{104}Mo ($\tilde{q} = 0.68$) + ^{132}Sn ($\tilde{q} = 0$) défini à partir des rayons effectifs. Les lignes continues épaisses (rouge et bleu) représentent l'ajustement de la distribution de charge (lignes fines avec des ronds) du ^{104}Mo à la déformation $\tilde{q} = 0.68$ et du ^{132}Sn à la déformation $\tilde{q} = 0$.

L'énergie d'interaction coulombienne est obtenue par intégration numérique. Elle doit être calculée un grand nombre de fois, environ 1.5 millions de valeurs sont à calculer. Le calcul de l'énergie coulombienne doit être le plus rapide possible. Comme pour le calcul de l'interaction entre deux quadrupoles (voir section 1.2.1), seulement un nombre restreint de couples $(\tilde{q}_1, \tilde{q}_2)$ est calculé, environ dix fois moins, et les autres sont déduits par interpolation. Pour un couple de déformation donné, il est *a priori* nécessaire d'intégrer sur le volume de chaque fragment. Cependant les propriétés de symétrie cylindrique des fragments réduisent le calcul à une somme d'interactions élémentaires, notées $E_{\text{coul}}^{c1c2}(r_1, r_2, d_{12})$, entre deux cylindres creux uniformément chargés notés $c1$ et $c2$:

$$E_{\text{coul}}^{c1c2}(r_1, r_2, d_{12}) = \frac{197}{137} [r^2]_{r_1 - \frac{\Delta r}{2}}^{r_1 + \frac{\Delta r}{2}} [r^2]_{r_2 - \frac{\Delta r}{2}}^{r_2 + \frac{\Delta r}{2}} (\Delta z)^2 \rho_{\pi,1} \rho_{\pi,2} \frac{1}{\alpha} \frac{1}{\sqrt{1-\beta}} 2\pi K \left(-\sqrt{\frac{2\beta}{1-\beta}} \right) \quad (3.7)$$

où $\rho_{\pi}(z_1, r_1)$ est la densité de charge du cylindre 1 de rayon r_1 et $\rho_{\pi}(z_2, r_2)$ celle du cylindre 2 de rayon r_2 . L'obtention de cette formule est détaillée en annexe A.4. Les deux cylindres creux sont séparés d'une distance d_{12} et ont une épaisseur Δz . Les variables α et β dépendent de r_1, r_2 et de d_{12} . Bien que l'expression de l'énergie d'interaction coulombienne entre deux cylindres creux ne soit pas analytique, le temps de calcul peut être réduit en tabulant le facteur $K \left(-\sqrt{\frac{2\beta}{1-\beta}} \right)$ puisque la variable β est toujours comprise entre 0 et 1, quel que soit le couple de déformations et la fragmentation considérés.

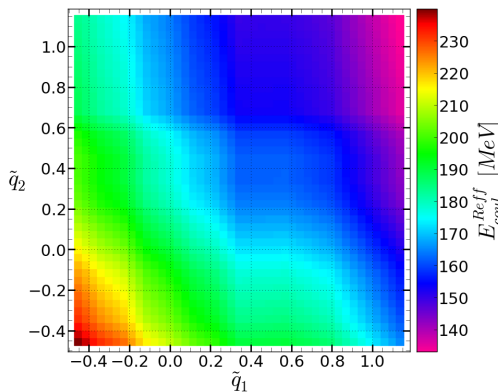


FIGURE 3.21 – Énergie d'interaction coulombienne pour la fragmentation $^{132}\text{Sn} + ^{104}\text{Mo}$ calculée à partir des distributions de charge HFB en fonction de la déformation des fragments pour $d = 5$ fm.

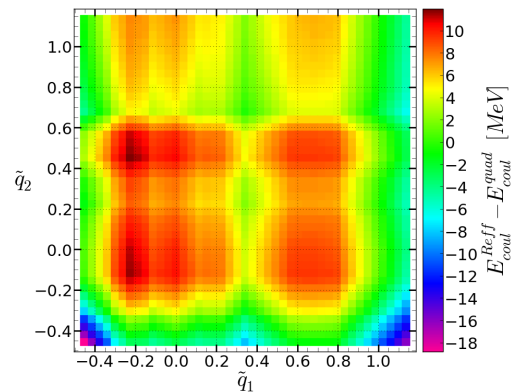


FIGURE 3.22 – Différence entre l'énergie d'interaction coulombienne calculée en considérant des déformations quadrupolaires et l'énergie coulombienne calculée en considérant les distributions de charge HFB pour la fragmentation $^{132}\text{Sn} + ^{104}\text{Mo}$ calculée à partir des distributions de charge HFB en fonction de la déformation des fragments pour $d = 5$ fm.

L'énergie coulombienne obtenue est toujours supérieure à celle obtenue à partir de quadrupoles et *a fortiori* supérieure à celle obtenue à partir d'ellipsoïdes. En effet les distributions de charge issues des calculs HFB sont toujours plus compactes que les distributions uniformes, figure 3.1 pour le ^{132}Sn ou figure 3.2 pour le ^{104}Mo . La variation de l'énergie coulombienne avec la déformation est moins régulière qu'avec les distributions uniformes (Fig. 3.21 et Fig. 3.22).

Les densités de charge incluent des effets de structure, en particulier d'appariement. L'utilisation directe des rayons effectifs pour positionner les deux distributions de charge induit ainsi des fluctuations spurieuses dans les rendements de fission. Ces fluctuations sont dues à des variations du rayon effectif en fonction de l'appariement. Les noyaux pair-pair sont légèrement plus compacts que les noyaux impairs ainsi le rayon effectif d'un noyau pair-pair est inférieur à celui d'un noyau pair-impair, lui même inférieur à celui d'un noyau impair-impair. Ces fluctuations liées à l'appariement sont gommées en interpolant les rayons effectifs sur les rayons effectifs des noyaux pair-pair voisins, pour chaque déformation. L'utilisation de ces rayons interpolés avec les densité de charge HFB pour le calcul de l'énergie d'interaction coulombienne est noté $R_{\text{eff}}^{\text{smooth-}\tilde{q}}$.

L'impact du passage d'une densité de charge uniforme à l'intérieur d'un quadrupole (noté *quad*) à celle issue des calculs HFB ($R_{\text{eff}}^{\text{smooth-}\tilde{q}}$) sur la distribution en énergie cinétique, les rendements de fission et le nombre de neutrons évaporés est visible sur les figures 3.23, 3.24 et 3.25 pour les réactions $^{235}\text{U}(n_{\text{th}}, f)$ et $^{252}\text{Cf}(sf)$. La tendance générale est obtenue en utilisant les densités uniformes et de forme quadrupolaire (Fig. 3.23 courbe rouge, a et b). La structure des KE est due à la variation du rayon effectif avec la déformation du fragment et au caractère hétérogène des distributions de charge (zones à forte densité de charge et diffusivité des bords). L'apparition des structures (plateau et creux) dues aux distributions de charge HFB est particulièrement visible sur la figure 3.23 a. Les distributions en énergie cinétique sont mieux reproduites lorsque les densités de charge HFB sont utilisées, en particulier le plateau ($A_{\text{frag}} < 110$).

Les rendements de fission sont également impactés (Fig. 3.24). Dans les deux cas, l'influence du ^{132}Sn est atténuée lorsque les densités de charge HFB sont considérées. La fission spontanée du californium est plus asymétrique (Fig. 3.24, b), les caractéristiques globales de la distribution de rendements de fission prédite par le modèle SPY sont améliorées.

Les distributions de neutrons évaporés (Fig. 3.25) sont plus modérément affectées. Seul le nombre de neutrons évaporés par les fragments légers est améliorée. Cette amélioration est due à une augmentation globale de l'énergie de déformation, comme le montre les figures 3.26 et 3.27, pour les fragments de masses compris entre 100 et 125 dont leur énergie de déformation passe de 5 à 10 MeV. Ainsi les fragments légers évaporent davantage de neutrons. Le nombre de neutrons évaporés pour les fragments lourds est quant à lui très faiblement impacté.

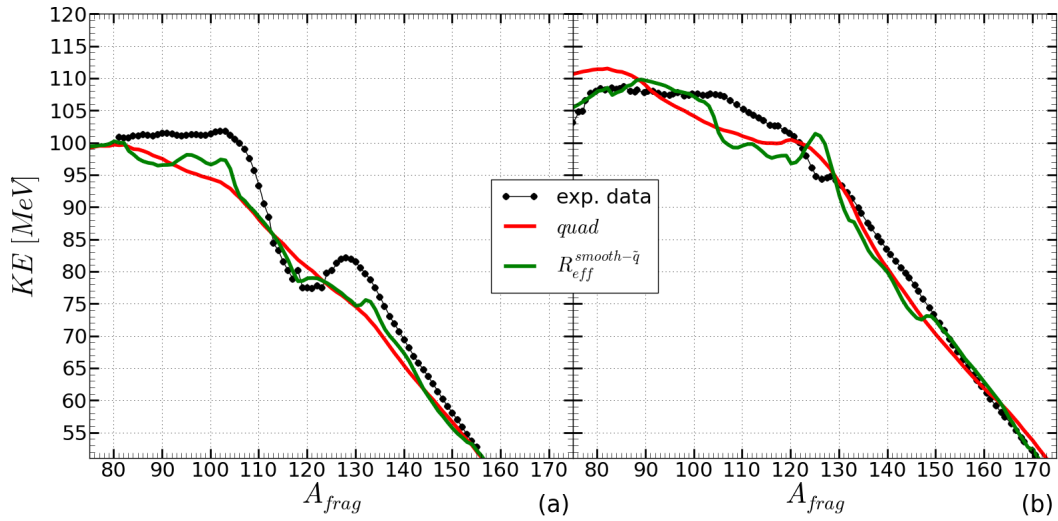


FIGURE 3.23 – Distributions en énergie cinétique calculées avec des quadrupoles (*quad* = solution de référence), les distributions de charges avec les rayons effectifs lissés (noté $R_{eff}^{smooth-\bar{q}}$) comparées avec les données expérimentales [26, 27] pour la réaction $^{235}\text{U}(n_{thr}, f)$ (a) et $^{252}\text{Cf}(sf)$ (b).

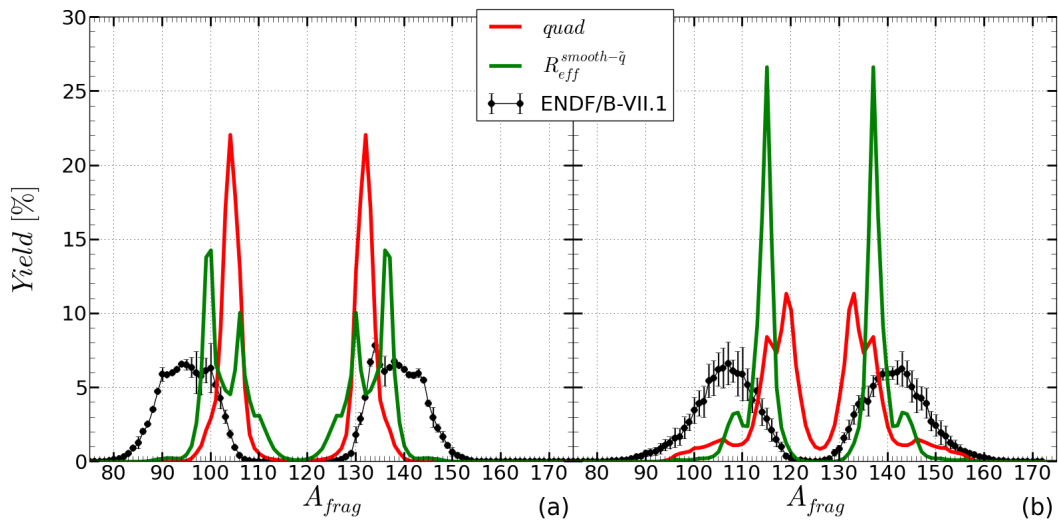


FIGURE 3.24 – Rendements isobariques calculés avec des quadrupoles (*quad* = solution de référence), les distributions de charges avec les rayons effectifs lissés (noté $R_{eff}^{smooth-\bar{q}}$) comparés avec les données évaluées [24] pour la réaction $^{235}\text{U}(n_{thr}, f)$ (a) et $^{252}\text{Cf}(sf)$ (b).

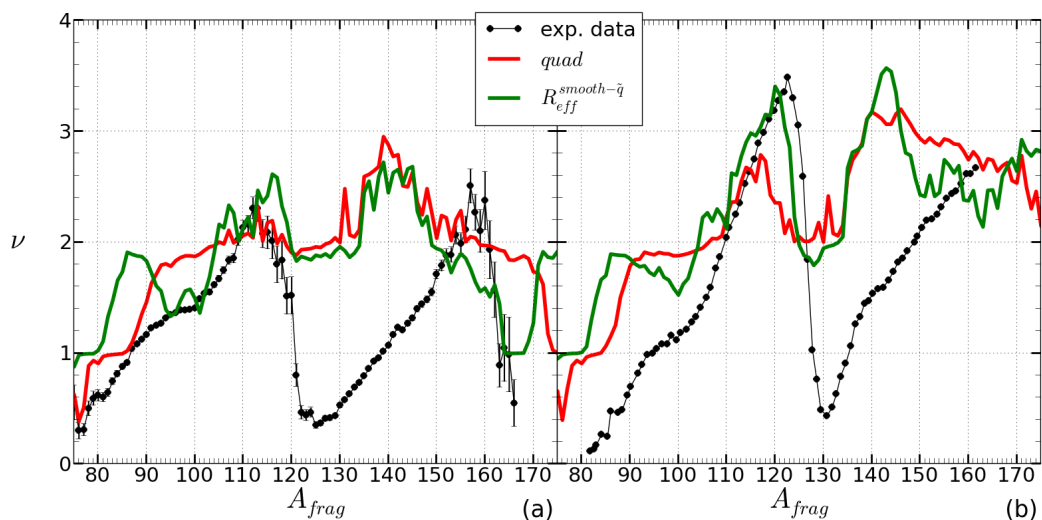


FIGURE 3.25 – Nombre de neutrons évaporés calculés avec des quadrupoles (*quad* = solution de référence), les distributions de charges avec les rayons effectifs lissés (noté $R_{eff}^{smooth-\bar{q}}$) comparés avec les données expérimentales [28, 27] pour la réaction $^{235}\text{U}(n_{thr}, f)$ (a) et $^{252}\text{Cf}(sf)$ (b).

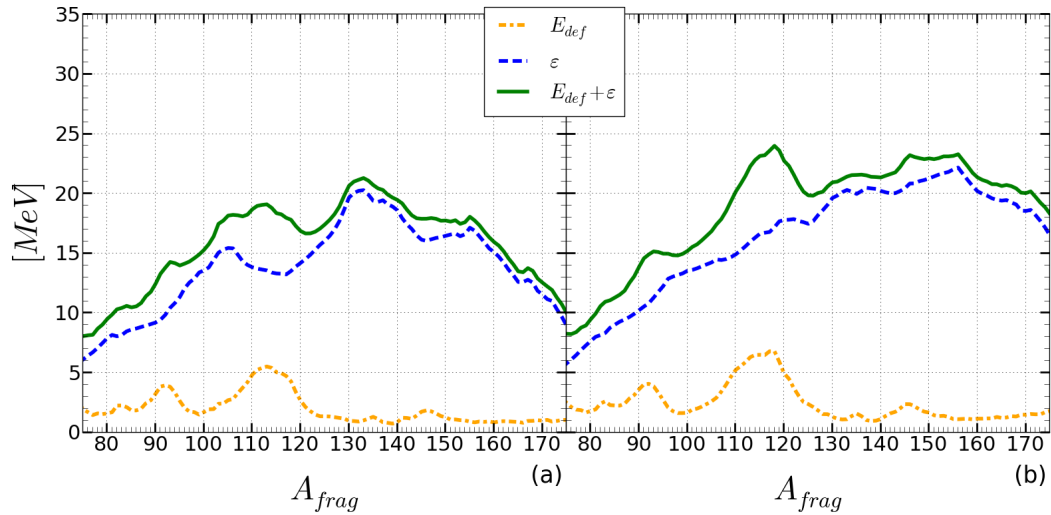


FIGURE 3.26 – Pour rappel, (idem Fig. 2.8) énergie de déformation (courbe orange), d'excitation intrinsèque (courbe bleue) et d'excitation totale (courbe verte) en fonction de la masse du fragment pour la réaction $^{235}\text{U}(n_{thr}, f)$ (a) et $^{252}\text{Cf}(sf)$ (b) dans le cas d'une distribution de charge de forme quadrupolaire et à densité uniforme (solution de référence).

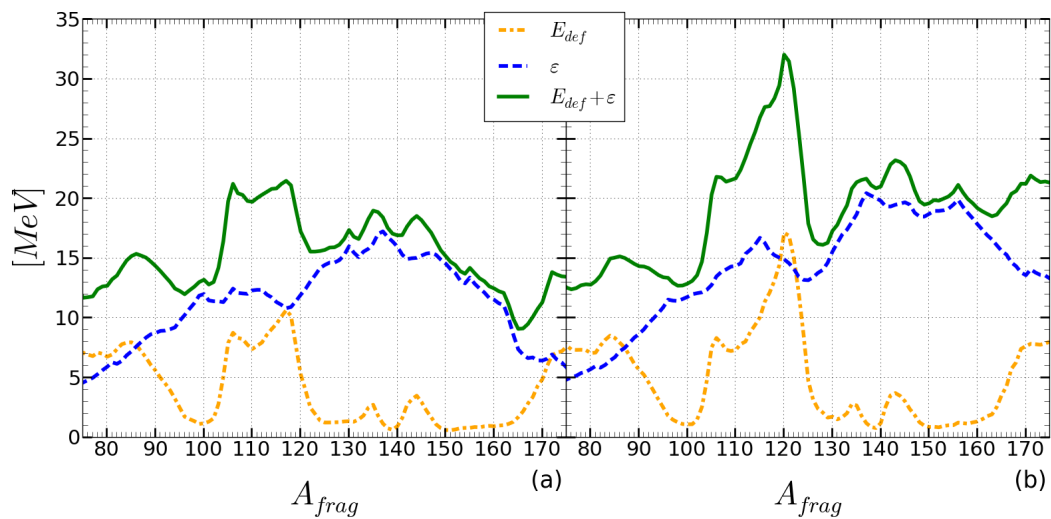


FIGURE 3.27 – Energie de déformation (courbe orange), d'excitation intrinsèque (courbe bleue) et d'excitation totale (courbe verte) en fonction de la masse du fragment pour la réaction $^{235}\text{U}(n_{thr}, f)$ (a) et $^{252}\text{Cf}(sf)$ (b) dans le cas d'une distribution de charge issue des calculs HFB.

3.2.3 Redéfinition de la scission

Jusqu'à présent, la scission est décrite par une distance intersurface des fragments fixée à 5 fm. Les distributions de charge issues des calculs HFB offrent la possibilité de faire évoluer cette définition. Le critère basé sur la distance intersurface est remplacé par un critère sur la densité de charge entre les deux fragments, *ie* la densité de charge au col. Au cours de l'évolution du système fissionnant entre le point selle et le point de scission, un col apparaît puis s'affine de plus en plus. La densité de matière au niveau du col tend vers zéro lorsque le système fissionne.

A partir de la densité de proton au col, notée ρ_{π}^{neck} , il est possible de positionner les deux distributions de charge l'une par rapport à l'autre via leur rayon extérieur, noté R_{ext} , les fragments ayant toujours leurs axes de révolution confondus. Il est défini comme étant la distance entre le barycentre de la distribution et le point où la densité de charge est égale à la moitié de celle du col selon l'axe de révolution du fragment. En d'autres termes le rayon extérieur est tel que $\rho_{\pi}(z = R_{\text{ext}}, r = 0) = \rho_{\pi}^{\text{neck}}/2$. La distance inter-barycentre vaut alors $d_{1,2} = R_{\text{ext}}^1 + R_{\text{ext}}^2$. Dans la pratique, la densité au col peut être fixée à différentes valeurs. Elle sera de $2 \cdot 10^{-3} \text{N}/\text{fm}^3$ par la suite. La figure 3.28 illustre le lien entre les rayons extérieurs des fragments et leur position relative.

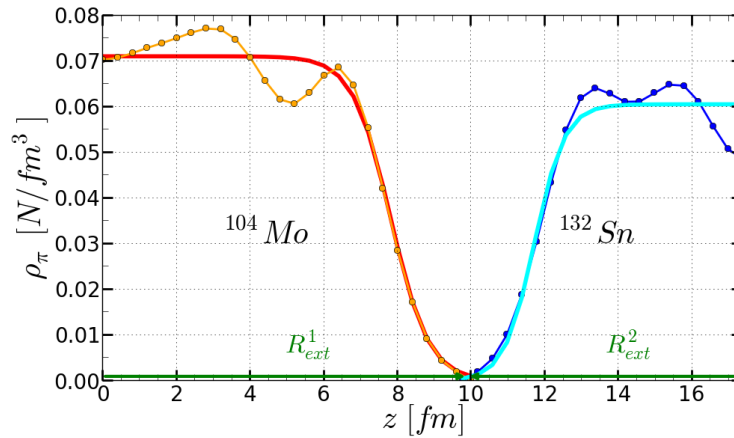


FIGURE 3.28 – Profil de densité de charge le long de l'axe de scission pour la fragmentation ^{104}Mo ($\tilde{q} = 0.68$) + ^{132}Sn ($\tilde{q} = 0$) défini à partir des rayons extérieurs tels que $\rho_{\pi}(z = R_{\text{ext}}, r = 0) = 1.10^{-3} \text{N}/\text{fm}^3$. Les lignes continues épaisses (rouge et bleu) représentent l'ajustement de la distribution de charge (lignes fines avec des ronds) du ^{104}Mo à la déformation $\tilde{q} = 0.68$ et du ^{132}Sn à la déformation $\tilde{q} = 0$. Le col entre les deux fragments est situé à $z = 10 \text{ fm}$.

Dans le cas de la fragmentation $^{132}\text{Sn} + ^{104}\text{Mo}$, l'évolution de l'énergie coulombienne en fonction de la déformation des fragments (Fig. 3.28) est très similaire à celle obtenue en considérant le rayon effectif des fragments et la distance intersurface d (Fig. 3.21). Cependant elle est toujours supérieure d'environ 10-20 MeV selon la déformation comme le montre la figure 3.30. Cela est dû à la proximité plus importante des deux distributions de charge lorsque la scission est définie via la densité de charge au col. Par exemple, dans le cas de la fragmentation $^{132}\text{Sn}(\tilde{q} = 0) + ^{104}\text{Mo}(\tilde{q} = 0.68)$, la distance inter-barycentre est de 18.5 fm si le critère de scission est la distance intersurface (Fig. 3.20) et de 17 fm si le critère de scission est la densité de charge au col (Fig. 3.28) avec $\rho_{\pi}^{\text{neck}} = 2.10^{-3}\text{N}/\text{fm}^3$.

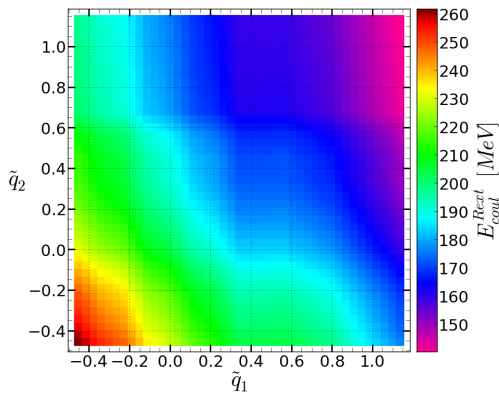


FIGURE 3.29 – Énergie d'interaction coulombienne calculée via la densité au col et les distributions de charge HFB pour la fragmentation $^{132}\text{Sn} + ^{104}\text{Mo}$ en fonction de la déformation des fragments.

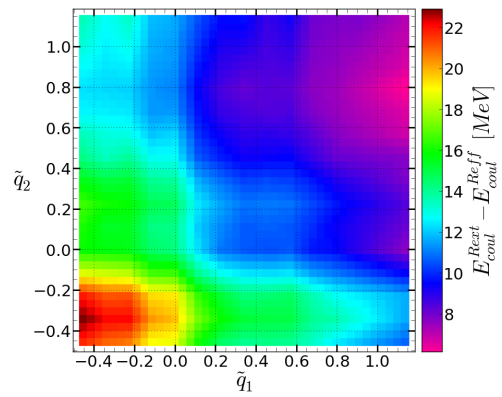


FIGURE 3.30 – Différence entre l'énergie coulombienne calculée via la densité au col et l'énergie coulombienne calculée via la distance intersurface pour la fragmentation $^{132}\text{Sn} + ^{104}\text{Mo}$ en fonction de la déformation des fragments.

Le changement du critère de scission a un impact significatif sur les distributions en énergie cinétique pour les réactions $^{235}\text{U}(n_{\text{th}}, f)$ et $^{252}\text{Cf}(sf)$ (Fig. 3.31). Ce nouveau critère (étiqueté par $R_{\text{ext}}^{0.001}$) permet d'obtenir une distribution en énergie cinétique pour la réaction $^{235}\text{U}(n_{\text{th}}, f)$ en très bon accord avec les données expérimentales (Fig. 3.31, a). Le plateau et le creux des KE expérimentaux sont bien reproduits. Concernant la réaction $^{252}\text{Cf}(sf)$, les KE sont également bien reproduits malgré la surestimation pour les fragments légers ($85 < A_{\text{frag}} < 105$) et pour les fragments lourds complémentaires ($150 < A_{\text{frag}} < 165$). Le creux autour de la masse $A_{\text{frag}} = 125$, visible sur les données expérimentales, est reproduit.

Concernant les rendements de fission, le changement de critère constitue une amélioration. Sur la figure 3.32, l'accroissement du rendement de la masse $A_{\text{frag}} = 145$ et de son complémentaire est remarquable dans les deux réactions étudiées. La largeur des pics se rapproche de celle des données évaluées [24]. Bien que les rendements soient très structurés, le changement de critère améliore les rendements prédits notamment pour la réaction $^{235}\text{U}(n_{\text{th}}, f)$.

La plus grande amélioration est celle des distributions de neutrons évaporés clairement illustrée à la figure 3.33. Ce nouveau critère de scission, couplé aux

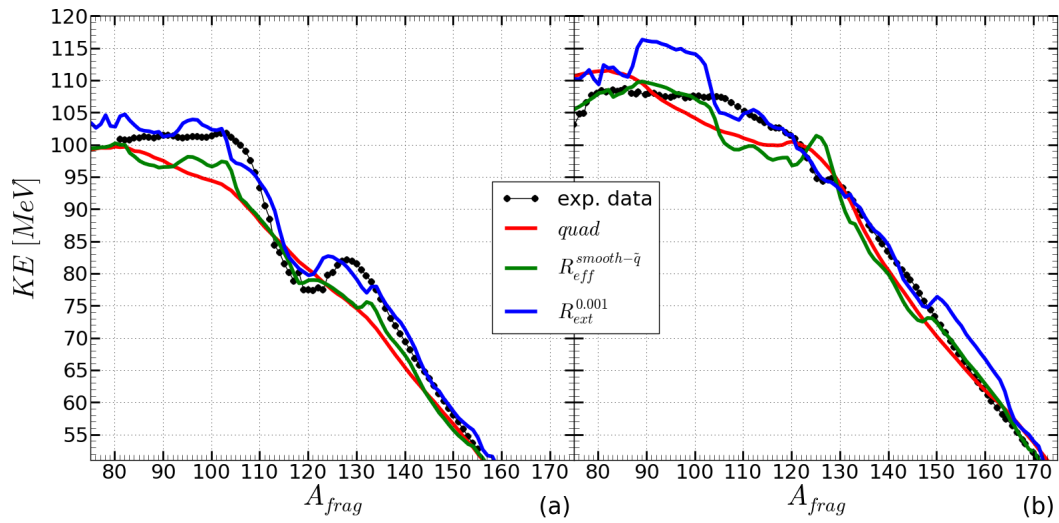


FIGURE 3.31 – Distribution en énergie cinétique calculés avec des quadrupoles, les distributions de charges avec les rayons effectifs lissés et les rayons extérieurs (noté R_{ext}) comparées avec les données expérimentales [26, 27] pour la réaction $^{235}\text{U}(n_{th}, f)$ (a) et $^{252}\text{Cf}(sf)$ (b).

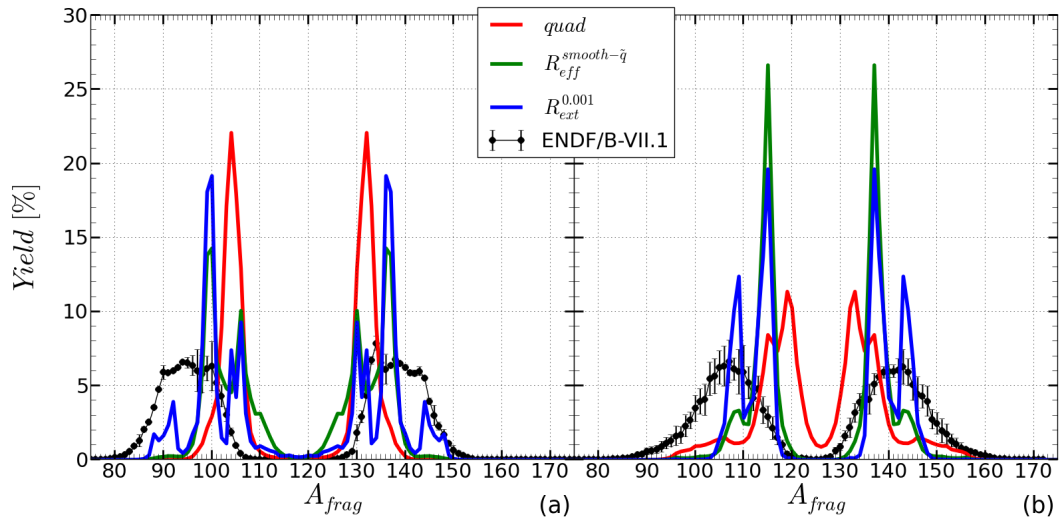


FIGURE 3.32 – Rendements isobariques calculés avec des quadrupoles, les distributions de charges avec les rayons effectifs lissés et les rayons extérieurs (noté R_{ext}) comparés avec les données évaluées [24] pour la réaction $^{235}\text{U}(n_{th}, f)$ (a) et $^{252}\text{Cf}(sf)$ (b).

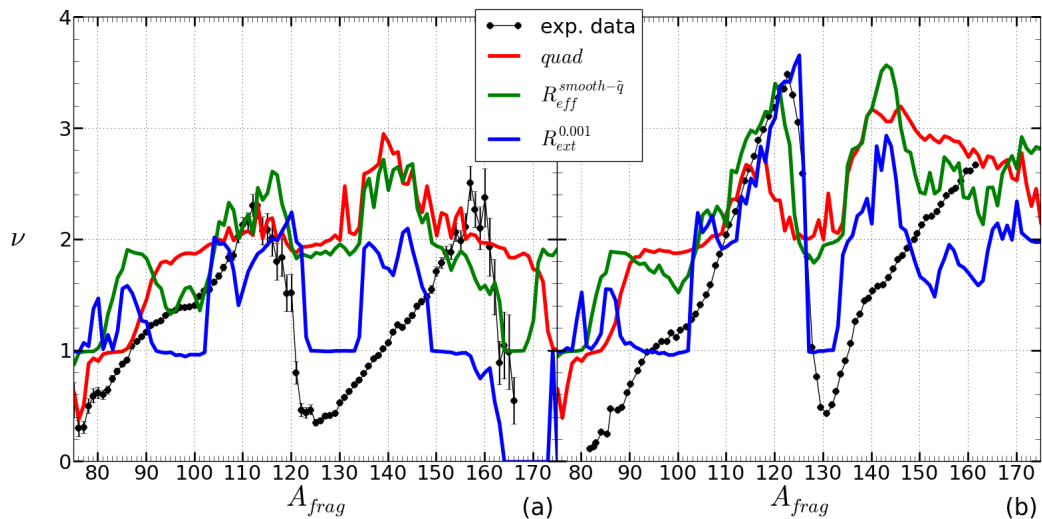


FIGURE 3.33 – Nombre de neutrons évaporés calculés avec des quadrupoles, les distributions de charges avec les rayons effectifs lissés et les rayons extérieurs (noté R_{ext}) comparés avec les données expérimentales [28, 27] pour la réaction $^{235}\text{U}(n_{th}, f)$ (a) et $^{252}\text{Cf}(sf)$ (b).

distributions de charge HFB, fait clairement apparaître une structure en dent de scie surtout dans le cas de la réaction $^{252}\text{Cf}(sf)$. Cela est dû à la diminution de l'énergie disponible puisque les distributions de charge sont plus proches. Cette diminution entraîne une baisse de l'énergie d'excitation intrinsèque des fragments, notamment du fragment lourd, qui emporte la majorité de l'énergie disponible. Cette baisse de l'énergie d'excitation intrinsèque du fragment lourd est à l'origine de la baisse du nombre de neutrons évaporés par ces derniers, surtout autour de la masse $A_{\text{frag}} = 130$.

Les trois observables sont très structurées. Les fluctuations des KE sont en opposition avec celles des rendements et celles des distributions de neutrons évaporés. Lorsque le KE prédit est surestimé par rapport aux données expérimentales, par exemple autour de la masse 95 pour la réaction $^{235}\text{U}(n_{\text{th}}, f)$, le rendement associé et le nombre de neutrons évaporés sont en général sous-estimés. Une amélioration du calcul des distributions de charge HFB notamment par la résolution du problème soulevé à la section 3.2.2. Des études complémentaires sur la stabilité des calculs HFB pour les densités de charge seront sans doute nécessaires.

3.3 SYNTHÈSE DE L'ÉTUDE SUR LA DISTRIBUTION DE CHARGE DU SYSTÈME À LA SCISSION

Les formes quadrupolaires constituent une bonne approximation des densités de charge HFB. Les formes ellipsoïdales induisent des structures dans les KE n'ayant pas de lien avec les résultats expérimentaux. L'étude systématique du TKE et de la déformation moyenne sur un grand nombre de systèmes fissionnant souligne que l'utilisation de forme quadrupolaire est plus adaptée. L'introduction des distributions de charge, issues des calculs HFB, améliore davantage les KE. En particulier, la présence du plateau pour les fragments légers est reproduite. Les rendements de fission sont également améliorés et la structure en dent de scie de la distribution du nombre de neutrons évaporés apparaît. L'utilisation des distributions de charge HFB entraîne une diminution de l'énergie d'excitation des fragments, en particulier des fragments lourds, et une augmentation de l'énergie de déformation des fragments légers.

Une modification de la distance intersurface n'a pas de grand impact sur les caractéristiques globales des observables telles que le mode de fission. Seules les KE et la distribution du nombre de neutrons évaporés subissent un décalage global selon la modification de la distance. Finalement le changement du critère de scission se révèle être une amélioration supplémentaire que se soit pour les KE, où le creux est reproduit, ou bien les rendements de fission. La distribution du nombre de neutrons évaporés est également améliorée, la structure en dent de scie est encore plus marquée que précédemment. Une amélioration du calcul des distributions de charge HFB reste cependant nécessaire pour éventuellement supprimer les fluctuations observées dans les rendements de fission et tenter de mieux faire apparaître la structure en dent de scie de la distribution de nombre de neutrons évaporés.

Importance de la structure nucléaire dans la description des observables

4

SOMMAIRE

4.1	ÉNERGIE INDIVIDUELLE D'UN FRAGMENT	83
4.1.1	Impact de la structure nucléaire	86
4.1.2	Impact de l'appariement	89
4.1.3	Impact de la table de masse	89
4.1.4	Impact de l'interaction	91
4.2	DÉNOMBREMENT DES ÉTATS DU SYSTÈME À LA SCISSION	95
4.2.1	Impact de l'ensemble statistique	95
4.2.2	Densité d'états type gaz de Fermi	98
4.2.3	Densité d'états microscopiques	100
4.3	ÉTAT LE PLUS AVANCÉ DU MODÈLE	105
4.3.1	Fraction d'énergie disponible moyenne	105
4.3.2	Rendements de fission	106
4.3.3	Distribution en énergie cinétique	107
4.3.4	Distributions du nombre de neutrons évaporés	108
4.3.5	Synthèse des avancées du modèle SPY	108



DANS quelle mesure la description des propriétés de structure nucléaire des fragments impacte les observables? A quel point doit-elle être précise pour rendre compte des tendances observées lors de la fission d'un noyau?

L'objectif de ce chapitre est de déterminer la sensibilité des rendements de fission aux différents aspects de la description de la structure nucléaire des fragments. Cette description comporte deux aspects : leur énergie individuelle et leur

densité d'états. Un fragment peut être modélisé par une simple goutte liquide ou bien par un ensemble de nucléons en interaction. Cet ensemble peut être réduit à un nucléon plongé dans un potentiel appelé potentiel de champ moyen. Ce potentiel est obtenu par la méthode HFB à partir d'une interaction nucléon-nucléon effective. La première partie de ce chapitre sera consacrée à l'étude de l'impact de la description de l'énergie individuelle des fragments.

La densité d'états d'un noyau peut être obtenue soit en le modélisant par un gaz de fermions libres soit en se basant sur son schéma de niveau issu des calculs HFB. L'impact de la description des densités d'états sera étudié dans la deuxième partie de ce chapitre.

4.1 ÉNERGIE INDIVIDUELLE D'UN FRAGMENT

La modélisation du noyau par un ensemble de nucléons plongé dans un potentiel de champ moyen constitue l'une des descriptions les plus précises actuellement disponibles pour calculer son énergie individuelle. Afin de comprendre quels sont les effets de la modélisation du noyau sur le mode de fission, il est intéressant de construire quatre descriptions du noyau, de la plus simple à la plus complète et d'étudier leurs impacts sur les rendements de fission.

La description la plus simple du noyau est celle fournie par le modèle de la goutte liquide [35, 36], noté LD pour *Liquid Drop*. Dans ce cadre, l'énergie individuelle du noyau est prise comme :

$$E_{LD}(\tilde{q}) = -15.56A + 17.23A^{2/3} \left(1 + \frac{\alpha_{20}^2}{2\pi}\right) + 0.7 \frac{Z(Z-1)}{A^{1/3}} \left(1 - \frac{\alpha_{20}^2}{4\pi}\right) + 23.6 \frac{(N-Z)^2}{A} \quad (4.1)$$

où $\alpha_{20} = \alpha_2 \sqrt{\frac{4\pi}{5}}$. Le lien entre les paramètres de déformations \tilde{q} et α_2 est détaillé en annexe A.2.

Cette description peut être enrichie en prenant en compte les effets de couche de l'état fondamental. Cet enrichissement est effectué par l'ajout d'un terme correctif à l'énergie LD. La correction de couche du fondamental est obtenue par différence entre l'énergie individuelle d'une goutte liquide sphérique ($E_{LD}(0)$) et la masse expérimentale/théorique interpolée. Une interpolation est nécessaire pour supprimer l'appariement des masses des noyaux impairs (annexe C). L'énergie individuelle, notée SLD pour *Shifted Liquid Drop*, recalée sur la masse interpolée E_{syst}^{\times} , à laquelle les effets d'appariement ont été enlevés (ou réduits) par l'interpolation, s'écrit :

$$E_{SLD}(\tilde{q}) = E_{LD}(\tilde{q}) + (E_{\text{syst}}^{\times} - E_{LD}(0)) \quad (4.2)$$

La description du noyau qui prend en compte les effets de couche quelle que soit la déformation, est celle de la méthode HFB. L'énergie, notée $E_{SHFB}(\tilde{q})$, est obtenue à partir de l'énergie HFB (noté $E_{HFB}(\tilde{q})$) issue de la base AMEDEV [13] en supprimant l'appariement et en la recalant sur la masse expérimentale/théorique interpolée.

La description la plus complète du noyau est celle de la méthode HFB, incluant tous les effets de structure nucléaire quel qu'il soit : effets de couche et d'appariement. L'énergie individuelle issue des calculs HFB est recalée sur la masse expérimentale/théorique, et l'énergie obtenue, notée $E_{SPHFB}(\tilde{q})$, s'écrit :

$$E_{SPHFB}(\tilde{q}) = E_{HFB}(\tilde{q}) + (E_{\text{syst}} - E_{HFB}(\tilde{q}_{GS})) \quad (4.3)$$

Le tableau 4.1 résume les quatre descriptions présentées ci-dessus : LD, SLD, SHFB et SPHFB. Dans la deuxième colonne, les graphiques (a) représentent l'allure de l'énergie individuelle d'un noyau, ici le $^{104}_{41}\text{Nb}_{63}$, en fonction de la description choisie. Les graphiques (b) représentent la différence avec la description précédente. Le contenu de chaque description est synthétisé dans les colonnes de droite : prise en compte des effets de couche de l'état fondamental (noté cc fond), des effets de couche déformés (noté cc défor) et des effets d'appariement (noté app.)

Dans le cadre de la description LD et SLD, l'état fondamental du noyau est sphérique. Le décalage entre les deux dépend de la correction de couche du fondamental. Pour le ${}_{41}^{104}\text{Nb}_{63}$, le noyau est en réalité moins lié qu'une goutte liquide d'où la différence de 2 MeV entre SLD et LD (tab 4.1, ligne SLD, graphique b).

La description SHFB modifie fortement l'allure de l'énergie individuelle par rapport à la description SLD car il y a une dépendance avec la déformation. L'état fondamental est non sphérique ($\tilde{q} = -0.15$) dans cette description. L'énergie de déformation augmente moins rapidement par rapport à la description SLD. Cette différence est d'environ 20-30 MeV pour les grandes déformations ($\tilde{q} > 0.9$) (tab 4.1, ligne SHFB, graphique b).

La description SPHFB, incluant l'appariement, ne modifie pas l'allure de l'énergie individuelle par rapport à la description SHFB. Dans cette nouvelle description, le noyau est moins lié à cause de la présence d'un proton et d'un neutron célibataire. La différence d'énergie entre l'énergie SPHFB et SHFB est d'environ 2 MeV ce qui est en accord avec l'estimation habituellement utilisée dans les formules de masses de type goutte liquide : $2 \frac{12}{\sqrt{A}} = 2.3$ MeV pour l'appariement.

L'objectif de cette section est d'étudier l'influence des différentes descriptions de l'énergie individuelle, présentées ci-dessus, sur les observables mais également d'étudier l'influence de la table de masse et de l'interaction nucléon-nucléon utilisée pour les calculs HFB.

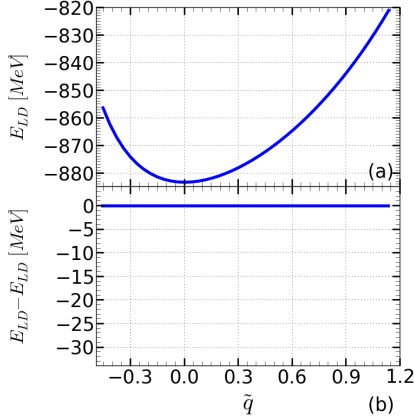
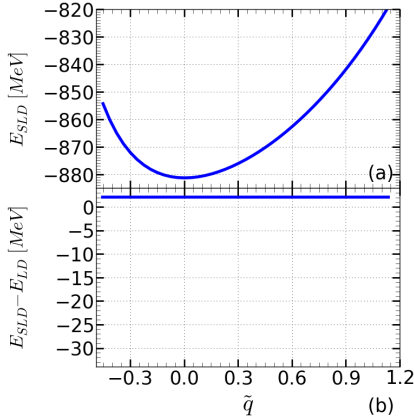
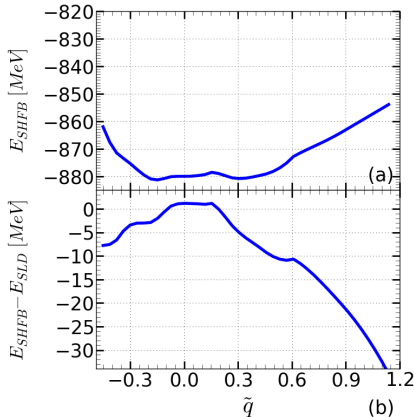
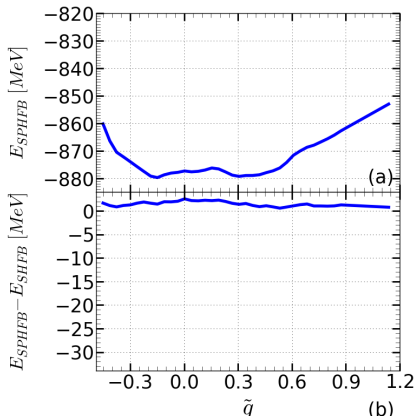
E_{ind}		cc fond	cc défor	app.
LD Goutte liquide	 <p>Graph (a) shows the LD energy E_{LD} [MeV] as a function of \tilde{q}. The energy starts at approximately -860 MeV at $\tilde{q} = -0.3$, reaches a minimum of about -880 MeV at $\tilde{q} = 0$, and increases to about -820 MeV at $\tilde{q} = 1.2$. Graph (b) shows the energy difference $E_{LD} - E_{LD}$ [MeV] as a function of \tilde{q}, which is a constant horizontal line at 0 MeV.</p>	X	X	X
SLD Goutte liquide calée sur la masse "réelle" sans appariement	 <p>Graph (a) shows the SLD energy E_{SLD} [MeV] as a function of \tilde{q}. The energy starts at approximately -860 MeV at $\tilde{q} = -0.3$, reaches a minimum of about -880 MeV at $\tilde{q} = 0$, and increases to about -820 MeV at $\tilde{q} = 1.2$. Graph (b) shows the energy difference $E_{SLD} - E_{LD}$ [MeV] as a function of \tilde{q}, which is a constant horizontal line at approximately 2 MeV.</p>	✓	X	X
SHFB Calcul microscopique calé sur la masse "réelle" sans appariement	 <p>Graph (a) shows the SHFB energy E_{SHFB} [MeV] as a function of \tilde{q}. The energy starts at approximately -860 MeV at $\tilde{q} = -0.3$, reaches a minimum of about -880 MeV at $\tilde{q} = 0$, and increases to about -820 MeV at $\tilde{q} = 1.2$. Graph (b) shows the energy difference $E_{SHFB} - E_{SLD}$ [MeV] as a function of \tilde{q}, which is a curve starting at 0 MeV at $\tilde{q} = -0.3$, peaking at about 5 MeV at $\tilde{q} = 0$, and decreasing to about -30 MeV at $\tilde{q} = 1.2$.</p>	✓	✓	X
SPHFB Calcul microscopique calé sur la masse "réelle" avec appariement	 <p>Graph (a) shows the SPHFB energy E_{SPHFB} [MeV] as a function of \tilde{q}. The energy starts at approximately -860 MeV at $\tilde{q} = -0.3$, reaches a minimum of about -880 MeV at $\tilde{q} = 0$, and increases to about -820 MeV at $\tilde{q} = 1.2$. Graph (b) shows the energy difference $E_{SPHFB} - E_{SHFB}$ [MeV] as a function of \tilde{q}, which is a constant horizontal line at approximately 2 MeV.</p>	✓	✓	✓

TABLE 4.1 – Tableau récapitulatif des différentes descriptions de l'énergie individuelle d'un noyau, ici le $^{104}_{41}\text{Nb}_{63}$. L'abréviation cc signifie correction de couche et app. appariement.

4.1.1 Impact de la structure nucléaire

Les résultats présentés au chapitre 2 ont révélé l'importance de la structure nucléaire des fragments pour comprendre la formation des fragments de fission. L'étude qui suit va déterminer l'impact de la description de l'énergie individuelle sur les rendements de fission et sur le mode de fission (symétrique, asymétrique ...). Pour étudier cela, trois descriptions de l'énergie individuelle des fragments vont être envisagées : LD, SLD et SHFB.

Lorsque l'énergie individuelle d'un fragment est modélisé par une approche de type goutte liquide, la fission est toujours symétrique, quel que soit le système fissionnant, comme illustré à la figure 4.1 (courbe orange). En effet la configuration symétrique est celle qui maximise l'énergie disponible. Cette description du noyau ne rend aucunement compte de la fission asymétrique des actinides.

La seule prise en compte des effets de couche des états fondamentaux (description SLD) permet de rendre compte de la fission asymétrique de l'uranium et du californium. De plus, cette description du noyau rend compte de l'asymétrie plus importante de l'uranium par rapport au californium, voir la courbe cyan de la figure 4.1, bien que la différence d'asymétrie entre les deux systèmes fissionnant ne soit pas en réalité aussi importante. Cela est dû à la forte énergie de liaison du ^{132}Sn qui rend ces fragmentations très exothermiques.

La prise en compte d'une évolution de la structure nucléaire avec la déformation (description SHFB) apporte un raffinement supplémentaire notamment pour la réaction $^{252}\text{Cf}(sf)$ où l'asymétrie se rapproche de l'asymétrie expérimentale. Dans le cas de la réaction $^{235}\text{U}(n_{\text{th}}, f)$, ce raffinement ne modifie que faiblement la distribution des rendements de fission compte tenu de la forte influence de l'état fondamental du ^{132}Sn .

L'introduction des énergies individuelles de type SHFB favorise généralement les fragmentations plus asymétriques dans le cas de la réaction $^{252}\text{Cf}(sf)$. La comparaison de l'évolution du mode de fission entre la systématique obtenue avec les énergies SLD (Fig. 4.2) et celle obtenue avec les énergies SHFB (Fig. 4.3) révèle que la fission asymétrique des actinides peut être comprise en première approximation en ne considérant que la masse des fragments. En revanche, la déformation des fragments est constante quelle que soit sa masse dans le cadre de la description SLD, tout comme la forme de la distribution en énergie cinétique (Fig. 4.4). Dans cette description, tous les fragments sont légèrement déformés ($\tilde{q} \approx 0.25$) puisque l'évolution des énergies individuelles avec la déformation est la même quel que soit le noyau considéré.

Concernant les systématiques, les transitions observées dans la figure 4.2 sont uniquement dues au recalage sur les masses expérimentales/théoriques. La transition symétrique-asymétrique entre les noyaux légers et les actinides a lieu pour $N_{\text{CN}} = 110$ au lieu de $N_{\text{CN}} = 130$ dans le cas de la solution de référence. Pour les noyaux très légers ($N_{\text{CN}} < 95$) le mode de fission est asymétrique dans les deux cas. La transition asymétrie-symétrique a lieu pour $N_{\text{CN}} = 95$ au lieu de $N_{\text{CN}} = 100$. L'introduction des énergies E_{SHFB} a pour effet de décaler la localisation de la transition et la position des pics de quelques nucléons. Les modes à trois ou quatre pics, présents pour $160 < N_{\text{CN}} < 180$, sont dus à la présence de

fragments déformés ($\bar{q} > 0.4$), rendue possible uniquement par les énergies E_{SHFB} . Pour les systèmes fissionnant très lourds ($N_{\text{CN}} > 185$), la fission asymétrique prédite avec SLD est due à la présence de fragmentations très asymétriques avec 126 neutrons pour le fragment lourd. Les énergies SHFB favorisent par contre des fragmentations symétriques dont l'état fondamental de chaque fragment est non sphérique.

En conclusion, l'utilisation de la description SLD aboutit à des fissions asymétriques des noyaux très légers et des actinides à cause de l'importance de la fermeture de couche sphérique du ^{132}Sn . Pour les noyaux lourds, la fission est asymétrique à cause de la fermeture de couche $N_{\text{frag}} = 126$ qui donne naissance à des fragmentations très asymétriques. Cette description n'est pas en mesure d'expliquer les énergies cinétiques des fragments. Dans cette description la déformation des fragments est variable (Fig. 4.4). Les modes à trois ou quatre pics n'apparaissent qu'en prenant en compte l'évolution des effets de couche des fragments avec leur déformation (SHFB). Ces modes sont dus à la présence de fortes fermetures de couche déformées dans les fragmentations asymétriques.

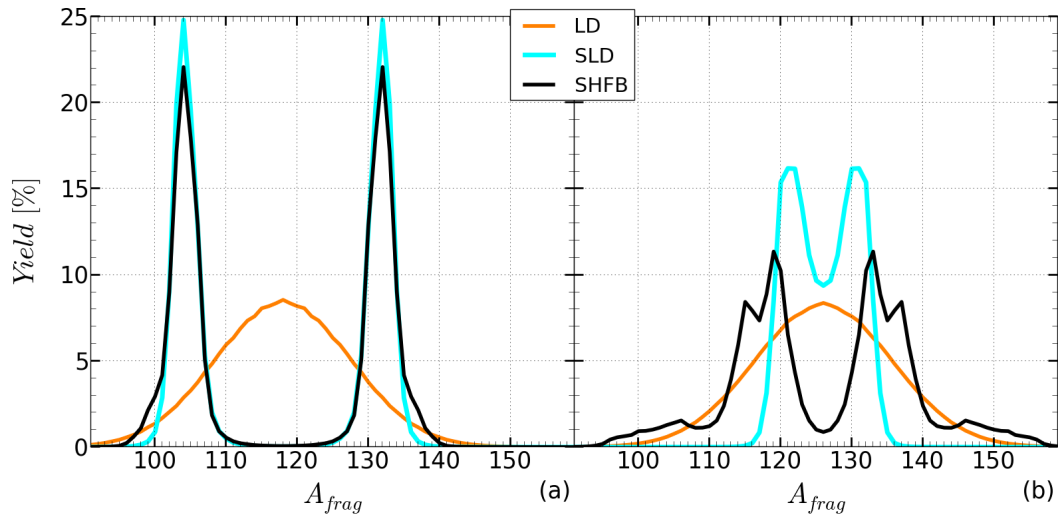


FIGURE 4.1 – Rendements isotopiques en fonction de différents choix pour les énergies individuelles pour la réaction $^{235}\text{U}(n_{\text{th}}, f)$ (a) et $^{252}\text{Cf}(sf)$ (b).

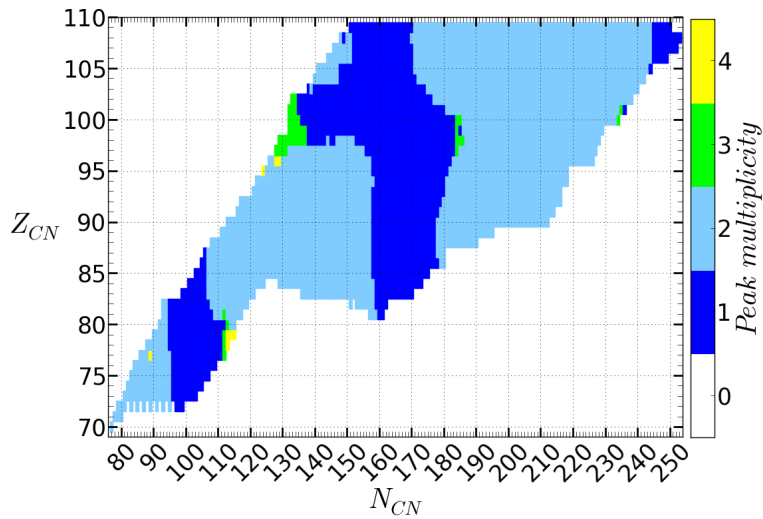


FIGURE 4.2 – Nombre de pics dans les distributions de rendements de fission isobariques en fonction du système fissionnant pour une énergie d'excitation de 8 MeV avec des énergies individuelles de type SLD.

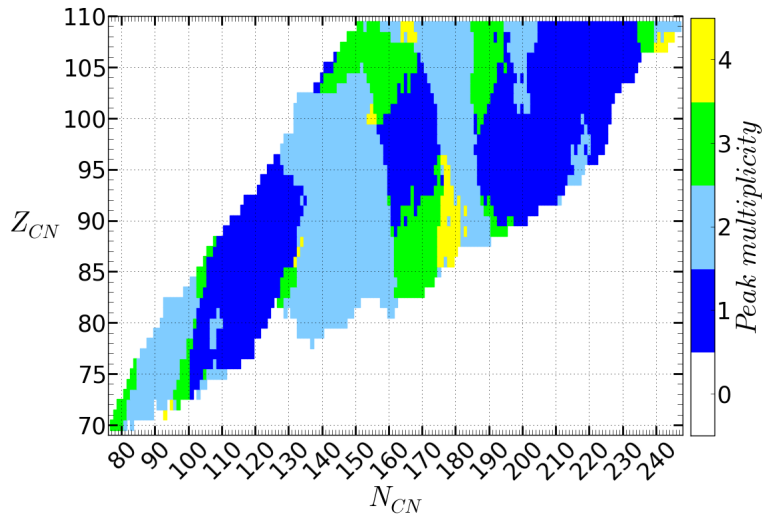


FIGURE 4.3 – Nombre de pics dans les distributions de rendements de fission isobariques en fonction du système fissionnant pour une énergie d'excitation de 8 MeV avec des énergies individuelles de type SHFB.

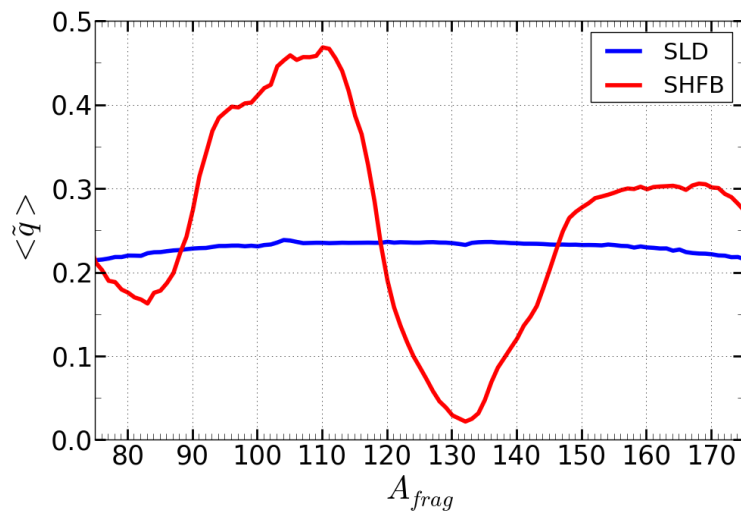


FIGURE 4.4 – Déformation fragments en fonction de différents choix pour les énergies individuelles pour la réaction $^{235}\text{U}(n_{th}, f)$.

4.1.2 Impact de l'appariement

Les effets d'appariement au sein des fragments ont un grand impact sur les rendements de fission. La figure 4.5 souligne bien l'importance de cet impact, que se soit pour la réaction $^{235}\text{U}(n_{\text{th}}, f)$ ou bien la réaction $^{252}\text{Cf}(sf)$ induisant un effet pair-impair bien plus important que celui observé expérimentalement. Lorsque la description SPHFB est utilisée, les effets d'appariement ne sont pas pris correctement en compte d'où l'utilisation de la description SHFB dans la solution de référence qui réduit leur impact dans les énergies individuelles. La procédure de suppression de l'appariement des énergies SPHFB pour obtenir les énergies consiste à interpoler sur les noyaux pair-pair voisins. La méthode de suppression de l'appariement est développée en annexe C.

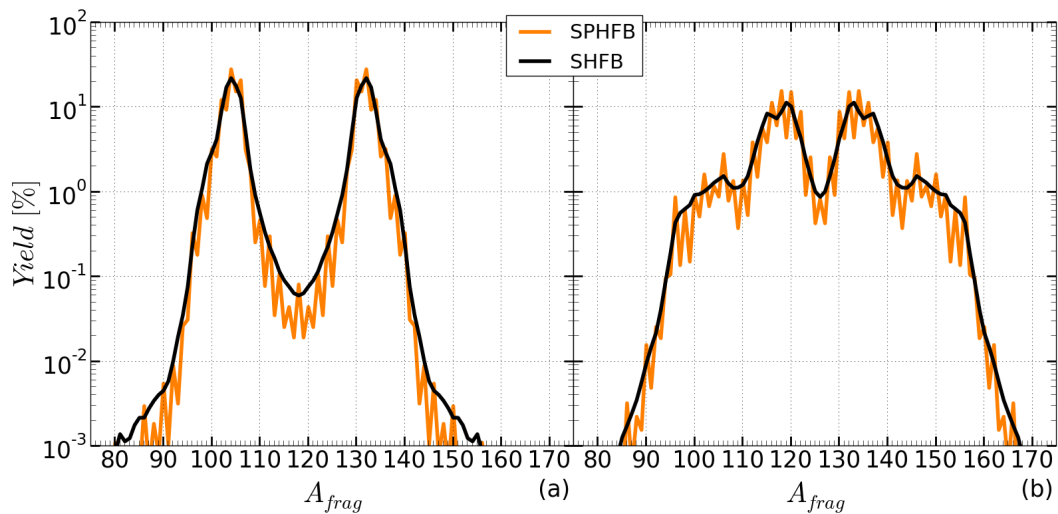


FIGURE 4.5 – Rendements isobariques obtenus à partir des énergies individuelles SHFB et SPHFB pour la réaction $^{235}\text{U}(n_{\text{th}}, f)$ (a) et $^{252}\text{Cf}(sf)$ (b).

4.1.3 Impact de la table de masse

Etant donné que l'ensemble des énergies individuelles HFB sont recalées sur une table de masse, il est nécessaire d'étudier son impact sur les prédictions. Les masses théoriques sont utilisées uniquement lorsque la masse du noyau en question n'a pas été mesurée. Ainsi un changement de table de masse n'impacte que les masses non mesurées. La table de masse de référence, la table hfb21 [14], contient les masses de 8388 noyaux, obtenues par la méthode HFB avec l'interaction nucléon-nucléon Skyrme. Les paramètres de cette interaction sont déterminés à partir de 2149 masses expérimentales (Z et $N \geq 8$) et des propriétés de la matière nucléaire infinie.

La dépendance des prédictions sera analysée en comparant les résultats avec ceux obtenus avec deux autres tables de masse. La première est la table de masse hfb14 [37]. La différence entre ces deux tables de masses est la paramétrisation

de l'interaction nucléon-nucléon, plus ancienne pour hfb14. La seconde table est celle de Möller *et al* [38]. Elle contient 4782 masses, calculées dans le cadre d'une approche macro-microscopique en se basant sur 1323 masses expérimentales et 28 barrières de fission.

Les rendements de fission obtenus pour les réactions $^{235}\text{U}(n_{\text{th}}, f)$ et $^{252}\text{Cf}(sf)$ avec les trois tables de masse sont similaires, voir figure 4.6. Les deux réactions précédentes ne font appel qu'à un nombre restreint de masses. Elles ne permettent pas de tester l'ensemble de la table de masse. Seule une étude systématique est en mesure de le faire.

Cette étude sera effectuée uniquement avec les tables hfb14 et hfb21 puisque la table de masse de Möller *et al* n'est pas suffisamment étendue pour permettre l'étude systématique. La comparaison entre la figure 4.7 et 4.8 montre que le changement de table de masse n'a pas d'impact significatif dans la région des noyaux connus. Dans la zone $160 < N_{\text{CN}} < 180$, avec hfb14, les rendements de fission présentent des fluctuations dues à des effets d'appariement résiduels ; l'interpolation sur les noyaux pair-pair voisins ne supprime pas entièrement l'appariement.

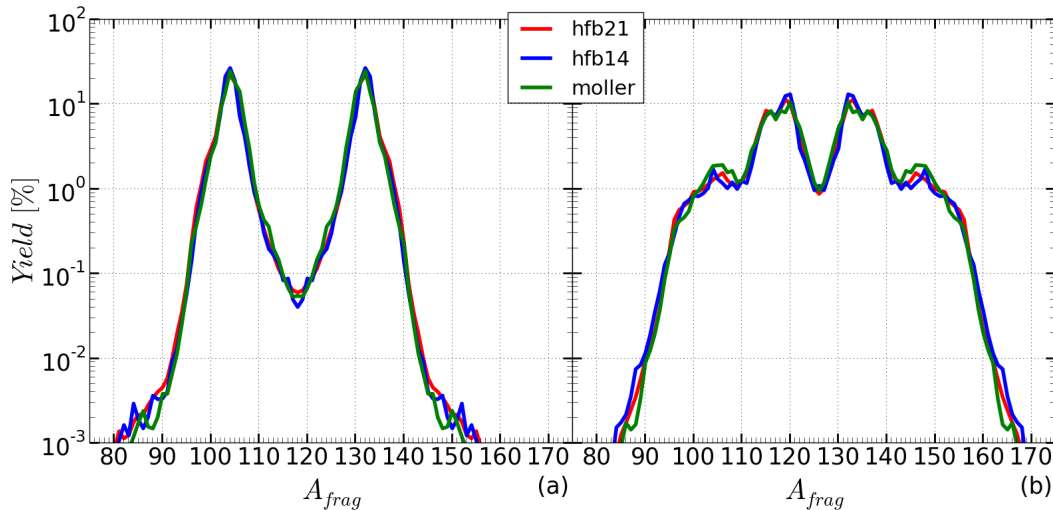


FIGURE 4.6 – Rendements de fission isobarique en fonction de la table de masse utilisée : hfb21 [14], hfb14 [37] ou celle de Möller *et al* [38] ; pour la réaction $^{235}\text{U}(n_{\text{th}}, f)$ (a) et $^{252}\text{Cf}(sf)$ (b).

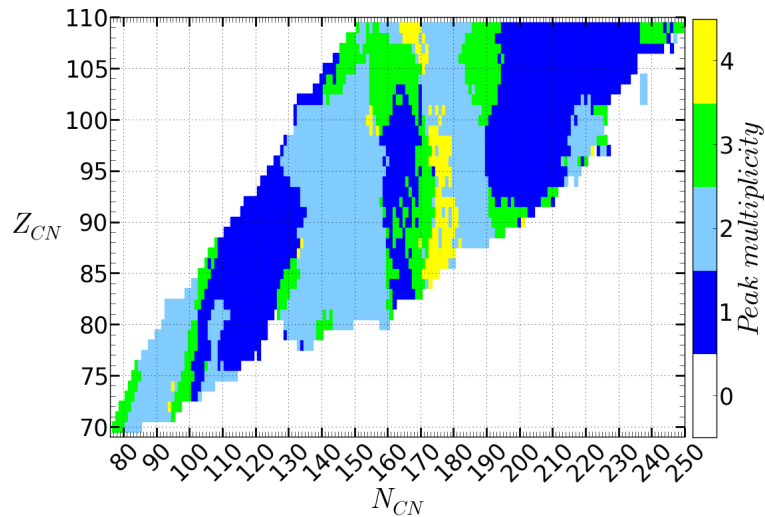


FIGURE 4.7 – Nombre de pics dans les distributions de rendements de fission isobariques en fonction du système fissionnant pour une énergie d'excitation de 8 MeV avec la table de masse hfb14 [37].

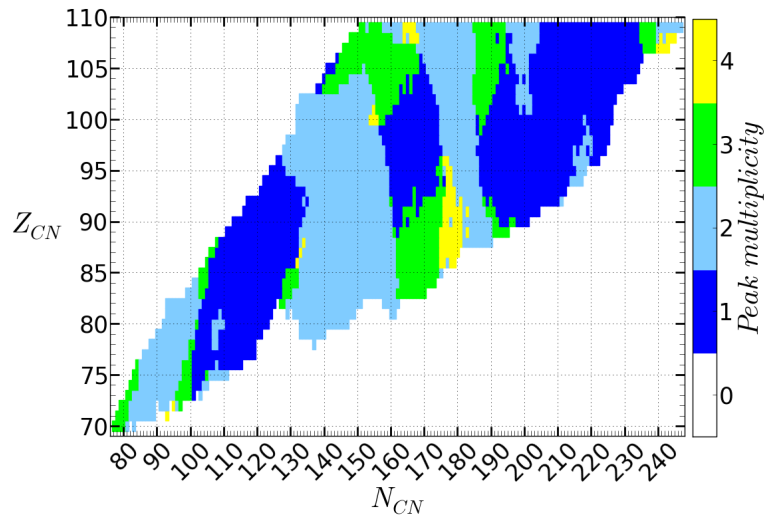


FIGURE 4.8 – Nombre de pics dans les distributions de rendements de fission isobariques en fonction du système fissionnant pour une énergie d'excitation de 8 MeV avec la table de masse hfb21 [14].

4.1.4 Impact de l'interaction

Le changement d'interaction nucléon-nucléon effective modifie l'énergie individuelle des noyaux et permet d'étudier, via une étude systématique, l'impact de l'interaction sur les prédictions du modèle.

En plus de l'interaction Gogny DIS [11] utilisée jusqu'à présent pour le calcul des énergies individuelles, deux autres interactions nucléon-nucléon vont être considérées. La première est l'interaction Gogny D1M [39] qui a été développée pour mieux rendre compte des masses nucléaires. La seconde est l'interaction de Skyrme hfb24. Contrairement à l'interaction de Gogny, l'interaction de Skyrme [40] est une interaction de portée nulle.

Dans le cas des réactions $^{235}\text{U}(n_{\text{th}}, f)$ et $^{252}\text{Cf}(sf)$, dont les rendements de fission sont illustrés sur la figure 4.9, le choix de l'interaction n'a pas d'impact majeur sur les rendements de fission, en particulier pour les interactions Gogny D1S et Skyrme hfb24. La comparaison entre les différentes systématiques, voir les figures 4.10 (D1S), 4.11 (D1M) et 4.12 (hfb24), confirme le faible impact du choix de l'interaction nucléon-nucléon. La dépendance du mode de fission avec le nombre de neutrons N_{CN} et de protons Z_{CN} du système fissionnant est globalement la même dans les trois cas. Néanmoins quelques différences sont notables. Dans la région $N_{\text{CN}} \approx 110$, le petit îlot de fission asymétrique présent lorsque l'interaction Gogny D1S est utilisée, s'agrandit pour former une bande dans les deux autres cas. Cette bande est assez importante lorsque l'interaction Gogny D1M est utilisée. La seconde différence est localisée dans la région $N_{\text{CN}} \approx 175$ et $Z_{\text{CN}} \approx 90$. Lorsque les interactions Gogny D1M ou Skyrme hfb24 sont utilisées, la fission à quatre pics est moins présente. Cela est dû à une diminution de la fermeture de couche $N_{\text{frag}} = 72$, responsable de la fission à 4 pics (section 2.4.1). Cette baisse de l'impact de cette fermeture de couche est particulièrement visible sur les rendements isotopiques de la chaîne isotopique du thorium autour de $A_{\text{CN}} = 260 - 270$ (Fig. 4.13, 4.14 et 4.15).

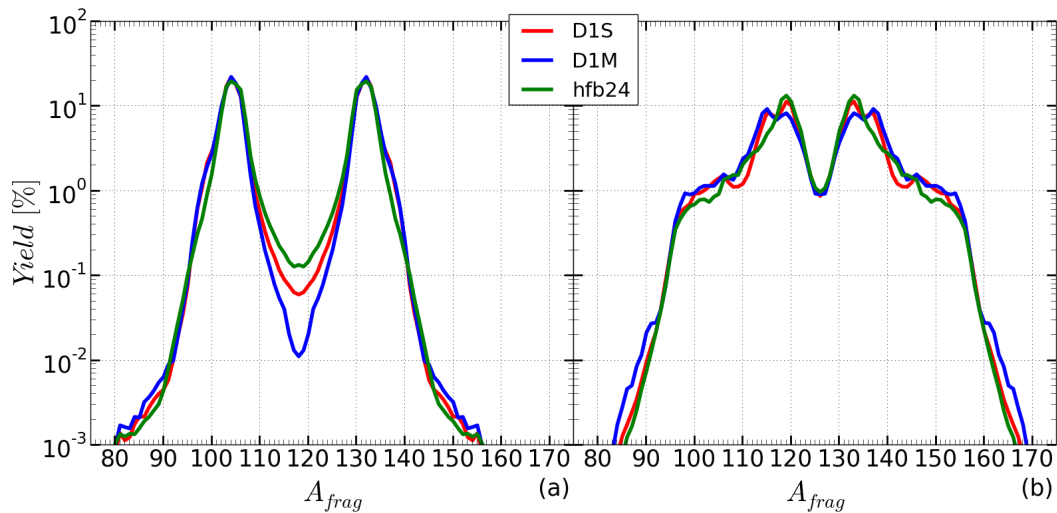


FIGURE 4.9 – Rendements isobariques en fonction de l'interaction nucléon-nucléon (Skyrme hfb24 [40], Gogny D1S [41] et Gogny D1M [39]) pour le calcul des énergies individuelles pour la réaction $^{235}\text{U}(n_{\text{th}}, f)$ (a) et $^{252}\text{Cf}(sf)$ (b).

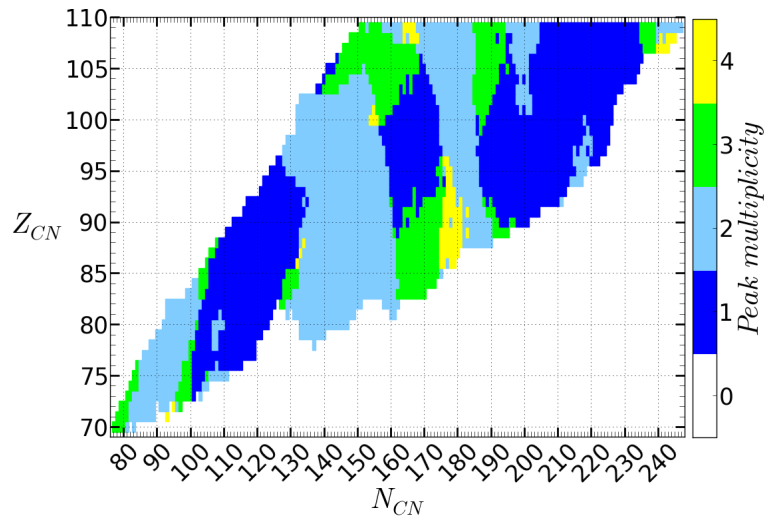


FIGURE 4.10 – Nombre de pics dans les distributions de rendements de fission isobariques en fonction du système fissionnant pour une énergie d'excitation de 8 MeV avec l'interaction nucléon-nucléon Gogny D1S [11] pour le calcul des énergies individuelles.

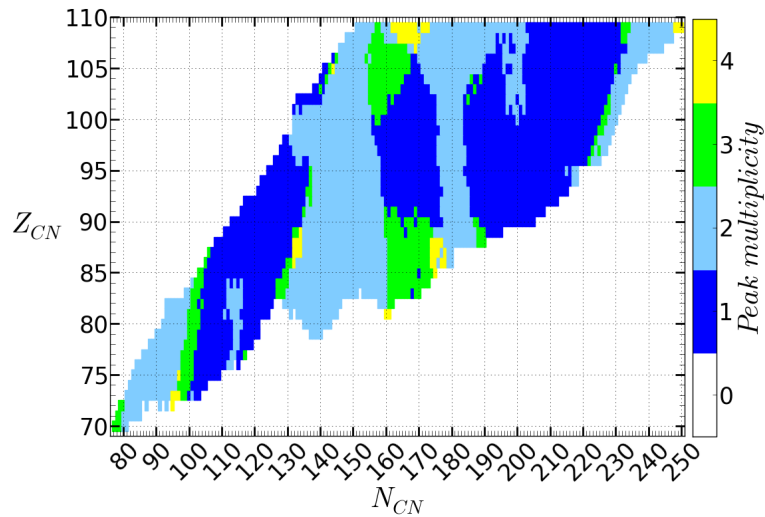


FIGURE 4.11 – Nombre de pics dans les distributions de rendements de fission isobariques en fonction du système fissionnant pour une énergie d'excitation de 8 MeV avec l'interaction nucléon-nucléon Gogny D1M [39] pour le calcul des énergies individuelles.

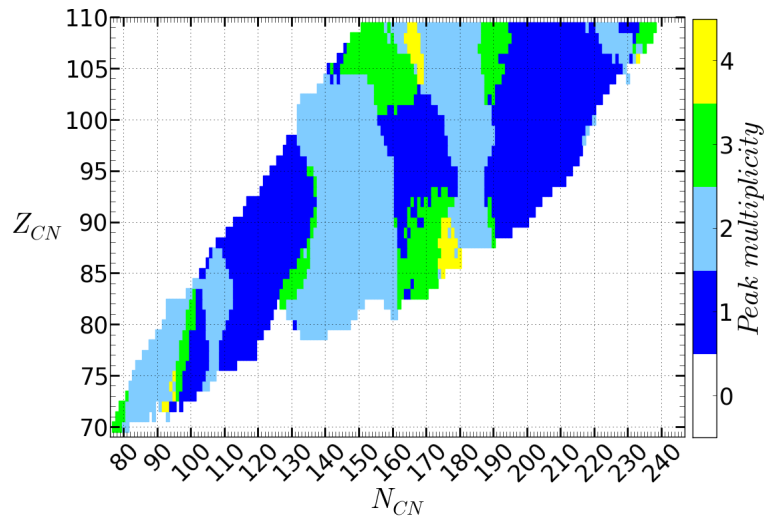


FIGURE 4.12 – Nombre de pics dans les distributions de rendements de fission isobariques en fonction du système fissionnant pour une énergie d'excitation de 8 MeV avec l'interaction nucléon-nucléon Skyrme hfb24 [40] pour le calcul des énergies individuelles.

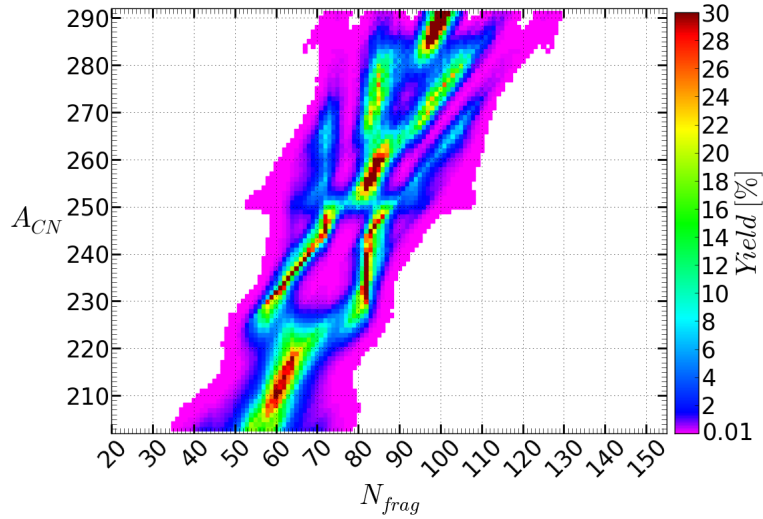


FIGURE 4.13 – Distribution de rendement isotonique des noyaux de la chaîne isotopique du thorium pour une énergie d'excitation de 8 MeV avec l'interaction nucléon-nucléon Gogny D1S [? 11] pour le calcul des énergies individuelles.

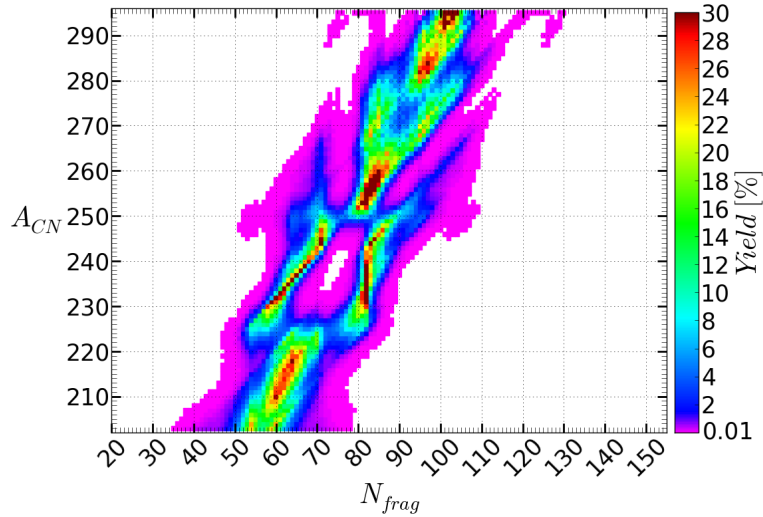


FIGURE 4.14 – Distribution de rendement isotonique des noyaux de la chaîne isotopique du thorium pour une énergie d'excitation de 8 MeV avec l'interaction nucléon-nucléon Gogny D1M [39] pour le calcul des énergies individuelles.

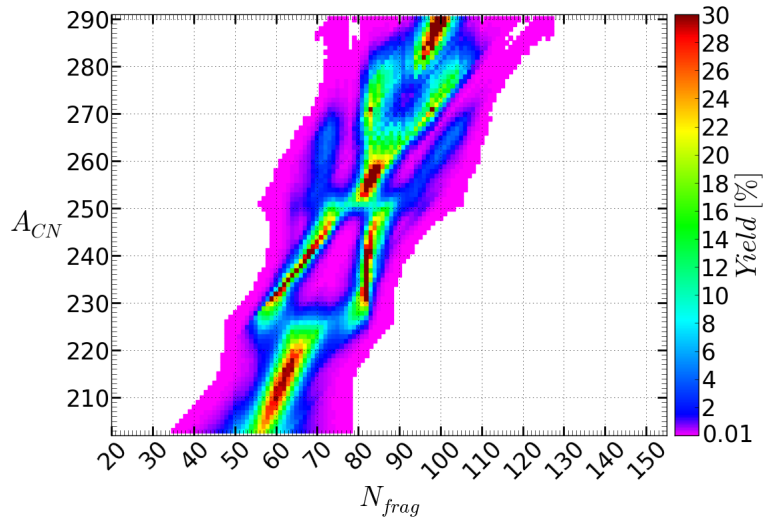


FIGURE 4.15 – Distribution de rendement isotonique des noyaux de la chaîne isotopique du thorium pour une énergie d'excitation de 8 MeV avec l'interaction nucléon-nucléon Skyrme hfb24 [40] pour le calcul des énergies individuelles.

4.2 DÉNOMBREMENT DES ÉTATS DU SYSTÈME À LA SCISSION

Après avoir étudié l'impact des énergies individuelles, la section ci-dessous s'intéresse à l'impact de la description statistique utilisée dans le modèle SPY. Dans le modèle de Wilkins, une description canonique a été utilisée. Le modèle SPY permettant l'accès à l'énergie disponible à la scission de façon absolue, il privilégiera une description microcanonique. Cette description nécessite des densités d'états qui peuvent être modélisées par un simple gaz de Fermi ou issues de calculs microscopiques bien plus sophistiqués. L'ensemble de ces possibilités va être étudié et discuté.

4.2.1 Impact de l'ensemble statistique

Dans le modèle SPY, où l'ensemble statistique choisi est l'ensemble microcanonique, la probabilité d'une fragmentation $\left({}_{Z_1}^{A_1} X_{N_1} + {}_{Z_2}^{A_2} X_{N_2} \right)$, pour un couple de déformations donné $(\tilde{q}_1, \tilde{q}_2)$ et d'énergie disponible AE, vaut :

$$\Pi_{\text{SPY}} = \int_0^1 \rho_1(x\text{AE}) \rho_2((1-x)\text{AE}) \delta E^2 dx \quad (4.4)$$

où les fragments sont supposés isolés l'un de l'autre. Si l'ensemble statistique choisi est l'ensemble canonique alors cette probabilité devient :

$$\Pi_{\text{cano}} = \frac{e^{\frac{\text{AE}}{T}}}{\sum e^{\frac{\text{AE}}{T}}} = \frac{e^{\frac{-V_{\text{sc}}}{T}}}{\sum e^{\frac{-V_{\text{sc}}}{T}}} \quad (4.5)$$

où T est la température du système à la scission. La probabilité d'une fragmentation peut être exprimée, comme dans le modèle de Wilkins *et al*, en fonction de l'énergie potentielle du système à la scission, noté V_{sc} , puisque $\text{AE} = E_{\text{tot}} - V_{\text{sc}}$ où E_{tot} est l'énergie totale du système fissionnant.

Choisir l'ensemble canonique revient à considérer que le système fissionnant est plongé dans un thermostat de température T . Cette température est un paramètre libre puisque le thermostat n'a pas d'existence dans le processus de fission. Comme le montre la figure 4.16, les rendements de fission des réactions ${}^{235}\text{U}(n_{\text{th}}, f)$ et ${}^{252}\text{Cf}(sf)$ obtenus dans le cadre d'un ensemble microcanonique sont très proches de ceux calculés dans le cadre d'un ensemble canonique avec une température de 1 MeV. Cette température coïncide avec la température collective du modèle de Wilkins *et al* [6]. Une augmentation de la température a pour effet l'élargir les pics et de diminuer le rapport pic/vallée. Cette augmentation de la température peut être associée à une fission de plus haute énergie.

Les systématiques du mode de fission obtenues avec une description statistique microcanonique (Fig. 4.17) ou canonique avec une température de 1 MeV (Fig. 4.18) sont quasiment identiques à quelques différences mineures près. La systématique du mode de fission obtenue avec une description statistique canonique avec une température de 5 MeV, figure 4.19, met en évidence une évolution du mode de fission lorsque la température passe de 1 à 5 MeV. Comme pour les deux réactions spécifiques discutées précédemment, l'augmentation de la température permet de

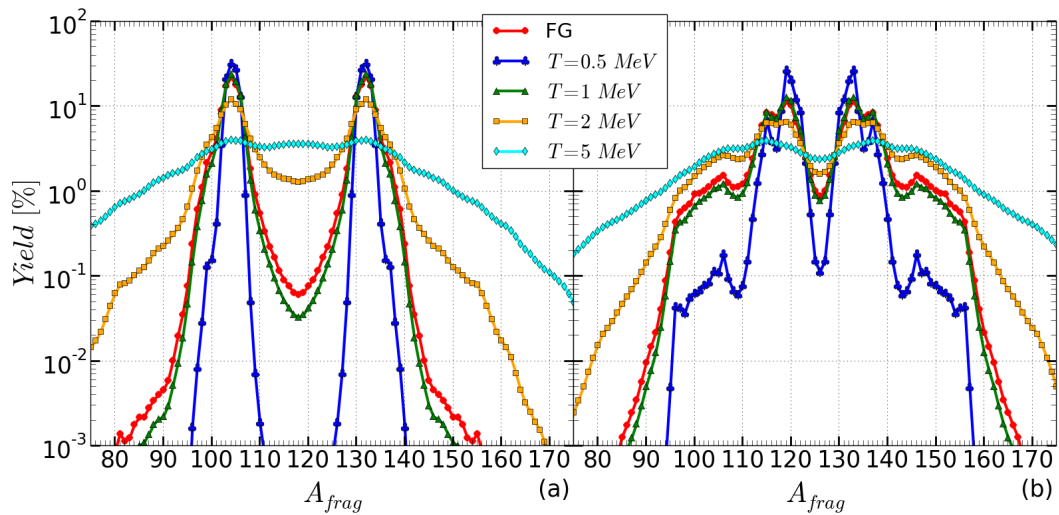


FIGURE 4.16 – Rendements isobariques calculés dans le cadre de la solution de référence (FG) et dans le cadre d'un ensemble canonique à différentes températures (T) pour la réaction $^{235}\text{U}(n_{th}, f)$ (a) et $^{252}\text{Cf}(sf)$ (b).

simuler une fission à plus haute énergie et permet de repérer les distributions de rendements de fission asymétrique ayant des pics hauts et étroits comme celle de la réaction $^{235}\text{U}(n_{th}, f)$. Les modes à trois et quatre pics disparaissent et les zones de fission symétrique s'élargissent. Il demeure deux zones de fission asymétrique, pour les noyaux très légers ($N_{CN} < 100$) et pour les noyaux tels que $140 < N_{CN} < 160$. La persistance de ces zones de fission asymétrique est due à la présence d'une forte fermeture de couche : $N_{frag} = 42$ pour la zone $N_{CN} < 100$ et $N_{frag} = 82$ pour la zone $140 < N_{CN} < 160$. Les zones à trois ou quatre pics de la figure 4.19 correspondent à des distributions de rendements de fission incomplètes ($Y_{perif} > 10\%$) et ayant peu de fragmentations (< 200).

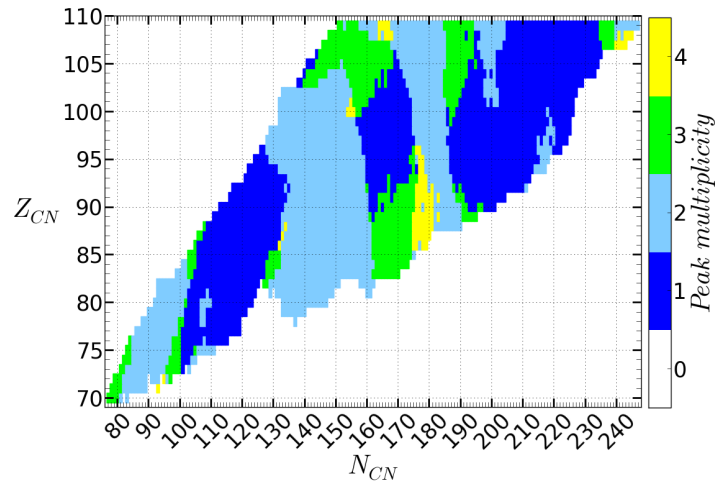


FIGURE 4.17 – Nombre de pics dans les distributions de rendements de fission isobariques en fonction du système fissionnant pour une énergie d'excitation de 8 MeV dans le cadre de la solution de référence.

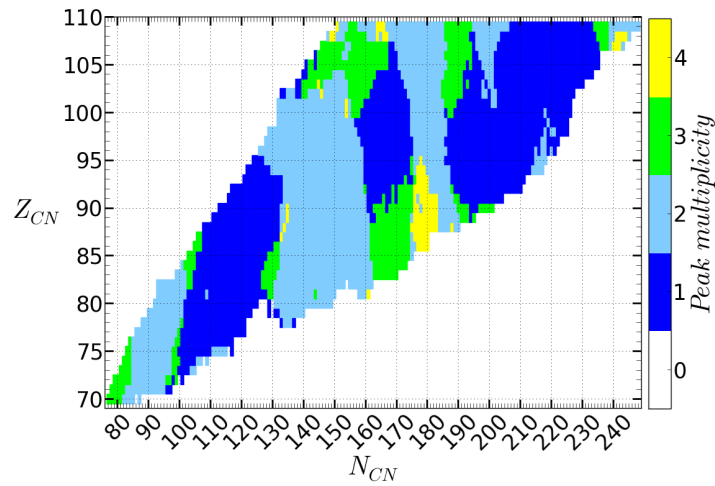


FIGURE 4.18 – Nombre de pics dans les distributions de rendements de fission isobariques en fonction du système fissionnant pour une énergie d'excitation de 8 MeV avec une description statistique canonique ($T = 1$ MeV).

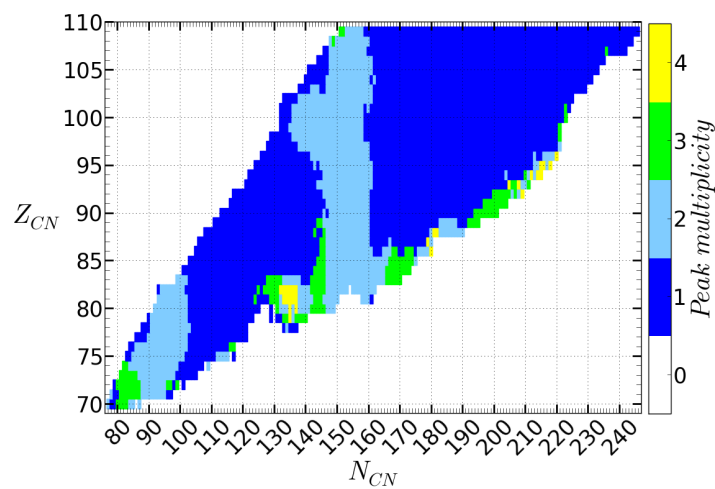


FIGURE 4.19 – Nombre de pics dans les distributions de rendements de fission isobariques en fonction du système fissionnant pour une énergie d'excitation de 8 MeV avec une description statistique canonique ($T = 5$ MeV).

4.2.2 Densité d'états type gaz de Fermi

Dans le cadre d'une description microcanonique, il faut pouvoir compter les états accessibles du système. Dans la solution de référence, une densité de type gaz de Fermi est utilisée. Dans cette section, le choix du paramètre de densité de niveaux sera étudié. D'après le modèle du gaz de Fermi, qui ne prend en compte que les degrés de libertés intrinsèques du noyau, le paramètre de densité de niveaux vaut $a = A_{\text{frag}}/13$ (annexe B), où A est le nombre de nucléons du noyau. Cependant dans une volonté de prendre en compte de manière effective les degrés de liberté collectifs du noyau, ce paramètre a été remplacé par $a = A_{\text{frag}}/8$. En effet dans le modèle SPY tous les états sont supposés être accessibles, que ce soit les états intrinsèque ou les états collectifs. Il existe aussi d'autres lois pour le paramètre de densité de niveaux, notamment la loi proposé par Koning *et al* [42] :

$$a = f(A_{\text{frag}}) = \alpha A_{\text{frag}} + \beta A_{\text{frag}}^{2/3} \quad (4.6)$$

Quelle que soit la loi choisie, elle ne prend pas en compte l'évolution des effets de couches avec la déformation ou l'existence de fermeture de couche dans les fragments.

L'impact du paramètre de densité de niveaux sur les rendements de fission des réactions $^{235}\text{U}(n_{\text{th}}, f)$ et $^{252}\text{Cf}(sf)$ est visible sur la figure 4.20. Il n'y a pas de différence entre la loi en $A/8$ et la loi définie par l'équation 4.6, mais il y en a une entre la loi en $A/8$ et celle en $A/13$. Cependant la structure des distributions de rendements de fission est la même, la largeur des pics est aussi sensiblement identique. La loi en $A/13$ réduit la sensibilité des rendements aux variations de l'énergie disponible par rapport à la loi en $A/8$. Les distributions des rendements de fission sont donc légèrement moins structurées lorsque la loi en $A/13$ est utilisée, d'où un rapport pic/vallée moins important. Les systématiques du mode de fission obtenues avec $a = A/8$ (Fig. 4.21) et $a = A/13$ (Fig. 4.22) sont très similaires. Les petites différences sont dues au léger lissage de la distribution des rendements de fission lors du passage de $A/8$ à $A/13$. Le passage d'une fission asymétrique à une fission symétrique, par exemple dans la zone autour de $N_{\text{CN}} = 108$ et $Z_{\text{CN}} = 80$, est dû à un faible rapport pic/vallée initial.

Le choix entre la loi en $A/8$ et celle en $A/13$ pour le paramètre de densité de niveaux a peu d'impact sur les prévisions du modèle, seul le rapport pic/vallée est modifié de quelques pourcents par ce choix.

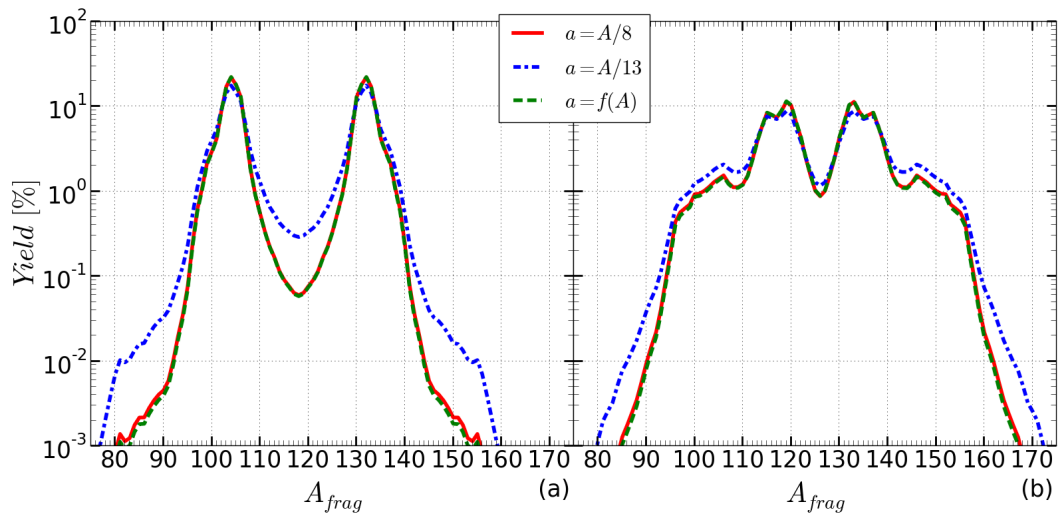


FIGURE 4.20 – Rendements isobariques en fonction du paramètre de densité de niveaux pour la réaction $^{235}\text{U}(n_{th}, f)$ (a) et $^{252}\text{Cf}(sf)$ (b).

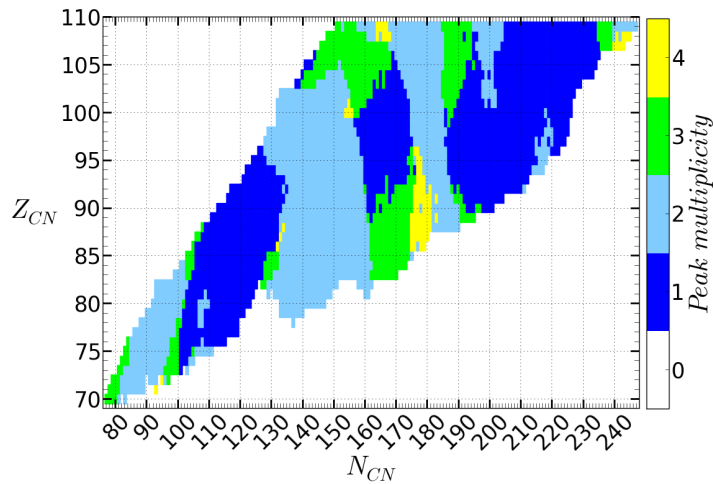


FIGURE 4.21 – Nombre de pics dans les distributions de rendements de fission isobariques en fonction du système fissionnant pour une énergie d'excitation de 8 MeV avec le paramètre densité de niveaux $a = A/8$ (solution de référence).

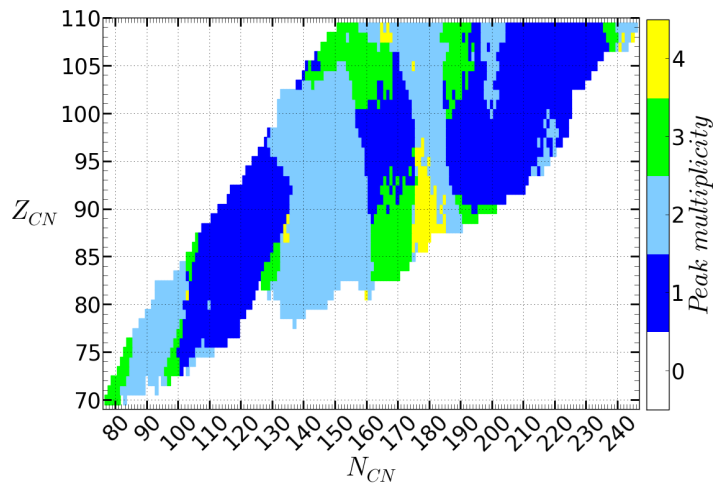


FIGURE 4.22 – Nombre de pics dans les distributions de rendements de fission isobariques en fonction du système fissionnant pour une énergie d'excitation de 8 MeV avec le paramètre densité de niveaux $a = A/13$.

4.2.3 Densité d'états microscopiques

La densité d'états de type gaz de Fermi (noté ρ_{FG}), utilisée jusqu'à présent, ne prend pas en compte la structure nucléaire spécifique à chaque noyau, d'où l'absence de dépendance avec la déformation, visible à la figure 4.23 (a) pour le $^{132}_{50}\text{Sn}_{82}$. Or la structure nucléaire du noyau évolue avec la déformation, une fermeture de couche peut apparaître ou disparaître ce qui entraîne des variations de la densité d'états.

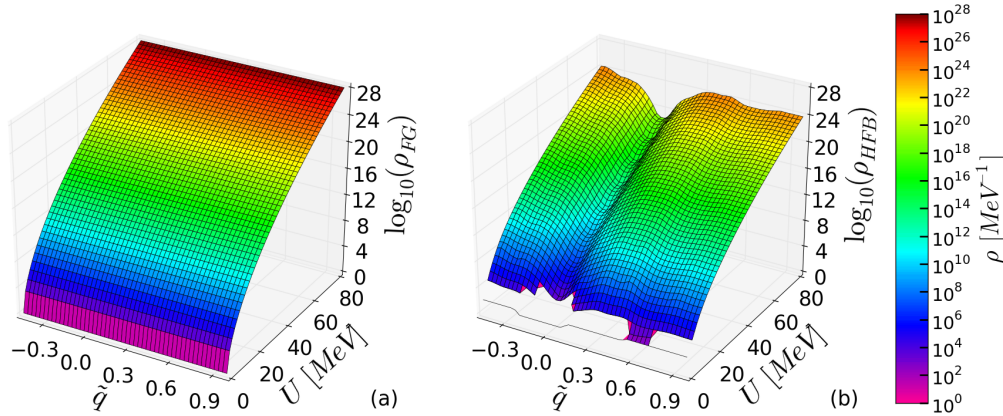


FIGURE 4.23 – Densité d'états du $^{132}_{50}\text{Sn}_{82}$ en fonction de son énergie d'excitation U et de sa déformation \tilde{q} , de type gaz de Fermi (a) (noté ρ_{FG}) ou HFB (b) (noté ρ_{HFB}).

La structure nucléaire du noyau est responsable de la présence de gaps en énergie (> 1 MeV) dans le schéma de niveau proton et/ou neutron. Ces gaps en énergie sont associés à des fermetures de couche. Dans le cas du noyau doublement magique $^{132}_{50}\text{Sn}_{82}$, il y a un gap en énergie dans le schéma de niveau proton et un autre dans le schéma de niveau neutron. Tous deux sont localisés à la déformation $\tilde{q} = 0$, comme illustré à la figure 4.24. Pour une déformation donnée, la présence d'un gap en énergie entre le dernier niveau occupé et le premier niveau vide se traduit par une chute de la densité d'états due au faible nombre d'états excités accessibles. Ainsi, la densité d'états HFB, notée ρ_{HFB} , du $^{132}_{50}\text{Sn}_{82}$ obtenue par méthode combinatoire [43] à partir du schéma de niveau proton et neutron de la figure 4.24, chute brutalement lorsque $\tilde{q} \approx 0$ (Fig. 4.23 (b)).

Ainsi une fermeture de couche a deux effets : un gain en énergie de liaison et une chute de la densité d'états. L'appariement de deux nucléons a les mêmes effets mais avec une amplitude plus faible. Il est important d'indiquer que les densités d'états HFB présentées et utilisées ici ne prennent en compte que les excitations de type particule-trou. Par contre, ces densités incluent des effets d'appariement : les noyaux pairs ont des densités plus faibles que les noyaux impairs.

Lorsque les énergies SHFB sont utilisées avec les densités d'états HFB, les rendements présentent des fluctuations très importantes qui sont anticorrélées avec l'appariement (Fig 4.25, courbes orange). Les densités incluant tous les effets de structure nucléaire (effets de couche et appariement) ne sont pas compatibles avec l'utilisation des énergies SHFB. Seule la description SPHFB est pertinente. Dans

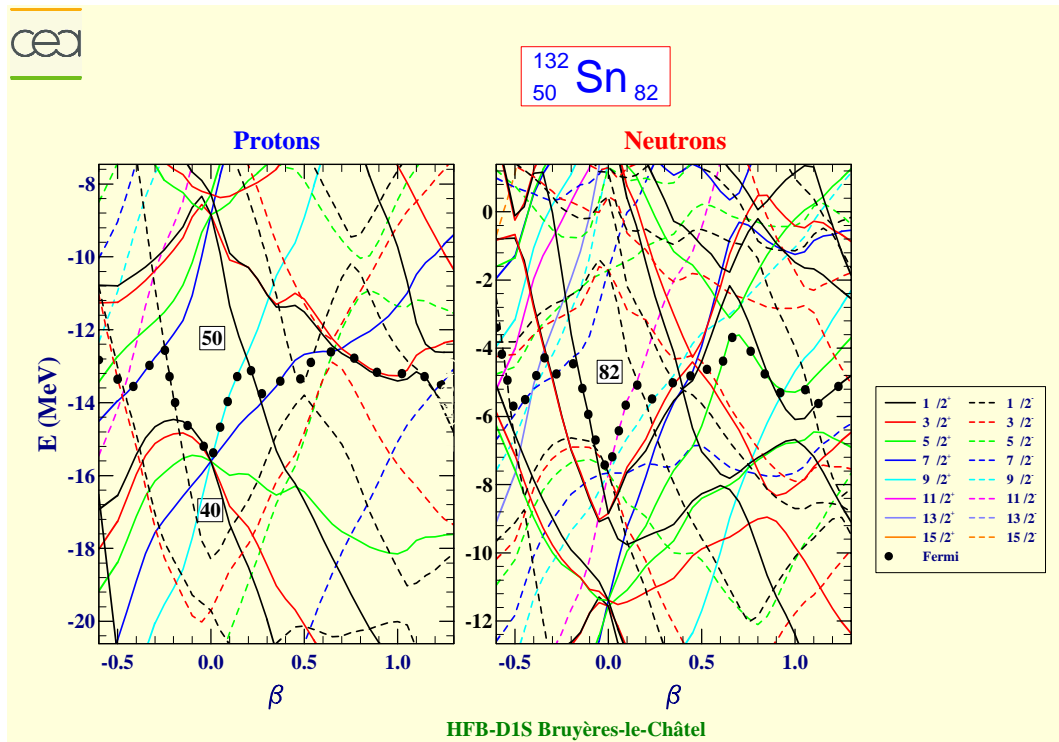


FIGURE 4.24 – Schéma de niveau proton et neutron du $^{132}_{50}\text{Sn}_{82}$ en fonction de sa déformation β issue de la base de donnée AMEDEC [13]. La ligne en pointillée représente le niveau de Fermi.

la description SPHFB, les noyaux impairs ont quelques MeV d'énergie de liaison en moins par rapport à la description SHFB. Cette différence d'énergie, due aux effets d'appariement, diminue l'énergie disponible des fragmentations mettant en jeu des fragments impair ce qui compense l'augmentation de la densité d'états. Les fluctuations d'appariement restantes, notamment celles des rendements isotoniques (Fig 4.25 (b), courbe verte) ont une pertinence physique compte tenu de la prise en compte complète des effets de structure, dans les énergies individuelles et les densités d'états.

L'introduction des densités d'états microscopiques a des conséquences assez importantes sur les rendements de fission. Dans le cas des réactions $^{235}\text{U}(n_{\text{th}}, f)$ et $^{252}\text{Cf}(sf)$ (Fig 4.26), elle a pour effet de diminuer les rendements autour de la masse 132 et de son complémentaire. Dans le cas de la réaction $^{235}\text{U}(n_{\text{th}}, f)$, un pic symétrique apparaît ainsi que deux pics asymétriques autour de la masse 100 pour le pic léger et autour de 140 pour le pic lourd. Dans le cas de la réaction $^{252}\text{Cf}(sf)$, voir figure 4.26 b, les rendements de fission isobariques sont assez bien reproduits qu'il s'agisse de la largeur ou la position des pics.

Il s'agit d'un progrès important pour les descriptions statistiques au point de scission. Les largeurs sont plus réalistes et les rendements ne subissent plus la magie de l'étain 132. Les rendements de $^{235}\text{U}(n_{\text{th}}, f)$ sont cependant loin de la réalité. Ce problème est lié au fait que l'uranium 236 se situe au niveau d'une zone de transition symétrique-asymétrique. Comme l'illustre la figure 4.29, où l'ensem-

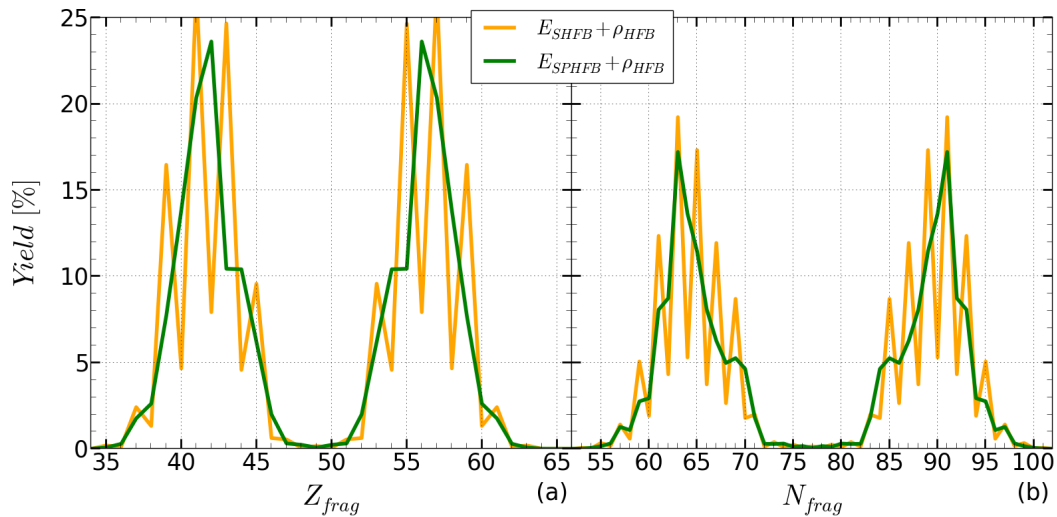


FIGURE 4.25 – Rendements isotopiques (a) et isotoniques (b) calculé avec les densités d'états HFB en fonction de la présence ou de l'absence d'effet d'appariement dans la description de l'énergie individuelle (SHFB ou SPHFB) pour la réaction $^{252}\text{Cf}(sf)$.

ble des rendements de fission des isotopes de l'uranium est représenté. Dans la zone de fission asymétrique, le pic lourd est localisé entre les masses 135 et 155 ce qui correspond bien à l'expérience.

A partir de l'uranium 230, les fragments autour de la masse 130 deviennent quasi-sphériques (Fig. 4.30). Cela résulte de l'apparition des fermetures de couche $N_{frag} = 82$, voir figure 4.34, et $Z_{frag} = 50$ (Fig. 4.32). L'apparition de ces fermetures de couche coïncide avec le début de la transition entre la fission symétrique et la fission asymétrique. De ce fait, une erreur de quelques unités de masses sur la zone de transition entre fission symétrique et asymétrique induit le désaccord flagrant observé. Dans la zone de fission asymétrique, le pic lourd de la distribution des rendements isotopiques (Fig. 4.31) est centré autour de $Z_{frag} = 53$. Expérimentalement le pic lourd de la distribution de rendement isotopique de la réaction $^{235}\text{U}(n_{th}, f)$ est centré en $Z_{frag} = 54$. Celui de la distribution de rendement isotopique, voir figure 4.33, est centré autour de $N_{frag} = 84$ pour $235 < A_{CN} < 245$ puis autour de $N_{frag} = 95$ pour $245 < A_{CN}$ ce qui est très proche du comportement réel même s'il est décalé de quelques masses.

Concernant les autres observables, la distribution du nombre de neutrons évaporés est, dans les deux réactions considérées, modérément impactée par le changement de densité d'états (Fig. 4.27). Cette distribution dépend de la répartition de l'énergie disponible entre les deux fragments. Avec les densités d'états de type gaz de Fermi, la fraction moyenne d'énergie disponible (noté x) emportée par un fragment, qui correspond à son énergie d'excitation intrinsèque moyenne $\bar{\epsilon}$, est égale au rapport entre sa masse et celle du système fissionnant : A_{frag}/A_{CN} (section 1.2.2). La relation de proportionnalité entre la fraction d'énergie disponible et la masse du fragment est clairement visible à la figure 4.28 (courbe rouge). Avec les densités d'états microscopiques, le couple de déformation $(\tilde{q}_1, \tilde{q}_2)$ ayant le plus

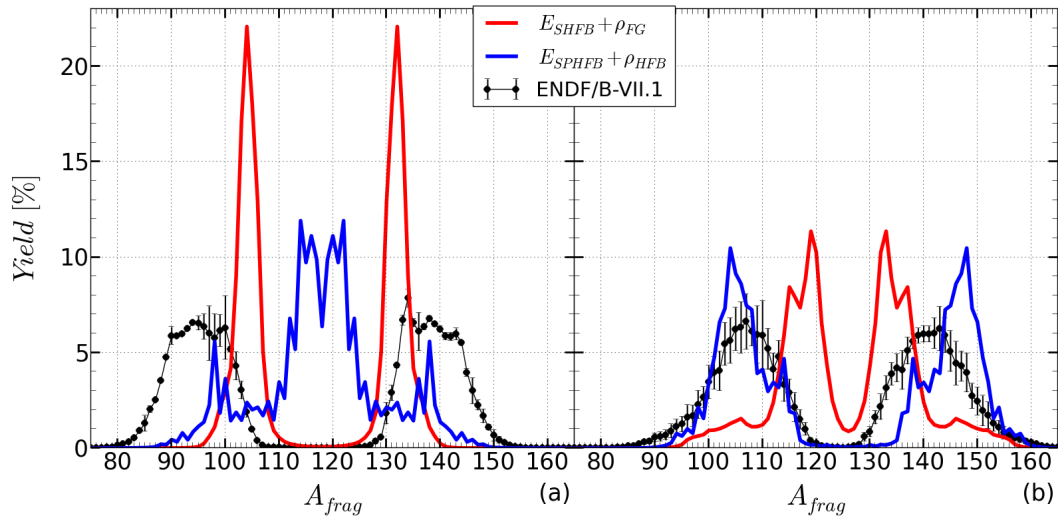


FIGURE 4.26 – Rendements isobariques en fonction de la densité d'états (FG ou HFB) et de la description de l'énergie individuelle (SHFB ou SPHFB) utilisée pour la réaction $^{235}\text{U}(n_{th}, f)$ (a) et $^{252}\text{Cf}(sf)$ (b) comparées aux données évaluées [24].

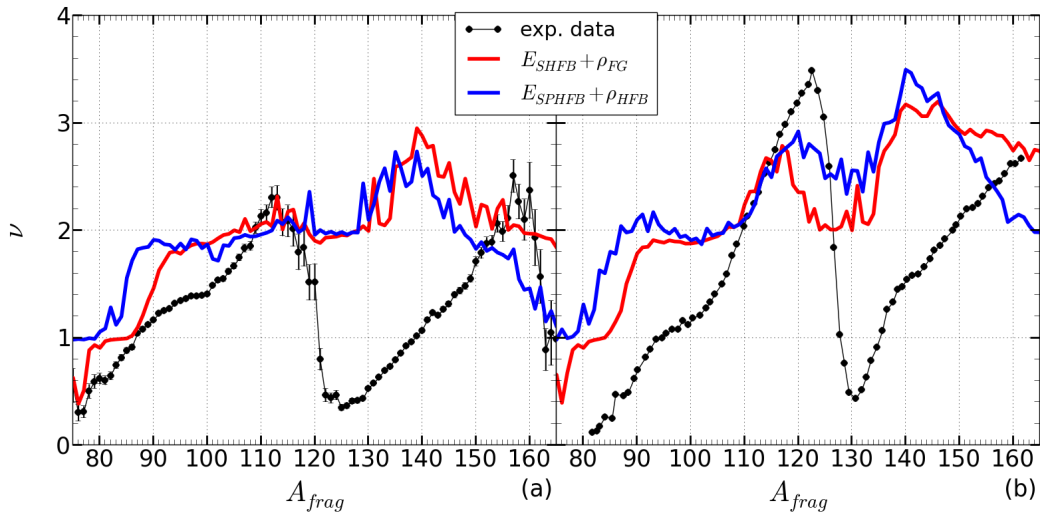


FIGURE 4.27 – Nombre de neutrons évaporés en fonction de la densité d'états (FG ou HFB) et de la description de l'énergie individuelle (SHFB ou SPHFB) utilisée pour la réaction $^{235}\text{U}(n_{th}, f)$ (a) et $^{252}\text{Cf}(sf)$ (b) comparées aux données expérimentales [28, 27].

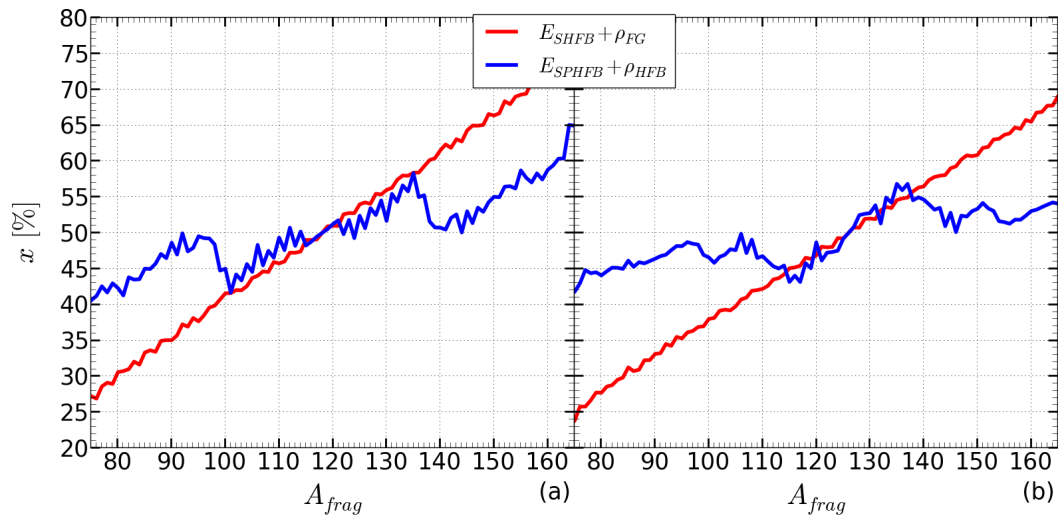


FIGURE 4.28 – Fraction moyenne de l'énergie disponible emportée par le fragment en fonction de la densité d'états (FG ou HFB) et de la description de l'énergie individuelle (SHFB ou SPHFB) utilisée pour la réaction $^{235}\text{U}(n_{th}, f)$ (a) et $^{252}\text{Cf}(sf)$ (b).

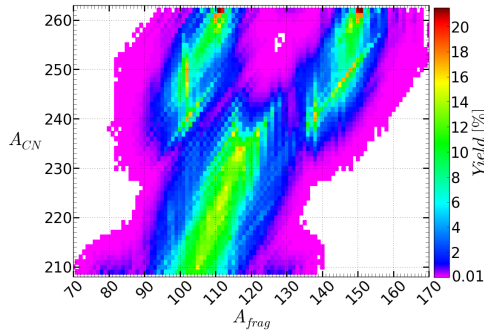


FIGURE 4.29 – Distribution des rendements isobarique pour l'ensemble des isotopes de la chaîne isotopique de l'uranium pour une énergie d'excitation de 8 MeV avec $E_{SPHFB} + \rho_{HFB}$.

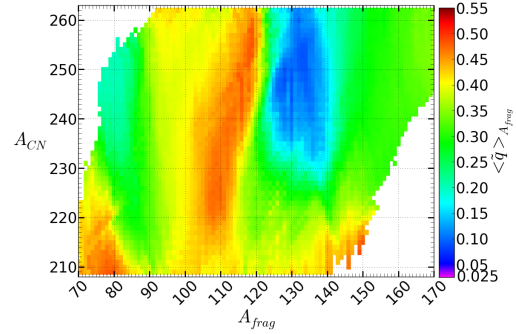


FIGURE 4.30 – Déformation moyenne des fragments en fonction du nombre de nucléons des fragments pour l'ensemble des isotopes de l'uranium avec une énergie d'excitation de 8 MeV avec $E_{SPHFB} + \rho_{HFB}$.

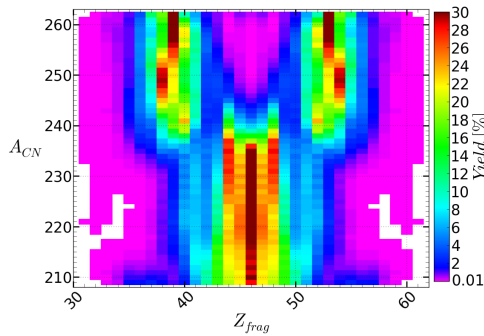


FIGURE 4.31 – Distribution des rendements isotopique pour l'ensemble des isotopes de la chaîne isotopique de l'uranium pour une énergie d'excitation de 8 MeV avec $E_{SPHFB} + \rho_{HFB}$.

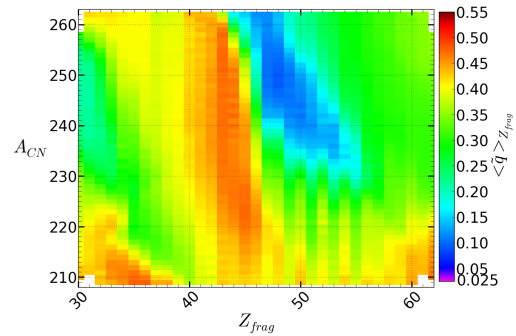


FIGURE 4.32 – Déformation moyenne des fragments en fonction du nombre de protons des fragments pour l'ensemble des isotopes de l'uranium avec une énergie d'excitation de 8 MeV avec $E_{SPHFB} + \rho_{HFB}$.

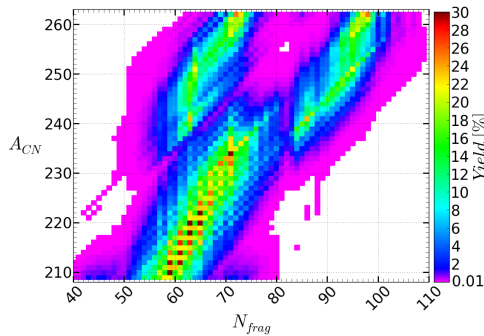


FIGURE 4.33 – Distribution des rendements isotopique pour l'ensemble des isotopes de la chaîne isotopique de l'uranium pour une énergie d'excitation de 8 MeV avec $E_{SPHFB} + \rho_{HFB}$.

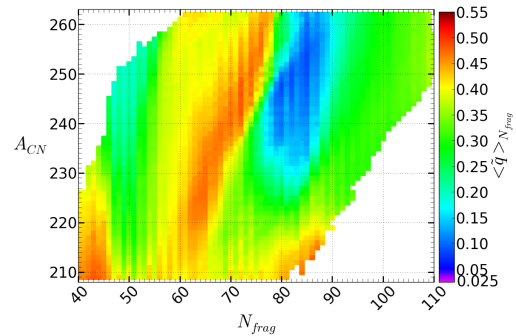


FIGURE 4.34 – Déformation moyenne des fragments en fonction du nombre de neutrons des fragments pour l'ensemble des isotopes de l'uranium avec une énergie d'excitation de 8 MeV avec $E_{SPHFB} + \rho_{HFB}$.

d'états associés n'est pas forcément celui d'énergie disponible maximale. Ainsi la déformation la plus probable sera celle qui offre le meilleur compromis entre la maximisation de l'énergie disponible et le plus grand nombre d'états.

L'introduction des densités d'états HFB constitue une amélioration notable car elle permet de prendre en compte naturellement l'appariement et de retrouver le bon ordre de grandeur pour les largeurs des pics des distributions en masse. La bonne reproduction des rendements pour la fission spontanée du californium et le bon comportement général de la fission de la chaîne isotopique des uranium indiquent qu'il est nécessaire d'utiliser ce nouveau formalisme même si le cas de la fission thermique de l'uranium ^{235}U n'est pas satisfaisant. Cela constitue une grande nouveauté : la structure nucléaire des fragments est à l'origine d'une compétition entre l'énergie disponible et le nombre d'états disponibles qui ont des comportements opposés. Les observables associées aux fragments de fission résultent de cette compétition.

Pour palier à la mauvaise reproduction des rendements de fission de la réaction $^{235}\text{U}(n_{\text{th}}, f)$, une piste envisageable est d'améliorer le calcul des densités d'états HFB qui peut impacter la transition symétrique-asymétrique qui a lieu autour des isotopes 226-232 de l'uranium (Fig. 2.12).

4.3 ETAT LE PLUS AVANCÉ DU MODÈLE

Les trois grandes avancées du modèle SPY par rapport à la solution de référence sont : l'introduction des densités de charge des fragments pour calculer l'énergie d'interaction coulombienne, la redéfinition du point de scission à partir de la densité de charge au col et l'introduction des densités d'états HFB. Ces trois avancées sont basées sur des calculs microscopiques et donnent des résultats très prometteurs. Jusqu'à présent, l'impact de l'utilisation des densités de charges issus des calculs HFB avec la redéfinition de la scission et l'introduction des densités d'états HFB ont été étudiés séparément.

Elles sont maintenant toutes introduites pour évaluer la fraction d'énergie disponible moyenne, les rendements, l'énergie cinétique et la distribution du nombre de neutrons évaporés par les fragments dans la version la plus aboutie du modèle SPY. L'étude est restreinte aux réactions $^{235}\text{U}(n_{\text{th}}, f)$ et $^{252}\text{Cf}(sf)$. Ces différentes parties du modèle sont encore en développement. Elles représentent cependant l'état de l'art des résultats et améliorations obtenus au cours de cette thèse.

4.3.1 Fraction d'énergie disponible moyenne

La fraction d'énergie disponible emportée par les fragments (Fig. 4.35) dépend, *a priori*, uniquement de la densité d'états. En fait, elle est également impactée par la topologie des surfaces en énergie disponible, donc par l'énergie coulombienne et par l'énergie individuelle des fragments. Dans les deux réactions considérées, la fermeture de couche $N_{\text{frag}} = 82$ est visible en particulier pour la réaction $^{235}\text{U}(n_{\text{th}}, f)$. Elle a pour effet de favoriser le fragment léger, qui ne présente pas de fermeture de couche, lors du partage en énergie disponible. Dans le cas de

la réaction $^{235}\text{U}(n_{\text{th}}, f)$ la fraction d'énergie disponible emportée par le fragment léger ($A_{\text{frag}} = 104$) passe de 44%, dans le cas d'une répartition proportionnelle à la masse du fragment, à 65% lorsque la structure nucléaire est prise en compte dans les densités d'états. Ainsi la combinaison des trois avancées fait apparaître des effets de structure nucléaire dans la fraction en énergie disponible jamais observé jusqu'ici. Ces effets permettent de favoriser le fragment léger lors du partage en énergie disponible, par conséquent de diminuer le surplus d'énergie d'excitation totale des fragments et finalement de réduire l'excès de neutrons évaporés par les fragments lourds ; la célèbre "dent de scie" apparaît davantage.

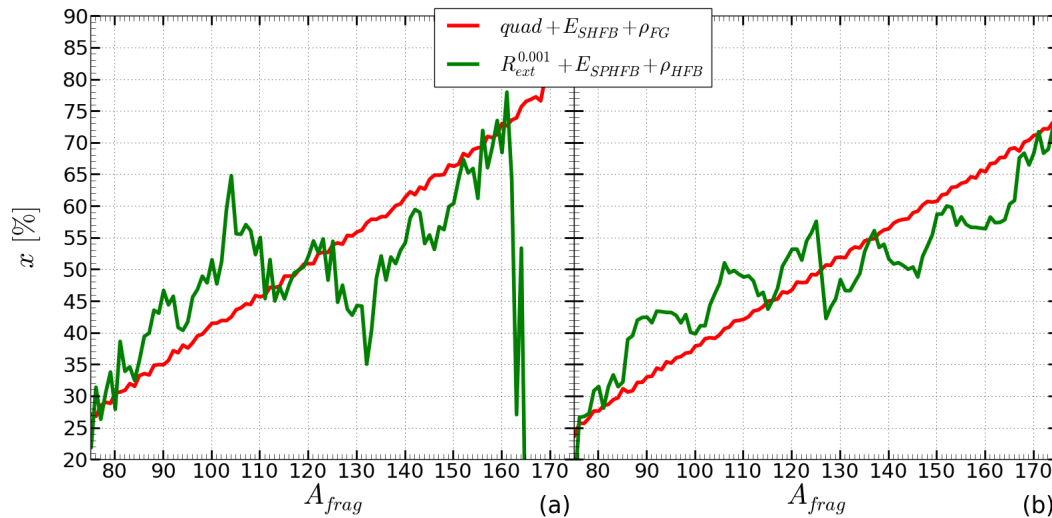


FIGURE 4.35 – Fraction de l'énergie disponible emportée par le fragment calculées avec la solution de référence ($quad + E_{SHFB} + \rho_{FG}$) et avec l'état le plus avancé du modèle ($R_{ext}^{0.001} + E_{SPHFB} + \rho_{HFB}$) pour la réaction $^{235}\text{U}(n_{\text{th}}, f)$ (a) et $^{252}\text{Cf}(sf)$ (b).

4.3.2 Rendements de fission

Les rendements de fission (Fig. 4.36) sont autant impactés par la manière de calculer l'énergie coulombienne que par la description des densités d'états. Ainsi la distribution des rendements de fission de la réaction $^{235}\text{U}(n_{\text{th}}, f)$ présente un pic symétrique dû aux densités d'états HFB. L'utilisation des densités de charge HFB permet de réduire la largeur de ce pic. Les deux pics asymétriques en $A_{\text{frag}} = 90$ et $A_{\text{frag}} = 145$ sont dus à l'utilisation des densités de charge HFB. Les rendements de fission de la réaction $^{252}\text{Cf}(sf)$ sont plus proches de ceux calculés en utilisant la solution de référence pour le calcul de l'énergie coulombienne et les densités d'états HFB. Ils se rapprochent des résultats expérimentaux.

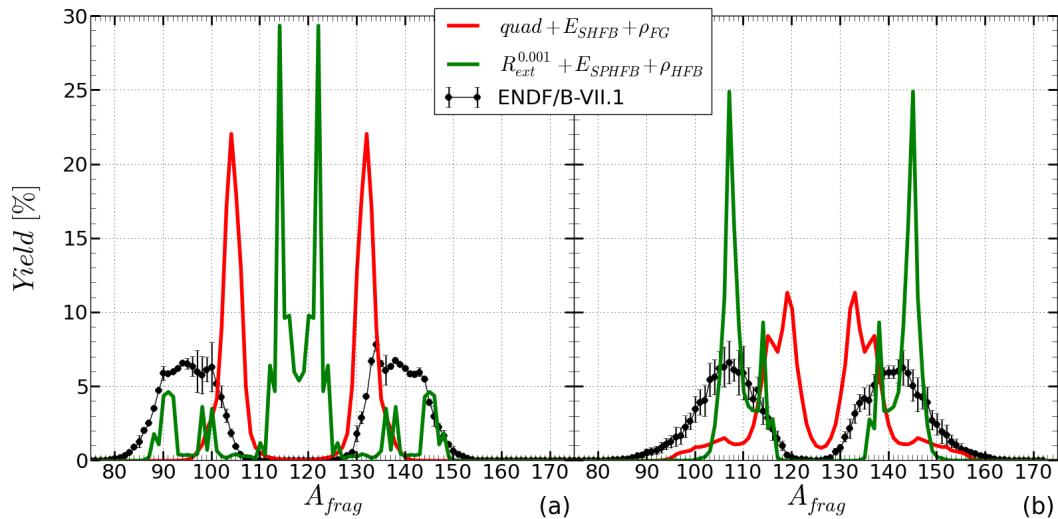


FIGURE 4.36 – Rendements isobariques calculés avec la solution de référence ($quad + E_{SHFB} + \rho_{FG}$) et avec l'état le plus avancé du modèle ($R_{ext}^{0.001} + E_{SPHFB} + \rho_{HFB}$) comparés avec les données évaluées [24] pour la réaction $^{235}\text{U}(n_{th}, f)$ (a) et $^{252}\text{Cf}(sf)$ (b).

4.3.3 Distribution en énergie cinétique

Les distributions en énergie cinétique des fragments (Fig. 4.37) ne sont pas impactées de manière significative par le changement de densité d'états puisque les KE dépendent essentiellement de l'énergie d'interaction coulombienne. Ils sont donc très proches de ceux calculés avec les densités d'états type gaz de Fermi et les densités de charge HFB.

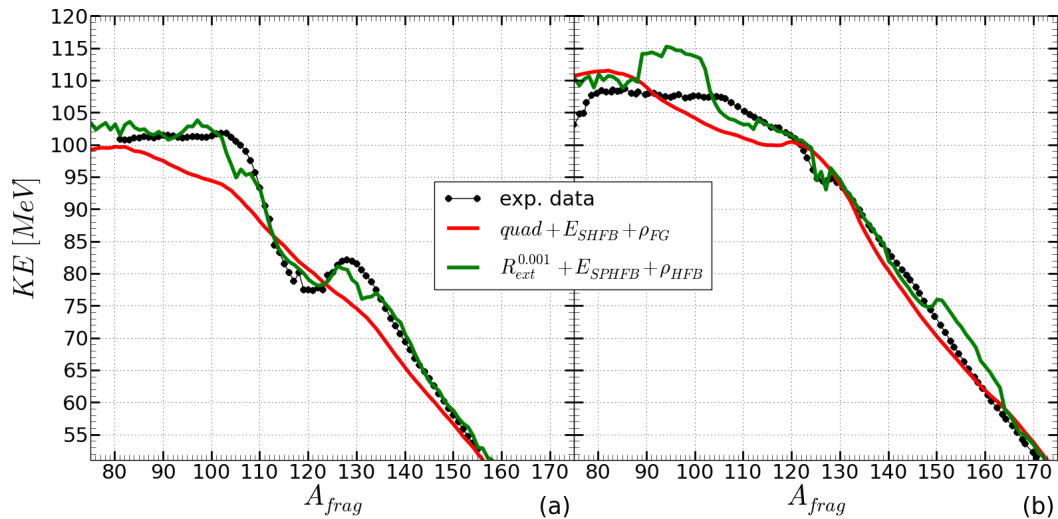


FIGURE 4.37 – Distributions en énergie cinétique calculées avec la solution de référence ($quad + E_{SHFB} + \rho_{FG}$) et avec l'état le plus avancé du modèle ($R_{ext}^{0.001} + E_{SPHFB} + \rho_{HFB}$) comparées avec les données expérimentales [26, 27] pour la réaction $^{235}\text{U}(n_{th}, f)$ (a) et $^{252}\text{Cf}(sf)$ (b).

4.3.4 Distributions du nombre de neutrons évaporés

Les distributions du nombre de neutrons évaporés par les fragments (Fig. 4.38) sont relativement proches de celles calculées avec les densités d'états type gaz de Fermi et les densités de charge HFB mais altérées par modification de la fraction d'énergie disponible (Fig. 4.35). En effet le nombre de neutrons évaporés dépend de l'énergie d'excitation totale des fragments qui dépend de l'énergie de déformation et de l'énergie d'excitation intrinsèque. L'énergie d'excitation intrinsèque dépend, d'une part, de l'énergie disponible et, d'autre part, de la fraction de l'énergie disponible emportée par les fragments, impacté par le changement de densité d'états.

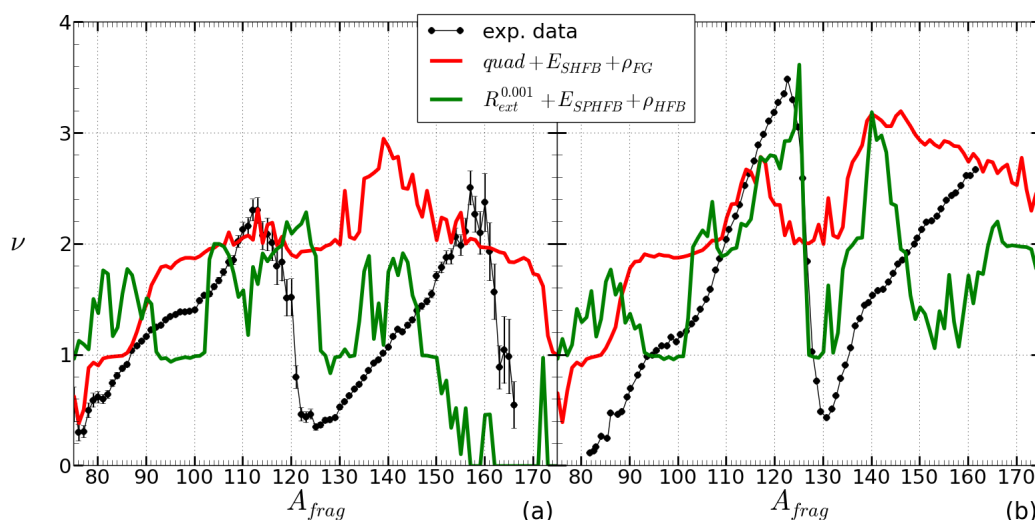


FIGURE 4.38 – Nombre de neutrons évaporés calculé avec la solution de référence ($quad + E_{SHFB} + \rho_{FG}$) et avec l'état le plus avancé du modèle ($R_{ext}^{0.001} + E_{SPHFB} + \rho_{HFB}$) comparé avec les données expérimentales [28, 27] pour la réaction $^{235}\text{U}(n_{th}, f)$ (a) et $^{252}\text{Cf}(sf)$ (b).

4.3.5 Synthèse des avancées du modèle SPY

Le recours à la description microscopique du noyau pour obtenir son énergie individuelle, sa densité de charge et sa densité d'états a permis une amélioration des prédictions en particulier les distributions en énergie cinétique et la distribution du nombre de neutrons évaporés. Les rendements de fission ont également été améliorés puisque la domination du ^{132}Sn a été considérablement réduite. Bien que des écarts entre les prédictions et les données expérimentales subsistent, ces avancées s'avèrent prometteuses.

Conclusion générale



Le modèle SPY permet de calculer les observables associées aux fragments de fission telles que les rendements de fission, la distribution en énergie cinétique des fragments ou leur nombre de neutrons évaporés. Il fait le lien entre les observables et les grandeurs telles que la déformation moyenne, l'énergie de déformation ou encore les fermetures de couche ce qui permet une meilleure compréhension du processus. Ce modèle adopte le même paradigme et le même objectif que le modèle de Wilkins *et al* : apporter des éléments de réponses concernant l'impact de la structure nucléaire des fragments sur les observables de la fission à l'aide d'une modélisation uniquement basée sur les caractéristiques des fragments de fission.

Le modèle SPY est un modèle statique statistique de point de scission. Il se base sur une description du système fissionnant à la scission pour déterminer les rendements de fission ainsi que les autres propriétés extrinsèques des fragments de fission. La formation du système fissionnant ainsi que son évolution depuis le point selle jusqu'au point de scission sont supposées n'avoir aucun impact sur les observables associées aux fragments. Au point de scission, les fragments sont isolés l'un et l'autre : il n'y a plus aucun échange de nucléons ou d'énergie entre eux. Les fragments sont statiques par hypothèse, c'est à dire qu'ils sont immobiles dans le repère du centre de masse du système fissionnant, ainsi l'énergie de préscission est nulle. Le seul paramètre existant dans le modèle est le critère de scission qui définit la position relative des deux fragments.

Un équilibre thermodynamique est supposé s'être établi au point de scission autorisant une description statistique de la fission. La probabilité d'une configuration du système à la scission est obtenue par un dénombrement des états disponibles associés à cette configuration. Ces états sont les états énergétiquement accessibles, déterminés grâce à un bilan absolu en énergie à la scission. En effet, par hypothèse, l'énergie disponible à la scission est entièrement sous forme d'énergie d'excitation intrinsèque au sein des fragments. La densité d'états du système à la scission est le produit des densités d'états des fragments puisque les fragments sont isolés l'un de l'autre. Ce bilan en énergie dépend de l'énergie individuelle des fragments, de leur d'énergie d'interaction et de l'énergie d'excitation du système fissionnant. Le modèle se base donc sur trois ingrédients. Les deux premiers sont l'énergie individuelle et la distribution de charge des fragments pour le bilan en énergie. Il faut, de plus, avoir la densité d'états des fragments pour le calcul du

nombre d'états accessibles, associé à une configuration.

Une version de référence a été développée. Dans cette version, les énergies individuelles sont issues de la base de données *AMEDEE* et les densités d'états sont de type gaz de Fermi. Une configuration de scission est caractérisée par deux fragments à symétrie axiale de forme quadrupolaire et à bords francs. Ils sont coaxiaux et séparés d'une distance intersurface de 5 fm.

Parmi les divers résultats présentés, certains sont notables. Tout d'abord les rendements de fission des actinides prédits par le modèle SPY sont dominés par l'étain 132 à cause de sa double fermeture de couche sphérique. L'écart à l'hypothèse UCD, observé expérimentalement, est reproduit par le modèle SPY. Ainsi cet écart peut être interprété à partir de considérations énergétiques. Bien qu'il y ait des écarts entre les rendements prédits par le modèle SPY et les données expérimentales, la transition entre la fission symétrique et la fission asymétrique est assez bien reproduite dans la région des actinides légers. Il a été montré que l'évaporation de neutrons par les fragments n'est pas liée à la valeur du paramètre de déformation bien qu'il y ait une corrélation trompeuse entre la déformation moyenne d'un fragment et son nombre de neutrons évaporés. Cette évaporation est due à l'énergie d'excitation totale des fragments, c'est à dire à la somme de leur énergie de déformation et de leur énergie d'excitation intrinsèque. Selon le modèle SPY, le caractère symétrique ou asymétrique de la fission est essentiellement déterminé par le nombre de neutrons du système fissionnant. Cela fut remarqué par Wilkins sans pour autant en apporter une preuve quantitative tangible. Le lien entre l'évolution de l'énergie cinétique totale moyenne et la déformation moyenne en fonction du système fissionnant a été mis en évidence. L'étude des rendements isotoniques permet d'identifier les fermetures de couche déformées ou sphériques à l'origine du mode de fission (symétrique, asymétrique, à trois ou quatre pics) telle que la couche déformée $N=72$. L'accord global entre les prédictions du modèle SPY et les données expérimentales montre qu'un modèle de point de scission est en mesure de faire des prédictions valables sans faire appel à des effets liés à la dynamique de la fission. Ainsi le modèle SPY est en mesure d'effectuer des prédictions sur l'ensemble des noyaux liés et fissionnables avec un degré de fiabilité constant. Cela autorise l'utilisation des données fournies par le modèle SPY pour des applications en astrophysique où la fission de noyaux très riches en neutrons entre en jeu. Elles ont notamment été utilisées pour le calcul de l'abondance des éléments lourds dans le système solaire produits lors de la collision d'étoiles à neutrons.

Une étude de sensibilité vis à vis de la distance intersurface a montré qu'elle avait un faible impact sur les rendements de fission et que les formes quadrupolaires constituaient une meilleure approximation des distributions de charge microscopiques que les formes ellipsoïdales. En plus de cette version de référence, plusieurs pistes ont été explorées.

La première est une remise en cause de l'hypothèse d'une répartition uniforme de la charge au sein d'un noyau. A l'aide des distributions de protons issues des calculs HFB, il a été possible de s'affranchir de l'hypothèse restrictive d'une répar-

tition uniforme et d'améliorer les distributions en énergie cinétique prédites par le modèle SPY, en utilisant les distributions de charge microscopiques. Il a aussi été possible de redéfinir la scission à partir de la densité de charge au niveau du col entre les deux fragments. Cette nouvelle définition de la scission est légitimée par le fait que la répulsion coulombienne est le moteur de l'évolution du système depuis le point selle jusqu'au point de scission. Cela a permis d'améliorer les distributions en énergie cinétique mais également les distributions du nombre de neutrons évaporés où la structure en "dent de scie" apparaît clairement, même si des écarts subsistent par rapport aux données expérimentales. La structure fine (plateau et creux) de la distribution en énergie cinétique, dans le cas de la fission thermique de l'uranium 235, est due à des effets non triviaux liés à la déformation des fragments et à leur structure microscopique.

Une étude de sensibilité vis à vis des énergies individuelles a également été menée. Il a été montré qu'une description simple des fragments, où l'énergie individuelle de ces derniers est modélisée par une goutte liquide recalée sur la masse expérimentale, permet de reproduire dans une certaine mesure la transition symétrique-asymétrique des actinides. Malgré ce bon résultat, elle est insuffisante pour comprendre les structures des distributions en énergie cinétique ou des neutrons évaporés. Il faut utiliser les énergies individuelles issues de calculs microscopiques afin d'obtenir une meilleure description des propriétés extrinsèques des fragments telles que la déformation moyenne. D'autres études ont prouvées la robustesse du modèle vis à vis de la table de masse utilisée pour recalibrer des énergies individuelles et vis à vis de l'interaction nucléon-nucléon utilisée dans les calculs HFB.

Une étude comparative avec une description canonique a mis en évidence une similitude entre une description microcanonique, où la densité type gaz de Fermi est utilisée, et une description canonique avec une température de 1 MeV. Une autre étude a montré que le choix du paramètre de densité de niveaux en $A/8$ ou en $A/13$ avait un impact négligeable sur les observables.

Finalement, la description de la densité d'états d'un noyau a été enrichie en utilisant des densités d'états microscopiques issues des calculs HFB qui inclut des informations sur la structure nucléaire de chaque noyau. Grâce à ces densités d'états, il n'est plus nécessaire de supprimer l'appariement dans les énergies individuelles puisqu'il y a un effet de compensation entre l'énergie et le nombre d'états disponibles. L'emploi de ces densités a pour effet de réduire significativement l'impact de l'étain 132 sur les rendements de fission. Cela permet d'améliorer la prédiction des rendements de fission du californium 252, mais provoque l'apparition d'un pic symétrique dans celle de la fission thermique de l'uranium 235. Ce défaut est lié au fait que l'uranium 235 se situe dans une zone de transition symétrique/asymétrique. Ainsi une variation de quelques masses du système fissionnant le fait passer d'une fission symétrique à une fission asymétrique.

Une combinaison de toutes les avancées réalisées dans ce travail de thèse permet d'obtenir des résultats très prometteurs. Cette combinaison fait notamment apparaître une dépendance de la fraction d'énergie disponible emportée par les

fragments en fonction de leur structure nucléaire qui est indispensable pour reproduire le nombre moyen de neutrons évaporés.

Ces résultats incitent à poursuivre le développement du modèle SPY, en particulier la description microscopique des fragments. Cela inclut, d'une part, la densité d'états où une réflexion doit être menée sur la prise en compte des états collectifs. Et d'autre part, cela inclut la distribution de charge où des problèmes liés à la variation des rayons effectifs avec la déformation impactent le calcul de la distribution en énergie cinétique. A plus long terme il est possible d'envisager l'extension du domaine d'applicabilité du modèle en prenant en compte la fission à haute énergie et/ou le moment cinétique des fragments.

Compléments sur l'interaction coulombienne

A

A.1 ELLIPSOÏDE : LIEN ENTRE DÉFORMATION & GÉOMÉTRIE

Le lien entre la déformation paramétrée par \tilde{q} et la géométrie d'un ellipsoïde de révolution, caractérisée par ses demi-axes c et a , est effectué grâce à son moment quadrupolaire définie par :

$$q_{20} = \frac{2}{5} (c^2 - a^2) A \quad (\text{A.1})$$

Les demi-axes a et c sont interdépendants car le volume du noyau est conservé quelle que soit sa déformation : $V_{\text{ell}} = \frac{4}{3}\pi a^2 c = \frac{4}{3}\pi R_0^3$. Ils sont donc réductibles à un seul paramètre noté E qui peut être défini par $E = \frac{c^2 - a^2}{c^2}$. Dans le cas allongé, ce paramètre correspond au carré de l'excentricité de l'ellipsoïde. Cependant cette définition n'est pas satisfaisante car dans le cas aplati, $-\infty < E < 0$ alors que dans le cas allongé $0 < E < 1$. La pseudo excentricité, aussi notée E , lui est préférée. Elle est définie par l'équation A.3. La conservation du volume définit une relation entre les demi-axes et la masse du noyau : $a^2 c = R_0^3$, permettant de faire le lien entre la pseudo excentricité du noyau et ses demi-axes (éq. A.4, A.5). La définition du moment quadrupolaire (éq. A.1) permet d'obtenir la relation entre le paramètre de déformation \tilde{q} et la pseudo excentricité E (éq. A.6). La résolution de l'équation A.7, déduite de l'équation A.6, détermine E en fonction de la déformation \tilde{q} . L'équation A.7, cas aplati, est résolue en utilisant la méthode de Cadran. Le discriminant $\Delta = 4(-\alpha)^3 + 27(-\alpha)^2$ est positif car $\tilde{q} < 0$ donc l'équation admet une unique solution réelle :

$$E = \left(\frac{\alpha + \sqrt{\frac{\Delta}{27}}}{2} \right)^{1/3} + \left(\frac{\alpha - \sqrt{\frac{\Delta}{27}}}{2} \right)^{1/3} \quad (\text{A.2})$$

Ellipsoïde aplati : $q_{20} < 0$	Ellipsoïde allongé : $q_{20} > 0$	
$E = \frac{c^2 - a^2}{a^2}$	$E = \frac{c^2 - a^2}{c^2}$	(A.3)
$c = R_0(1 + E)^{1/3}$	$c = R_0(1 - E)^{-1/3}$	(A.4)
$a = R_0(1 + E)^{-1/6}$	$a = R_0(1 - E)^{1/6}$	(A.5)
$\alpha^{1/3} = \frac{5}{2}\tilde{q} = \frac{E}{(1 + E)^{1/3}}$	$\alpha^{1/3} = \frac{5}{2}\tilde{q} = \frac{E}{(1 - E)^{2/3}}$	(A.6)
$0 = E^3 - \alpha E - \alpha$	$0 = E^3 - \alpha E^2 + 2\alpha E - \alpha$	(A.7)

L'équation A.7, cas allongé, est résolue de la même façon, moyennant la transformation suivante : $E = X + \frac{\alpha}{3}$ pour supprimer le terme en E^2 afin d'appliquer la méthode de Cadran, le discriminant est donné par l'équation A.8. Quel que soit le signe du discriminant, la solution de l'équation A.7, cas allongé, retenue est toujours inférieure à 1 par définition comme illustré à la figure A.1.

$$\Delta = 4 \left(-\frac{\alpha^2}{3} + 2\alpha \right)^3 + 27 \left(-\frac{2}{27}\alpha^3 + \frac{18}{27}\alpha^2 - \alpha \right)^2 \quad (\text{A.8})$$

$$\Delta = 4p^3 + 27q^2 \quad (\text{A.9})$$

$$\begin{aligned} \Delta > 0 & \left\| \begin{aligned} E &= \left(\frac{-q + \sqrt{\frac{\Delta}{27}}}{2} \right)^{1/3} + \left(\frac{-q - \sqrt{\frac{\Delta}{27}}}{2} \right)^{1/3} \\ \Delta = 0 & \left\| \begin{aligned} E &= \frac{3q}{p} \text{ ou } E = -\frac{3q}{p} \\ \Delta < 0 & \left\| E = 2\sqrt{\frac{-p}{3}} \cos \left(\frac{1}{3} \arccos \left(\frac{-q}{2} \sqrt{\frac{27}{-p^3}} \right) + \frac{2k\pi}{3} \right), k = 0, 1, 2 \end{aligned} \right. \end{aligned} \right. \end{aligned}$$

TABLE A.1 – Solutions de l'équation A.7, cas allongé. Les variables Δ , p et q sont définis via les équations A.8 et A.9.

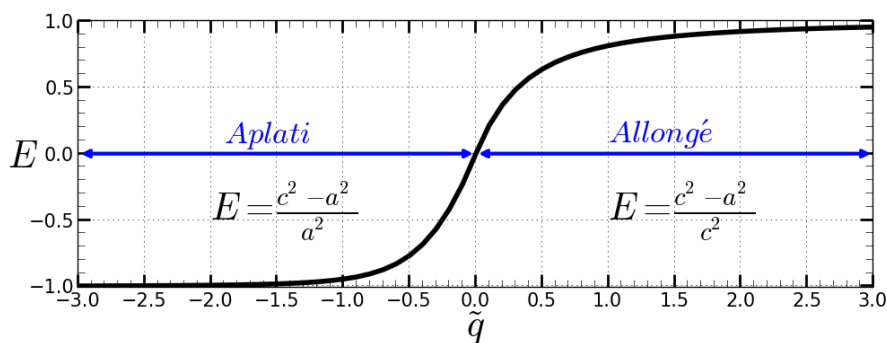


FIGURE A.1 – Lien entre \tilde{q} et E .

A.2 QUADRUPOLE : LIEN ENTRE DÉFORMATION & GÉOMÉTRIE

Toute surface peut être décomposée à l'aide des harmoniques sphériques $Y_{nm}(\theta, \varphi)$:

$$R(\theta, \varphi, \{\alpha_{nm}\}) = R_0 \lambda(\{\alpha_{nm}\})^{-1} \left(1 + \sum_{n=1}^N \sum_{m=0}^n \alpha_{nm} Y_{nm}(\theta, \varphi) \right) \quad (\text{A.10})$$

Les coefficients α_{nm} sont les poids des différentes composantes : quadrupolaire, octupolaire ...

Lorsque qu'une surface présente une symétrie de révolution alors les coefficients α_{nm} , avec $m \neq 0$, sont nuls. Cela revient à décomposer la surface sur les polynômes de Legendre : P_n , avec $Y_{n0}(\theta) = \sqrt{\frac{2n+1}{4\pi}} P_n(\cos(\theta))$. Dans la base des polynômes de Legendre, les coefficients α_n correspondent aux poids des différentes composantes. Ils sont liés aux précédents coefficients par : $\alpha_{n0} = \alpha_n \sqrt{\frac{4\pi}{2n+1}}$. Une surface de révolution est donc paramétrée par :

$$R(\theta, \{\alpha_n\}) = R_0 \lambda(\{\alpha_n\})^{-1} \left(1 + \sum_{n=1}^N \alpha_n P_n(\cos(\theta)) \right) \quad (\text{A.11})$$

Dans le cas d'une surface de révolution purement quadrupolaire où tous les coefficients α_n sont nuls sauf α_2 , la surface est paramétrée par :

$$R(\theta, \alpha_2) = R_0 C(\alpha_2)^{-1/3} \left(1 + \alpha_2 \frac{3 \cos^2(\theta) - 1}{2} \right) \quad (\text{A.12})$$

en sachant que $P_2(\cos(\theta)) = \frac{3 \cos^2(\theta) - 1}{2}$. Le coefficient $C(\alpha_2)$ assure la conservation du volume quelle que soit la déformation :

$$C(\alpha_2) = 1 + \frac{3}{5} \alpha_2^2 + \frac{2}{35} \alpha_2^3 \quad (\text{A.13})$$

Le lien entre la déformation paramétrée par \tilde{q} et la géométrie d'un quadrupole, caractérisée par sa déformation α_2 , est effectué grâce au moment quadrupolaire de celle-ci, définie par :

$$q_{20} = 2 \int r^2(\theta, \varphi) P_2(\cos(\theta)) \rho_\pi(\vec{r}) d\vec{r} \quad (\text{A.14})$$

Le passage de \tilde{q} vers α_2 ou α_{20} se fait via la relation :

$$\tilde{q} = \frac{q_{20}}{AR_0^2} = \frac{6}{5} C^{-5/3}(\alpha_2) \left(\alpha_2 + \frac{4}{7} \alpha_2^2 + \frac{6}{7} \alpha_2^3 + \frac{20}{77} \alpha_2^4 + \frac{53}{1001} \alpha_2^5 \right) \quad (\text{A.15})$$

Cette équation est obtenue en injectant l'équation A.12 dans l'équation A.14 en sachant que $\int \rho_{mat}(\vec{r}) \bullet d\vec{r}$ est équivalent à $\frac{3A}{4\pi R_0^3} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^{r(\theta, \alpha_2)} \bullet r^2 dr \sin(\theta) d\theta d\varphi$ car le noyau est à bord franc et défini par l'équation A.12.

A.3 FORMULE DE COHEN & SWIATECKI

L'énergie d'interaction coulombienne entre deux ellipsoïdes de révolutions coaxiaux : 1 et 2 situées en (x, y, z) et en (X, Y, Z) est donnée par la formule de Cohen-Swiatecki [34]. Elle s'exprime sur la forme d'une double série et dépend des demi-axes des ellipsoïdes. Cette énergie coulombienne, est la somme des interactions élémentaires entre les charges élémentaires $\rho_1 d\vec{r}_1$ et $\rho_2 d\vec{r}_2$ distantes de r_{12} :

$$E_{coul} = \int_{\text{ell.1}} \int_{\text{ell.2}} \frac{\rho_1 \rho_2}{r_{12}} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \quad (\text{A.16})$$

La double série de la formule de Cohen-Swiatecki provient du développement en série de l'intégrale sur le volume de chaque ellipsoïde : $\int_{\text{ell.1}}$ et $\int_{\text{ell.2}}$.

Le potentiel électrique d'un ellipsoïde au point P, situé à l'extérieur de l'ellipsoïde en (ξ, η, ζ) , dont le centre de cet ellipsoïde se situe en (x, y, z) , est donné par [44, 45] :

$$V_{\text{ell}}(\xi, \eta, \zeta) = Q \sum_{i=0}^{\infty} \frac{3}{(2i+3)(2i+1)!} \left(a^2 \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + b^2 \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} + c^2 \frac{\partial^2}{\partial \zeta^2} \right)^i \frac{1}{r} \quad (\text{A.17})$$

avec $r = \sqrt{(\xi - x)^2 + (\eta - y)^2 + (\zeta - z)^2}$.

Si l'origine du référentiel est placé sur le centre de l'ellipsoïde, ie $(x, y, z) = (0, 0, 0)$ alors le potentiel de l'ellipsoïde au point P est donné par :

$$V_{\text{ell}}(\xi, \eta, \zeta) = Q \sum_{i=0}^{\infty} \frac{3}{(2i+3)(2i+1)!} \left(a^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} + b^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} + c^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)^i \Bigg|_{(0,0,0)} \frac{1}{r} \quad (\text{A.18})$$

Dans ce cas, il y a équivalence entre $\frac{\partial^2}{\partial \xi^2}$ et $\frac{\partial^2}{\partial x^2}$; $\frac{\partial^2}{\partial \eta^2}$ et $\frac{\partial^2}{\partial y^2}$ ainsi qu'entre $\frac{\partial^2}{\partial \zeta^2}$ et $\frac{\partial^2}{\partial z^2}$ pourvu que les nouvelles dérivées partielles soient évaluées en $(\xi, \eta, \zeta) = (0, 0, 0)$.

Le système de deux ellipsoïdes peut être vu comme résultant de l'interaction de l'ellipsoïde 2 avec le potentiel dû à l'ellipsoïde 1, donc l'équation A.16 peut être exprimée en fonction du potentiel de l'ellipsoïde 1 d'où :

$$E_{coul} = Q_2 \int_{\text{ell.2}} V_1(\xi, \eta, \zeta) d\Omega \quad (\text{A.19})$$

avec $d\Omega = d\xi d\eta d\zeta$. En injectant l'expression (éq. A.18) du potentiel électrique de l'ellipsoïde 1 dans l'équation A.19, il en découle :

$$E_{coul} = Q_1 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{3}{(2n+3)(2n+1)!} \left(a_1^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} + b_1^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} + c_1^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)^n \Bigg|_{(0,0,0)} Q_2 \int_{\text{ell.2}} \frac{d\Omega}{r} \quad (\text{A.20})$$

Dans référentiel centré sur l'ellipsoïde 2 où $(X, Y, Z) = (0, 0, 0)$ et $(x, y, z) \neq (0, 0, 0)$, $Q_2 \int_{\text{ell.2}} \frac{d\Omega}{r}$ correspond au potentiel de l'ellipsoïde 2 au point (x, y, z) d'où :

$$E_{coul} = Q_1 Q_2 \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{3}{(2n+3)(2n+1)!} \frac{3}{(2m+3)(2m+1)!} \left(a_1^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} + b_1^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} + c_1^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)^n \Bigg|_{(0,0,0)} \left(a_2^2 \frac{\partial^2}{\partial X^2} + b_2^2 \frac{\partial^2}{\partial Y^2} + c_2^2 \frac{\partial^2}{\partial Z^2} \right)^m \Bigg|_{(0,0,0)} \frac{1}{R_{12}} \quad (\text{A.21})$$

Cette équation est déduite de l'équation A.18, où x, y, z est remplacé par X, Y, Z , avec $R_{12} = \sqrt{(X-x)^2 + (Y-y)^2 + (Z-z)^2}$ la distance entre les centres des ellipsoïdes.

Sachant que les ellipsoïdes sont de révolution alors $a_i = b_i$. De plus R_{12} satisfait l'équation de Laplace $\Delta \left(\frac{1}{R_{12}} \right) = 0$ alors l'opérateur différentiel est simplifiable :

$$a^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} + b^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} + c^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} = (c^2 - a^2) \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (\text{A.22})$$

Les opérateurs différentiels $\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ et $\frac{\partial^2}{\partial y^2}$ ont des rôles identiques lorsqu'ils sont appliqués à $\frac{1}{R_{12}}$ d'où :

$$E_{coul} = Q_1 Q_2 \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{3}{(2n+3)(2n+1)!} \frac{3}{(2m+3)(2m+1)!} (c_1^2 - a_1^2)^n (c_2^2 - a_2^2)^m \left(\frac{\partial}{\partial z} \right)^{(2n+2m)} \frac{1}{R_{12}} \quad (\text{A.23})$$

A la scission, les fragments sont alignés sur le même axe donc l'angle θ , défini comme étant l'angle entre \vec{R}_{12} et l'axe z , est nul. La formule de Cohen-Swiatecki :

$$E_{coul} = \frac{197}{137} \frac{Z_1 Z_2}{R_{12}} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{3}{(2n+3)(2n+1)!} \frac{3}{(2m+3)(2m+1)!} \left(\frac{c_1^2 - a_1^2}{R_{12}} \right)^n \left(\frac{c_2^2 - a_2^2}{R_{12}} \right)^m \quad (\text{A.24})$$

est obtenue grâce à la relation :

$$\left(\frac{\partial}{\partial z} \right)^s \frac{1}{R_{12}} = (-1)^s s! R_{12}^{-s-1} P_s(\cos(\theta)) \quad (\text{A.25})$$

Dans cette formule, l'énergie coulombienne E_{coul} est exprimée en MeV et la distance R_{12} ainsi que les demi-axes en fm.

La formule de Cohen-Swiatecki donne, de manière exacte, l'énergie d'interaction coulombienne entre deux ellipsoïdes de révolution coaxiaux et chargés uniformément. La seule source d'erreur provient du calcul de la double série qui doit faire l'objet d'une coupure. Le calcul de l'interaction entre deux distributions de charges, autre que des distributions ellipsoïdales, ne peut pas faire appel à la formule de Cohen-Swiatecki et doit faire l'objet d'un traitement spécifique.

A.4 ÉNERGIE D'INTERACTION ENTRE DEUX CYLINDRES CREUX

Le calcul de l'énergie d'interaction coulombienne entre deux fragments possédant chacun une distribution de charge sous forme tabulaire : $\rho_{\pi,i}(x_i, y_i, z_i)$, ne peut être résolu qu'en sommant les interactions entre les charges élémentaires $\Delta\rho_{\pi,i}$:

$$E_{\text{coul}} = \sum_{i:\{x_1, y_1, z_1\}} \sum_{j:\{x_2, y_2, z_2\}} \frac{\Delta\rho_{\pi,1}(x_i, y_i, z_i)\Delta\rho_{\pi,2}(x_j, y_j, z_j)}{r_{ij}} \quad (\text{A.26})$$

Cependant, si les distributions possèdent des symétries, il est possible d'optimiser le temps calcul. En particulier si elles possèdent une symétrie cylindrique (ou de révolution) où $\rho_{\pi,i}(x_i, y_i, z_i) = \rho_{\pi,i}(r_i, z_i)$ alors l'énergie coulombienne est la somme d'interactions élémentaires entre des cylindres creux uniformément chargés, illustrés sur la figure A.2.

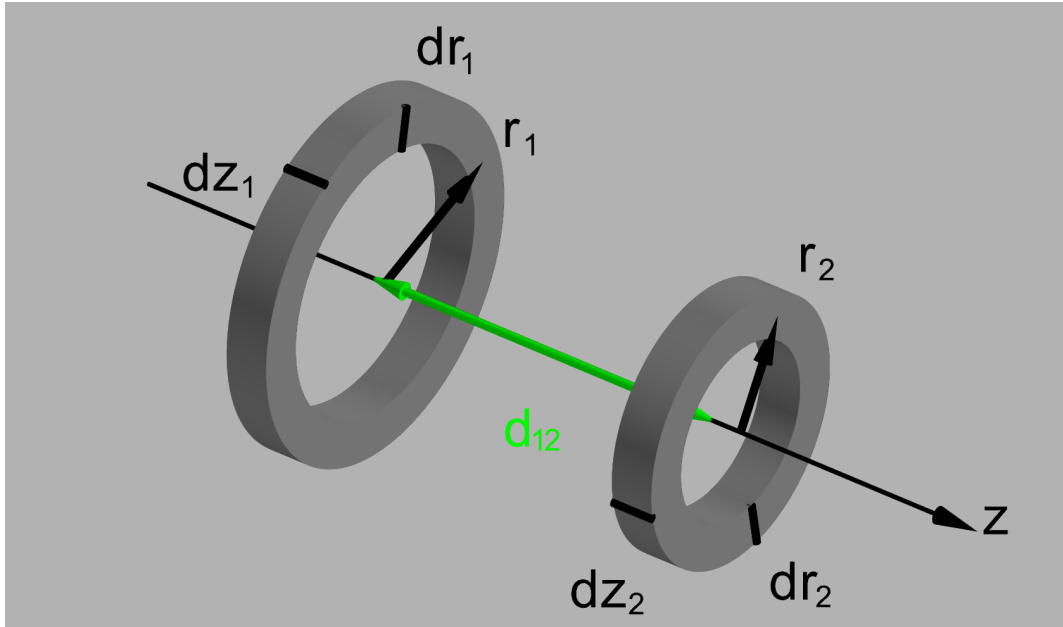


FIGURE A.2 – Représentation de deux cylindres creux uniformément chargés possédant le même axe de symétrie. Ils sont caractérisés par leur rayon r_i , leur épaisseur dr_i , leur hauteur dz_i où $i = 1$ ou 2 et de la distance d_{12} les séparant.

Cette optimisation n'est possible que sous condition d'existence d'une expression analytique pour l'interaction entre des cylindres creux uniformément chargés :

$$dE_{\text{coul}}^{c1c2} = \frac{197}{137} r_1 dr_1 r_2 dr_2 dz_1 dz_2 \rho_{\pi,1} \rho_{\pi,2} \underbrace{\int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi_1 d\varphi_2}{\|\vec{r}_{12}\|}}_{f(r_1, r_2, d_{12})} \quad (\text{A.27})$$

en fonction de leurs caractéristiques géométriques et de leur densité de charge $\rho_{\pi,i}$.

Il suffit donc de trouver une expression analytique de l'intégrale $f(r_1, r_2, d_{12})$. En exprimant \vec{r}_{12} en fonction de φ_1 et φ_2 :

$$\vec{r}_{12} = -r_1 \begin{vmatrix} \cos(\varphi_1) \\ \sin(\varphi_1) \\ 0 \end{vmatrix} + d_{12} \begin{vmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{vmatrix} + r_2 \begin{vmatrix} \cos(\varphi_2) \\ \sin(\varphi_2) \\ 0 \end{vmatrix} \quad (\text{A.28})$$

la norme du vecteur \vec{r}_{12} est déduite de

$$\begin{aligned} r_{12}^2 &= \alpha^2 (1 - \beta \cos(\varphi_1 - \varphi_2)) \\ &= \alpha^2 (1 - \beta) \left(1 - \frac{2\beta}{\beta - 1} \sin^2 \left(\frac{\varphi_1 - \varphi_2}{2} \right) \right) \end{aligned} \quad (\text{A.29})$$

où α et β sont définis par :

$$\alpha^2 = r_1^2 + d_{12}^2 + r_2^2 \quad (\text{A.30})$$

$$\beta = \frac{2r_1 r_2}{\alpha^2} \quad (\text{A.31})$$

dépendent des dimensions des cylindres. La fonction $f(r_1, r_2, d_{12})$ peut être exprimée sous la forme d'un produit entre un facteur $\left(\frac{1}{\alpha} \frac{1}{\sqrt{1-\beta}}\right)$ et une fonction de β ($f(\beta)$) :

$$f(r_1, r_2, d_{12}) = \frac{1}{\alpha} \frac{1}{\sqrt{1-\beta}} \underbrace{\int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi_1 d\varphi_2}{\sqrt{1 - \frac{2\beta}{\beta-1} \sin^2 \left(\frac{\varphi_1 - \varphi_2}{2} \right)}}_{f(\beta)} \quad (\text{A.32})$$

Moyennant quelques changement de variables, $f(\beta)$ peut être exprimée en fonction d'une intégrale elliptique de première espèce [46] :

$$f(\beta) = 8\pi K \left(-\sqrt{\frac{2\beta}{1-\beta}} \right) \quad (\text{A.33})$$

L'intégrale elliptique :

$$K(k) = \int_0^{\pi/2} \frac{du}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2(u)}} \quad (\text{A.34})$$

n'est pas analytique mais admet un développement en série [46]. Cela permet d'optimiser le temps de calcul car il existe des algorithmes permettant de calculer très rapidement $K(k)$.

Finalement l'énergie coulombienne entre deux cylindres creux de rayon interne $r_i - \frac{\Delta r}{2}$, de rayon externe $r_i + \frac{\Delta r}{2}$, d'épaisseur Δz et distant de d_{12} où $\rho_{\pi,i}$, exprimé en proton par fm^3 , est donnée par :

$$\begin{aligned} E_{\text{coul}}^{c1c2}(r_1, r_2, d_{12}) &= \frac{197}{137} [r^2]_{r_1 - \frac{\Delta r}{2}}^{r_1 + \frac{\Delta r}{2}} [r^2]_{r_2 - \frac{\Delta r}{2}}^{r_2 + \frac{\Delta r}{2}} (\Delta z)^2 \\ &\quad \rho_{\pi,1} \rho_{\pi,2} \frac{1}{\alpha} \frac{1}{\sqrt{1-\beta}} 2\pi K \left(-\sqrt{\frac{2\beta}{1-\beta}} \right) \end{aligned} \quad (\text{A.35})$$

Densité d'états d'un gaz de fermions

B



QUEL est le lien entre la densité d'états individuels : $\rho(\varepsilon) \propto \sqrt{\varepsilon}$ et la densité d'états du système : $\rho(E) \propto e^{\sqrt{E}}$? Quelles sont les approximations associées à la formule de la densité d'états d'un gaz de Fermi ? Dans cette annexe, la formule du gaz de Fermi va être démontrée. Dans ce cadre, le noyau de l'atome est modélisé par une sphère de rayon R contenant un gaz de $Z + N$ fermions n'interagissant pas entre eux, de spin $1/2$ et d'énergie d'excitation E^* où la statistique de Fermi-Dirac est applicable.¹

B.1 ÉTAT INDIVIDUEL - STATISTIQUE DE FERMI-DIRAC

Au sein de ce gaz, un fermion d'énergie ε et de masse m a une densité d'états proportionnelle à la racine carré de son énergie [49] :

$$\begin{aligned}\rho(\varepsilon) &= \frac{3}{2} C \sqrt{\varepsilon} \\ &= \frac{3}{2} \frac{2^{7/2}}{9\pi} \left(\frac{mR^2}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{\varepsilon}\end{aligned}\tag{B.1}$$

Dans la statistique de Fermi-Dirac, chaque état individuel $|\lambda\rangle$ a un nombre d'occupation compris en 0 et 1 :

$$n_\lambda = \frac{1}{1 + e^{\beta(\varepsilon_\lambda - \mu)}}\tag{B.2}$$

où μ est le potentiel chimique du gaz et $\beta = \frac{1}{k_B T}$ est lié à la température T de ce gaz.

1. L'ensemble des calculs qui suivent, résultent de la compilation des articles de A. Sommerfeld [47] et de H. A. Bethe [48] ainsi que des livres de K. Huang [49] et de M. Trocheris [50] en uniformisant les notations.

Les contraintes du système que sont μ et β , sont directement reliées au nombre de fermions :

$$N = \sum_{\lambda} n_{\lambda} \quad (\text{B.3})$$

et à l'énergie du système :

$$E = \sum_{\lambda} \varepsilon_{\lambda} n_{\lambda} \quad (\text{B.4})$$

L'indice λ étiquette les différents états individuels possibles.

Dans le cas où l'écart entre deux niveaux d'énergie est très faible alors l'approximation continue permet de lier le nombre de fermions N à la densité d'états : $\rho(\varepsilon)$:

$$\begin{aligned} N &= \int n(\varepsilon) \rho(\varepsilon) d\varepsilon \\ &= \frac{3}{2} C \int n(\varepsilon) \sqrt{\varepsilon} d\varepsilon \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

de même pour l'énergie E du système :

$$\begin{aligned} E &= \int \varepsilon n(\varepsilon) \rho(\varepsilon) d\varepsilon \\ &= \frac{3}{2} C \int n(\varepsilon) \varepsilon^{3/2} d\varepsilon \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

B.2 CALCUL DE LA DENSITÉ D'ÉTATS $\rho(E^*)$

La limite thermodynamique est supposée atteinte, c'est à dire que la configuration du noyau est telle que le nombre de particules N et le volume tendent vers l'infini alors que la densité de particules demeure constante. Dans cette configuration, les trois ensembles statistiques : microcanonique, canonique et grand canonique sont équivalents. L'ensemble grand canonique est utilisé pour décrire le noyau car il offre une plus grande souplesse d'utilisation.

Le calcul de la densité d'états $\rho(E^*)$ d'un gaz de Fermi nécessite au préalable trois expressions : la première est issue du calcul de Sommerfeld [47] qui exprime la fonction de partition grand canonique de deux façons différentes : la première en fonction de la densité d'états du système $\rho(E^*)$ et la seconde en fonction de la densité d'états individuels $\rho(\varepsilon)$. Les deux autres expressions sont celle de l'énergie interne U et celle du nombre de particules N en fonction de β et μ .

B.2.1 Calcul de Sommerfeld de la statistique de Fermi

La fonction de partition grand canonique Ξ est la somme des probabilités, non normalisées, des microétats du système $|I\rangle$:

$$\Xi = \sum_I e^{-\beta(E_I - \mu N_I)} \quad (\text{B.7})$$

$$= \sum_{N=0}^{\infty} e^{\beta\mu N} \sum_{I/N_I=N} e^{-\beta E_I} \quad (\text{B.8})$$

Un microétat est notamment caractérisé par son nombre de particules N_l et son énergie totale E_l , sa probabilité vaut $e^{-\beta(E_l - \mu N_l)} / \Xi$.

Dans l'équation B.8, la somme sur l'ensemble des microétats accessibles indicé par l , peut être remplacée par une intégrale sur l'énergie E du système. Ainsi la fonction de partition est exprimée en fonction de la densité d'états du système $\rho(E)$:

$$\Xi = \sum_{N=0}^{\infty} \int_0^{E(N)} e^{\beta\mu N - \beta E} \rho(E) dE \quad (\text{B.9})$$

où $E(N)$ est l'énergie du système possédant N particules.

Afin d'établir un lien entre la densité d'états du système $\rho(E)$ et la densité d'états individuels $\rho(\varepsilon)$, la fonction de partition Ξ (éq. B.7) doit être exprimée en fonction de $\rho(\varepsilon)$. Etant donné qu'ils n'y a pas d'interactions entre les fermions constituant le gaz alors ils sont indépendants, chaque microétat $|l\rangle$ est un produit tensoriel antisymétrique d'états individuels $|\lambda\rangle$:

$$|l\rangle = \mathcal{A} \bigotimes_{\lambda} |\lambda\rangle \quad (\text{B.10})$$

Un microétat est donc caractérisé par un ensemble de nombres correspondant aux nombres d'occupations, noté n_{λ}^l , des différents états individuels possibles :

$$|l\rangle = |n_0^l, n_1^l, n_2^l, \dots, n_{\lambda}^l, \dots\rangle \quad (\text{B.11})$$

L'énergie E_l correspondant au microétat $|l\rangle$ est donc la somme des énergies des états individuels, notée ε_{λ} , pondérées par leur nombre d'occupation :

$$E_l = \sum_{\lambda} n_{\lambda}^l \varepsilon_{\lambda} \quad (\text{B.12})$$

Le nombre de particules du microétat $|l\rangle$ est la somme des nombres d'occupations des différents états individuels :

$$N_l = \sum_{\lambda} n_{\lambda}^l \quad (\text{B.13})$$

Ainsi, grâce aux relations B.12 et B.13, la fonction de partition peut être exprimée en fonction des indices l et λ . Cette nouvelle expression est donnée par l'équation B.14. L'absence d'interactions entre les particules du gaz permet, à partir de cette expression, d'exprimer la fonction de partition sous la forme d'un produit sur les différents états individuels (éq. B.15).

$$\Xi = \sum_I e^{-\beta \sum_{\lambda} (\varepsilon_{\lambda} - \mu) n_{\lambda}^I} \quad (\text{B.14})$$

$$\begin{aligned} &= \sum_I \prod_{\lambda} e^{-\beta (\varepsilon_{\lambda} - \mu) n_{\lambda}^I} \\ &= \sum_{\{n_0\}} \sum_{\{n_1\}} \dots \sum_{\{n_{\lambda}\}} \dots e^{-\beta (\varepsilon_0 - \mu) n_0} e^{-\beta (\varepsilon_1 - \mu) n_1} \dots e^{-\beta (\varepsilon_{\lambda} - \mu) n_{\lambda}} \dots \\ &= \sum_{\{n_0\}} e^{-\beta (\varepsilon_0 - \mu) n_0} \sum_{\{n_1\}} e^{-\beta (\varepsilon_1 - \mu) n_1} \dots \sum_{\{n_{\lambda}\}} e^{-\beta (\varepsilon_{\lambda} - \mu) n_{\lambda}} \dots \\ &= \prod_{\lambda} \sum_{\{n_{\lambda}\}} e^{-\beta (\varepsilon_{\lambda} - \mu) n_{\lambda}} \end{aligned} \quad (\text{B.15})$$

Dans le cas d'un gaz à basse température où seules des excitations particule-trou sont considérées, le nombre d'occupation d'un état individuel, donné par l'équation B.2, vaut soit 0 soit 1. Dans ce cas l'équation B.15 est simplifiable car $\sum_{\{n_{\lambda}\}} e^{-\beta (\varepsilon_{\lambda} - \mu) n_{\lambda}} = 1 + e^{-\beta (\varepsilon_{\lambda} - \mu)}$:

$$\ln \Xi = \sum_{\lambda} \ln \left(1 + e^{-\beta (\varepsilon_{\lambda} - \mu)} \right) \quad (\text{B.16})$$

Cette dernière peut être réexprimée en fonction de la densité d'états individuelles, $\rho(\varepsilon)$, en faisant l'approximation continue : $\sum_{\lambda} \bullet \leftrightarrow \int \rho(\varepsilon) \bullet d\varepsilon$:

$$\ln \Xi = \int \rho(\varepsilon) \ln \left(1 + e^{-\beta (\varepsilon - \mu)} \right) d\varepsilon \quad (\text{B.17})$$

Une nouvelle expression du logarithme de la fonction de partition est ainsi obtenue en insérant l'expression de la densité d'états individuels (éq. B.1) dans l'équation B.17 :

$$\ln \Xi = \frac{3}{2} C \int \sqrt{\varepsilon} \ln \left(1 + e^{-\beta (\varepsilon - \mu)} \right) d\varepsilon \quad (\text{B.18})$$

Les deux formulations de la fonction de partition établies en considérant soit les états individuels via la densité d'états d'un fermion $\rho(\varepsilon)$ au sein d'un gaz (éq. B.17), soit les états du système via la densité d'états $\rho(E)$ de celui-ci (éq. B.9), permettent finalement d'établir un lien entre les deux types de densité d'états.

La relation de Sommerfeld entre l'énergie d'un état individuel ε et la densité d'états du système $\rho(E)$ peut être établie à l'aide des équations B.18 et B.9 afin de calculer densité d'états du système $\rho(E)$ (voir section B.2.3) qui est valable dans le cas d'un système à basse température :

$$\frac{3}{2} C \int \sqrt{\varepsilon} \ln \left(1 + e^{-\beta (\varepsilon - \mu)} \right) d\varepsilon = \ln \left(\sum_{N=0}^{\infty} \int_0^{E(N)} e^{\beta \mu N - \beta E} \rho(E) dE \right) \quad (\text{B.19})$$

B.2.2 Calcul de l'énergie interne et du nombre de particules

Le terme de droite de la relation de Sommerfeld (éq. B.19) comprend un terme dépendant de l'énergie interne U et du nombre de particules N du système. Ces derniers sont fonction de deux grandeurs macroscopiques caractérisant le système : sa température décrite par $\beta = \frac{1}{k_B T}$ et son potentiel chimique μ . La température et le potentiel chimique dépendent de l'énergie d'excitation du système E^* . Pour pouvoir calculer la densité d'états du système $\rho(E)$ il est nécessaire de connaître les relations entre U , N , β et μ .

Énergie interne U

L'énergie interne du système, notée U , est la somme pondérée de l'énergie des différents microétats :

$$U = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{l/N_l=N} E_l e^{-\beta(E_l - \mu N)} \quad (\text{B.20})$$

peut être exprimée en fonction de la fonction de partition :

$$U = - \frac{\partial \ln \Xi}{\partial \beta} \quad (\text{B.21})$$

Avec les équations B.21 et B.18, l'énergie interne peut être exprimée en fonction de β et de μ où $y = \beta \varepsilon$:

$$U = \frac{3}{2} C \beta^{-5/2} \int_0^{+\infty} \frac{y^{3/2} e^{\beta \mu - y}}{1 + e^{\beta \mu - y}} dy \quad (\text{B.22})$$

Plusieurs étapes sont nécessaires afin d'obtenir une expression de l'énergie interne U dépendant uniquement de β et de μ . La première consiste à effectuer une intégration par parties afin que le dénominateur de l'intégrande de l'équation B.22 soit élevé au carré :

$$U = \frac{3}{5} C \beta^{-5/2} \int_0^{+\infty} \frac{y^{5/2} e^{\beta \mu - y}}{(1 + e^{\beta \mu - y})^2} dy \quad (\text{B.23})$$

La seconde consiste à effectuer un développement limité de $y^{5/2}$ en $y = \beta \mu$:

$$y^{5/2} = (\beta \mu)^{5/2} + \frac{5}{2} (\beta \mu)^{3/2} t + \frac{15}{8} (\beta \mu)^{1/2} t^2 + \dots \quad (\text{B.24})$$

où $t = \beta \mu - y$ et de l'injecter dans l'équation B.23. En effet l'intégrande possède un maximum étroit autour de $\mu \approx \varepsilon$:

$$U = \frac{3}{5} C \beta^{-5/2} \int_{-\beta \mu}^{+\infty} \frac{e^t}{(1 + e^t)^2} \left((\beta \mu)^{5/2} + \frac{5}{2} (\beta \mu)^{3/2} t + \frac{15}{8} (\beta \mu)^{1/2} t^2 + \dots \right) dt \quad (\text{B.25})$$

L'intégrale de l'expression ci-dessus est évaluée entre $-\beta \mu$ et $+\infty$ ce qui rend impossible son calcul de manière analytique. Cependant en faisant l'approximation d'un gaz à basse température et à haute densité, ie $\beta \mu \gg 1$, le calcul de cette

expression devient possible puisque l'intégrale est dorénavant évaluée entre $-\infty$ et $+\infty$. Elle se décompose en une somme dont le terme d'indice n est proportionnel à I_n :

$$I_n \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{t^n e^t}{(1+e^t)^2} dt \quad (\text{B.26})$$

qui s'exprime en fonction de la fonction ζ de Riemann :

$$I_n = 2n(n-1)! \left(1 - 2^{1-n}\right) \zeta(n) \quad (\text{B.27})$$

L'expression de l'énergie interne est obtenue en tronquant le développement limité de $y^{5/2}$ au second ordre en $(\beta\mu)^{-1}$:

$$U \approx \frac{3}{5} C \mu^{5/2} \left(1 + \frac{5\pi^2}{8} (\beta\mu)^{-2}\right) \quad (\text{B.28})$$

Nombre de particules N

Le nombre de particules du système N est la somme pondérée du nombre de particule des différents microétats :

$$N = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{l/N_l=N} N_l e^{-\beta(E_l - \mu N)} \quad (\text{B.29})$$

qui peut être également exprimé en fonction de la fonction de partition :

$$N = z \frac{\partial \ln \Xi}{\partial z} \quad (\text{B.30})$$

où $z = e^{\beta\mu}$ est la fugacité.

L'expression du nombre de particules est obtenu de la même manière que celle de l'énergie interne, en utilisant les mêmes notations. L'expression de N en fonction de la fonction de partition (éq. B.30) permet de déduire l'expression suivante :

$$N = \frac{3}{2} C \beta^{-3/2} \int_0^{+\infty} \frac{\sqrt{y} e^{\beta\mu - y}}{1 + e^{\beta\mu - y}} dy \quad (\text{B.31})$$

puis par une intégration par parties de l'équation précédente, le nombre de particules s'exprime de la manière suivante :

$$N = \frac{3}{2} C \beta^{-3/2} \int_0^{+\infty} \frac{y^{3/2} e^{\beta\mu - y}}{(1 + e^{\beta\mu - y})^2} dy \quad (\text{B.32})$$

Tout comme l'intégrande de l'équation B.23, l'intégrande de l'équation B.32 présente possède un maximum étroit autour de $\mu \approx \varepsilon$ d'où le développement limité de $y^{3/2}$:

$$y^{3/2} \approx (\beta\mu)^{3/2} + \frac{3}{2} (\beta\mu)^{1/2} t + \frac{3}{8} (\beta\mu)^{-1/2} t^2 \quad (\text{B.33})$$

Ce développement est injecté dans l'équation B.32 d'où :

$$N = C\beta^{-3/2} \int_{-\beta\mu}^{+\infty} \frac{e^t}{(1+e^t)^2} \left((\beta\mu)^{3/2} + \frac{3}{2}(\beta\mu)^{1/2}t + \frac{3}{8}(\beta\mu)^{-1/2}t^2 + \dots \right) dt \quad (\text{B.34})$$

La même approximation de basse température et de haute densité du gaz est effectuée afin d'obtenir une expression analytique du nombre de particules :

$$N \approx C\mu^{3/2} \left(1 + \frac{\pi^2}{8}(\beta\mu)^{-2} \right) \quad (\text{B.35})$$

Potentiel chimique μ et énergie d'excitation E^*

Maintenant que le nombre de particules du système N est exprimé sous la forme d'une expression analytique, il est possible d'obtenir le potentiel chimique μ . En effet à partir de l'expression analytique du nombre de particules du système donné par l'équation B.35, il est possible d'exprimer μ en fonction de N et de $\beta\mu$ d'où :

$$\mu = \left(\frac{N}{C} \right)^{2/3} \left(1 + \frac{\pi^2}{8}(\beta\mu)^{-2} \right)^{-2/3} \quad (\text{B.36})$$

Cette expression est simplifiable on effectuant un développement limité au second ordre en $(\beta\mu)^{-1}$:

$$\mu \approx \left(\frac{N}{C} \right)^{2/3} \left(1 - \frac{\pi^2}{12}(\beta\mu)^{-2} \right) \quad (\text{B.37})$$

L'énergie de Fermi du système, notée μ_0 ou ε_F , est définie comme étant la valeur du potentiel chimique quand la température du système est nulle :

$$\mu_0 = \left(\frac{N}{C} \right)^{2/3} \quad (\text{B.38})$$

L'équation B.37 peut être réécrite en fonction de μ_0 en supposant que $(\beta\mu)^{-2} \approx (\beta\mu_0)^{-2}$:

$$\mu = \mu_0 \left(1 - \frac{\pi^2}{12}(\beta\mu_0)^{-2} \right) \quad (\text{B.39})$$

De la même façon, l'énergie interne (éq. B.28) peut être exprimée en fonction de $(\beta\mu_0)^{-2}$ et de U_0 l'énergie interne à température nulle définie par :

$$U_0 = \frac{3}{5}C\mu_0^{5/2} \quad (\text{B.40})$$

Ainsi, il est possible de définir l'énergie d'excitation E^* du système comme étant la différence entre l'énergie interne et l'énergie interne du système à température nulle :

$$E^* = U - U_0 = \frac{\pi^2}{4}C\beta^{-2}\mu_0^{1/2} \quad (\text{B.41})$$

B.2.3 Expression de $\rho(E^*)$

Le calcul de la densité d'états du système en fonction de son énergie d'excitation est dorénavant possible puisque l'expression de l'énergie interne et du nombre de particule du système sont connues. Le membre de gauche de l'égalité B.19 est simplifiable en effectuant une intégration par parties :

$$\begin{aligned} \frac{3}{2}C \int \sqrt{\varepsilon} \ln(1 + e^{-\beta(\varepsilon-\mu)}) &= \beta C \int \frac{\varepsilon}{1 + e^{-\beta(\varepsilon-\mu)}} \sqrt{\varepsilon} d\varepsilon \\ &= \frac{2}{3}\beta \int \rho(\varepsilon)n(\varepsilon)\varepsilon d\varepsilon \\ &= \frac{2}{3}\beta U \end{aligned} \quad (\text{B.42})$$

Afin de calculer la densité d'états du système il est préalablement nécessaire d'obtenir l'expression de l'entropie adimensionnelle $\Phi = S/k_B$. Pour cela il faut partir de la définition de l'entropie (éq. B.43) et y insérer l'expression de la probabilité d'un microétat $|l\rangle$: $P_l = e^{-\beta E_l + \beta \mu N_l} / \ln \Xi$. Ainsi il est possible d'identifier l'énergie moyenne $\langle E_l \rangle$, assimilable à l'énergie interne du système U , et le nombre de particules moyen $\langle N_l \rangle$ assimilable au nombre de particules du système N puisque les fluctuations de ces valeurs moyennes sont très faibles d'où l'équation B.44.

$$\Phi = - \sum_l P_l \ln P_l \quad (\text{B.43})$$

$$\begin{aligned} &= - \sum_l P_l (-\beta E_l + \beta \mu N_l - \ln \Xi) \\ &= \ln \Xi + \beta \langle E_l \rangle - \beta \mu \langle N_l \rangle \\ &= \ln \Xi + \beta U - \beta \mu N \end{aligned} \quad (\text{B.44})$$

$$= \frac{5}{3}\beta U - \beta \mu N \quad (\text{B.45})$$

$$= \frac{\pi^2}{2} C \beta^{-1} \mu^{1/2} \quad (\text{B.46})$$

$$(\text{B.47})$$

L'équation B.45, déduite de l'équation B.44 en utilisant les équations B.42 et B.18, peut être exprimée uniquement en fonction de β et de μ (éq. B.46) en utilisant les équations B.28 et B.35. Son approximation est donnée par :

$$\Phi(E^*) \approx \pi \sqrt{\frac{NE^*}{\mu_0}} \quad (\text{B.48})$$

En se basant sur l'équation B.44 et en utilisant la définition de la fonction de partition (voir éq. B.9), l'entropie adimensionnelle Φ est exprimable en fonction de la densité d'états du système :

$$\Phi = \ln \left(\sum_{N'=0}^{\infty} \int_0^{U'(N')} e^{\beta \mu (N' - N) - \beta (U' - U)} \rho(U') dU' \right) \quad (\text{B.49})$$

Sachant que l'argument du logarithme de l'équation B.49 présente un maximum étroit pour $N' = N$ et $U' = U$ alors il peut être considéré comme étant le produit d'une fonction évoluant lentement en fonction de U et N : $\lambda^{-1}(U, N)$ et de la densité d'états $\rho(U)$:

$$e^\Phi \approx \lambda^{-1}(U, N)\rho(U) \quad (\text{B.50})$$

Ainsi pour obtenir la densité d'états du système en fonction de l'énergie d'excitation E^* :

$$\rho(E^*) = \lambda(E^*, N)e^{\Phi(E^*)} \quad (\text{B.51})$$

il suffit de calculer $\lambda(E^*, N)$. Pour cela, il suffit d'injecter l'expression de $\rho(E^*)$ (éq. B.51) dans l'équation B.49 en sachant que $\lambda(E^{*'}, N')$ est constant sur le domaine d'intégration où l'intégrande $e^{f(\beta', \mu')}$ est non négligeable :

$$1 = \lambda(E^*, N) \sum_{N'=0}^{\infty} \int_0^{E^{*'}(N')} e^{\underbrace{\beta\mu(N' - N) - \beta(E^{*'} - E^*) + \Phi(E^{*'}) - \Phi(E^*)}_{f(\beta', \mu')}} dE^{*'} \quad (\text{B.52})$$

En utilisant l'expression de l'entropie adimensionnelle donnée par l'équation B.45, le terme $f(\beta', \mu')$ de l'équation ci-dessus peut être exprimé comme il suit :

$$f(\beta', \mu') = \left(\frac{5}{3}E^{*'} - N'\mu'\right) (\beta' - \beta) + \frac{2}{3}\beta(E^{*'} - E^*) - N'\beta(\mu' - \mu) \quad (\text{B.53})$$

L'expression de f en fonction des variables d'intégration $E^{*'}$ et N' :

$$f(E^{*'}, N') = -\frac{\pi}{2} \sqrt{\frac{N}{\mu_0 E^*}} \left(\frac{(N' - N)^2}{3} \frac{\mu}{N} + \frac{(E^{*'} - E^*)^2}{4E^*} \right) \quad (\text{B.54})$$

est obtenue en considérant que μ' et μ sont proches : $\mu' = \mu(1 + h_\mu)$ avec $h_\mu \ll 1$ de même pour β' et β : $\beta' = \beta(1 + h_\beta)$ avec $h_\beta \ll 1$ et en utilisant les expressions de U (éq. B.28) et de N (éq. B.35).

Dorénavant $\lambda^{-1}(E^*, N)$ est sous la forme d'une intégrale calculable analytiquement :

$$\lambda^{-1}(E^*, N) = \iint e^{-\frac{\pi}{6} \sqrt{\frac{N}{\mu_0 E^*}} \frac{\mu}{N} (N' - N)^2} e^{-\frac{\pi}{8} \sqrt{\frac{N}{\mu_0 E^*}} \frac{(E^{*'} - E^*)^2}{E^*}} dE^{*'} dN' \quad (\text{B.55})$$

et vaut :

$$\lambda^{-1}(E^*, N) = \sqrt{48} E^* \quad (\text{B.56})$$

Finalement l'expression de la densité d'états du système d'un gaz de fermions de spin 1/2 : $\rho(E^*)$ est obtenue en injectant l'équation B.56 dans l'équation B.51 en sachant qu'elle n'est valable que dans le cas où $\beta\mu \gg 1$, c'est à dire dans l'approximation d'un gaz à basse température et à haute densité :

$$\rho(E^*) = \frac{1}{\sqrt{48}} \frac{e^{\pi \sqrt{\frac{NE^*}{\mu_0}}}}{E^*} \quad (\text{B.57})$$

B.3 DENSITÉ D'ÉTATS D'UN NOYAU

L'expression précédente est valable uniquement dans le cas d'un gaz composé de fermions de même nature : neutron ou proton. Dans le cas d'un gaz composé de ces deux types de fermions, la densité d'états est la convolution des densités d'états proton : $\rho_\nu(E_\nu^*)$ et neutron : $\rho_\pi(E_\pi^*)$ avec $E_\nu^* = E^* - E_\pi^*$, $\mu_{0,\pi} = (\frac{Z}{C})^{2/3}$ et $\mu_{0,\nu} = (\frac{N}{C})^{2/3}$:

$$\rho(E^*) = \int \rho_\pi(E_\pi^*) \rho_\nu(E_\nu^*) dE_\nu^* \quad (\text{B.58})$$

En remplaçant les termes $\rho_\nu(E_\nu^*)$ et $\rho_\pi(E_\pi^*)$ par leur expression donnée par l'équation B.57, l'expression ci-dessus s'écrit :

$$\rho(E^*) = \int \frac{1}{48E_\pi^* E_\nu^*} e^{\pi \sqrt{\frac{NE_\pi^*}{\mu_{0,\pi}}}} e^{\pi \sqrt{\frac{NE_\nu^*}{\mu_{0,\nu}}}} dE_\nu^* \quad (\text{B.59})$$

En introduisant la paramètre de densité de niveaux a , la densité d'états d'un noyau modélisé par un gaz de protons et de neutrons à basse température et à haute densité est donnée par :

$$\rho(E^*) = \frac{\sqrt{\pi}}{12} \frac{e^{2\sqrt{aE^*}}}{a^{1/4} E^{*5/4}} \quad (\text{B.60})$$

Où le nombre de protons et de neutrons sont supposés proches tels que $(\frac{N}{Z})^{1/6} \approx 1$ et où $\mu_{0,\pi} = \mu_{0,\nu} = (\frac{A}{2C})^{2/3} = \mu_0$ et $a = \frac{\pi^2}{4} \frac{A}{\mu_0}$. Le paramètre de densité de niveaux vaut $a \approx \frac{A}{13.5}$, en prenant $R = 1.2A^{1/3}$ comme loi d'évolution du rayon nucléaire et la moyenne entre la masse du proton et celle du neutron pour la masse m d'un nucléon libre.

Suppression des effets d'appariement

C



COMME mentionné à la section 4.1.2, la suppression de l'appariement s'effectue en deux étapes. La première pour supprimer l'appariement qui dépendant de la déformation et la seconde pour supprimer l'appariement associé à l'appariement des masses. Les raisons d'une telle procédure sera détaillée dans cette annexe

C.1 APPARIEMENT DE L'ÉTAT FONDAMENTAL

Pour supprimer les effets d'appariement dans les énergie individuelles, il est possible, en première approximation, de supprimer que l'ordre zéro. C'est à dire de recalculer l'énergie individuelle HFB ($E_{\text{HFB}}(\tilde{q})$), non pas sur la masse expérimentale/théorique E_{sys} issue de la table de masse hfb21, mais sur la masse interpolée sur les noyaux pair-pair voisins : E_{sys}^{χ} . Cette interpolation permet de supprimer les effets d'appariement des masses. L'énergie individuelle ainsi obtenue est notée E_{SHFB} et est liée à la masse interpolée selon l'expression ci-dessous :

$$E_{\text{SHFB}}(\tilde{q}) = E_{\text{HFB}}(\tilde{q}) + \left(E_{\text{sys}}^{\chi} - E_{\text{HFB}}(\tilde{q}_{\text{GS}}) \right) \quad (\text{C.1})$$

C.1.1 Interpolation linéaire

La manière la plus simple de calculer les masses interpolées E_{sys}^{χ} est d'effectuer une interpolation linéaire. Ainsi une masse interpolée linéairement, notée $E_{\text{sys}}^{\chi,L}$ est égale à la moyenne des masses des noyaux pair-pair voisins. L'énergie individuelle ôtée des effets d'appariement d'ordre zéro via les masses interpolées linéairement est notée $E_{\text{SLHFB}}(\tilde{q})$, où les lettres SL signifient que les énergie sont recalculées sur les masses interpolées linéairement, et vaut :

$$E_{\text{SLHFB}}(\tilde{q}) = E_{\text{HFB}}(\tilde{q}) + \left(E_{\text{sys}}^{\chi,L} - E_{\text{HFB}}(\tilde{q}_{\text{GS}}) \right) \quad (\text{C.2})$$

Avec cette manière d'interpoler, les effets d'appariement dans les distributions des rendements sont atténués mais pas supprimés. Dans les rendements isotoniques (Fig. C.5) et isobariques (Fig. C.6) ils ne sont quasiment plus visibles alors que dans les rendements isotopiques (Fig. C.4) ils sont encore bel et bien visible.

Il est donc nécessaire d'affiner la méthode d'interpolation des masses. Aux effets d'appariements près, la variation de la masse d'un noyau pair-pair en fonction de son nombre de protons, de neutrons ou de nucléons est localement quadratique (Fig. C.1).

C.1.2 Interpolation quadratique

Une interpolation quadratique constitue une meilleure méthode de suppression de l'appariement. La masse d'un noyau impair-impair ${}^A_Z W_N$ interpolée quadratiquement, notée $E_{\text{sys}}^{X,Q}$, est la moyenne des quatre interpolations possibles :

1. entre les noyaux ${}^{A-2}_{Z-1} X_{N-1}$, ${}^{A+2}_{Z+1} Y_{N+1}$ et le noyau ${}^{A-6}_{Z-3} Z_{N-3}$
2. entre les noyaux ${}^{A-2}_{Z-1} X_{N-1}$, ${}^{A+2}_{Z+1} Y_{N+1}$ et le noyau ${}^{A+6}_{Z+3} Z_{N+3}$
3. entre les noyaux ${}^A_{Z+1} X_{N-1}$, ${}^A_{Z-1} Y_{N+1}$ et le noyau ${}^A_{Z+3} Z_{N-3}$
4. entre les noyaux ${}^A_{Z+1} X_{N-1}$, ${}^A_{Z-1} Y_{N+1}$ et le noyau ${}^A_{Z-3} Z_{N+3}$

La figure C.2 offre une représentation des quatre interpolations possibles dans le cas de ${}^{128}_{59}\text{Pr}_{69}$. La variation de la masse des noyaux pair-pair n'est pas quadratique autour des nombres magiques, par exemple dans le cas de la chaîne isotopique du néodyme (Fig. C.1), il y a une rupture de pente au niveau du nombre magique $N = 82$. Lorsque le noyau ${}_{Z\pm 1} X_{N\pm 1}$ est magique en protons ou en neutrons, l'interpolation quadratique mettant en jeu un noyau au delà de ce nombre magique n'est pas prise en compte dans le calcul de la valeur moyenne $E_{\text{sys}}^{X,Q}$, comme illustré à la figure C.3.

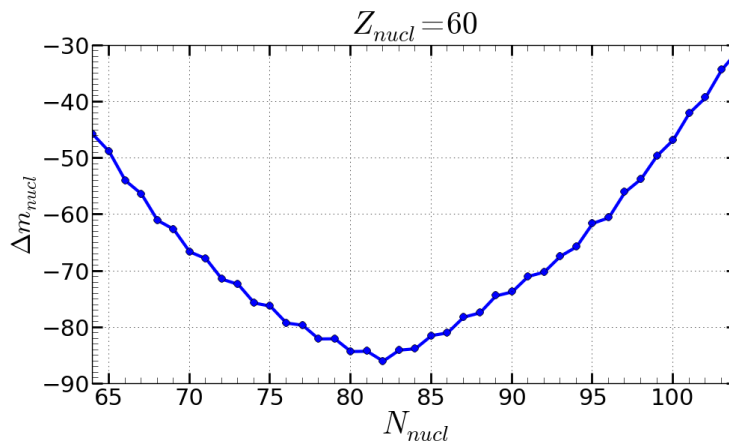


FIGURE C.1 – Défaut de masse Δm_{nucl} des noyaux de la chaîne isotopique du néodyme ($Z_{\text{nucl}} = 60$) issue de la table de masse hfb21 [14].

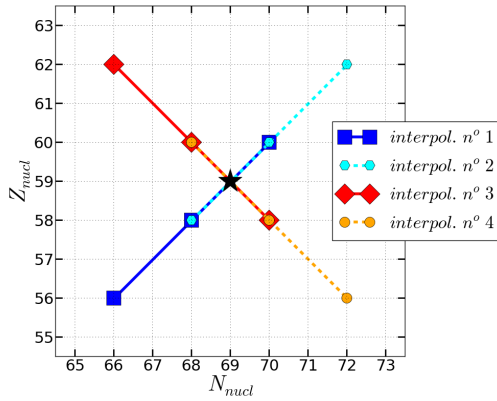


FIGURE C.2 – Représentation des différentes possibilités pour le calcul de la masse interpolée quadratiquement du $^{128}\text{Pr}_{69}$ (étoile noire).

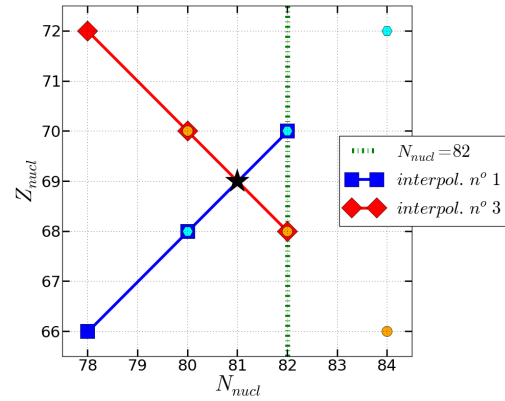


FIGURE C.3 – Représentation des différentes possibilités pour le calcul de la masse interpolée quadratiquement du $^{150}\text{Tm}_{81}$ en présence d'un nombre magique ($N_{nucl} = 82$).

L'énergie individuelle ôtée des effets d'appariement d'ordre zéro via les masses interpolées quadratiquement, notée $E_{\text{SQHFB}}(\tilde{q})$ où les lettres SQ signifient que les énergie sont recalées sur les masses interpolées quadratiquement, vaut :

$$E_{\text{SQHFB}}(\tilde{q}) = E_{\text{HFB}}(\tilde{q}) + \left(E_{\text{sys}}^{\mathcal{K},Q} - E_{\text{HFB}}(\tilde{q}_{\text{GS}}) \right) \quad (\text{C.3})$$

Avec cette méthode d'interpolation des masses, les fluctuations dans les rendements de fission dû aux effets d'appariement sont quasi inexistant. Ils sont encore légèrement visible au niveau des rendements isotopiques de la réaction $^{252}\text{Cf}(sf)$, pour $Z_{\text{frag}} \approx 55$.

C.2 APPARIEMENT DES ÉTATS DÉFORMÉS

Le résidu d'appariement est dû à la variation de l'appariement avec la déformation du noyau. La suppression de cet appariement résiduel est effectuée en deux étapes. La première consiste à effectuer un interpolation linéaire de l'énergie individuelle sur les noyaux pair-pair voisins pour chaque déformation, le résultat de cette interpolation est noté $E_{\text{IHFB}}(\tilde{q})$ (I pour interpolée). Puis l'énergie $E_{\text{IHFB}}(\tilde{q})$ est recalée sur la masse expérimentale/théorique interpolée quadratiquement :

$$E_{\text{ISQHFB}}(\tilde{q}) = E_{\text{IHFB}}(\tilde{q}) + \left(E_{\text{sys}}^{\mathcal{K},Q} - E_{\text{IHFB}}(\tilde{q}_{\text{GS}}) \right) \quad (\text{C.4})$$

Avec cette méthode, il n'y a plus d'effets d'appariement dans les rendements de fission. C'est cette méthode qui a été retenue pour la suppression de l'appariement. Dans un soucis de lisibilité, l'énergie obtenue avec cette méthode est noté $E_{\text{SHFB}}(\tilde{q})$ d'où $E_{\text{ISQHFB}}(\tilde{q}) = E_{\text{SHFB}}(\tilde{q})$.

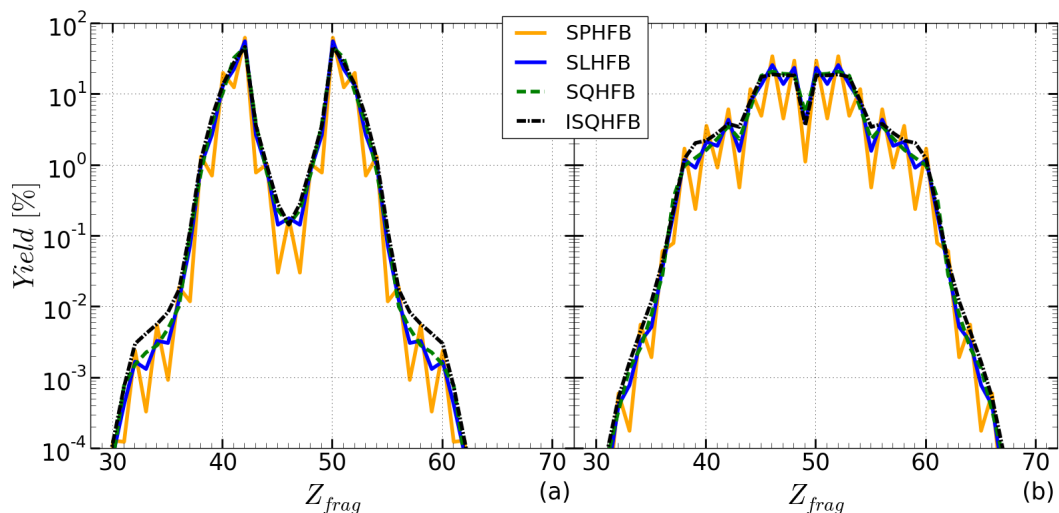


FIGURE C.4 – Rendements isotopiques en fonction de la méthode de suppression de l'appariement des énergies individuelles pour la réaction $^{235}\text{U}(n_{th}, f)$ (a) et $^{252}\text{Cf}(sf)$ (b).

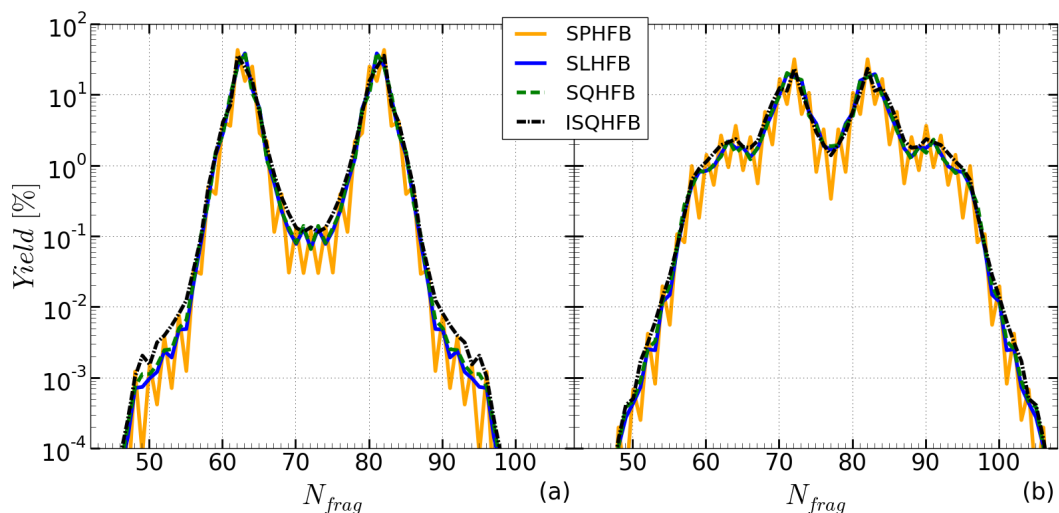


FIGURE C.5 – Rendements isotoniques en fonction de la méthode de suppression de l'appariement des énergies individuelles pour la réaction $^{235}\text{U}(n_{th}, f)$ (a) et $^{252}\text{Cf}(sf)$ (b).

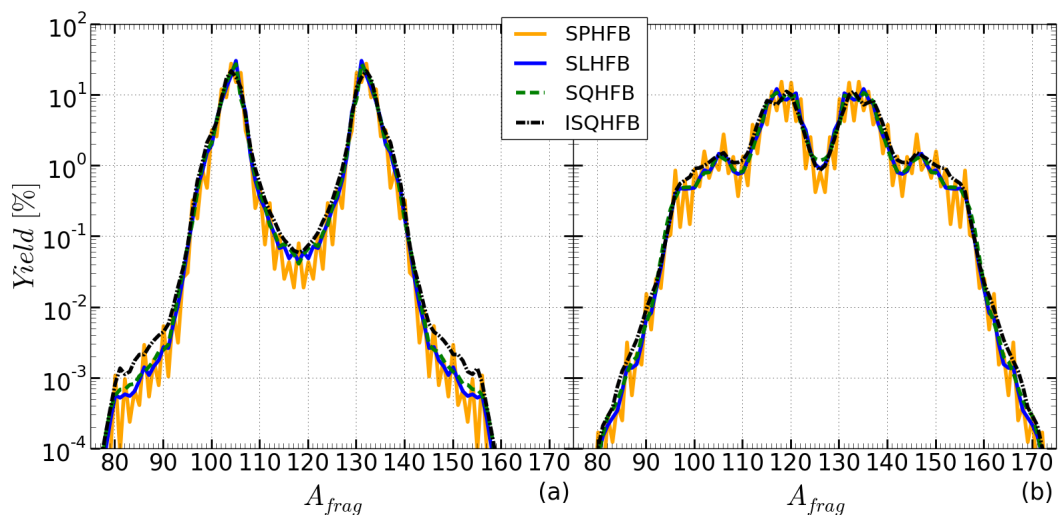


FIGURE C.6 – Rendements isobariques en fonction de la méthode de suppression de l'appariement des énergies individuelles pour la réaction $^{235}\text{U}(n_{th}, f)$ (a) et $^{252}\text{Cf}(sf)$ (b).

Bibliographie

- [1] H. Andersen, *Studies in History and Philosophy of Science Part B : Studies in History and Philosophy of Modern Physics* **27**, 463 (1996), ISSN 1355-2198.
- [2] P. Fong, *Phys. Rev.* **102**, 434 (1956).
- [3] S. Heinrich, Ph.D. thesis (2006), thèse de l'université Paris-Sud XI.
- [4] J.-F. Lemaître, S. Panebianco, J.-L. Sida, S. Hilaire, and S. Heinrich, *Phys. Rev. C* **92**, 034617 (2015).
- [5] H. Goutte, J. F. Berger, P. Casoli, and D. Gogny, *Phys. Rev. C* **71**, 024316 (2005).
- [6] B. D. Wilkins, E. P. Steinberg, and R. R. Chasman, *Phys. Rev. C* **14**, 1832 (1976).
- [7] W. Younes and D. Gogny, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 132501 (2011).
- [8] L. Bonneau, P. Quentin, and I. N. Mikhailov, *Phys. Rev. C* **75**, 064313 (2007).
- [9] N. Dubray, H. Goutte, and J.-P. Delaroche, *Phys. Rev. C* **77**, 014310 (2008).
- [10] C. Guet, C. Signarbieux, P. Perrin, H. Nifenecker, M. Asghar, F. Caïtucolli, and B. Leroux, *Nuclear Physics A* **314**, 1 (1979), ISSN 0375-9474.
- [11] S. Hilaire and M. Girod, *Eur. Phys. J. A* **33**, 237 (2007).
- [12] J. Dechargé and D. Gogny, *Phys. Rev. C* **21**, 1568 (1980).
- [13] URL <http://http://www-phynu.cea.fr/HFB-Gogny.htm>.
- [14] S. Goriely, N. Chamel, and J. M. Pearson, *Phys. Rev. C* **82**, 035804 (2010).
- [15] J. Blocki, J. Randrup, W. Swiatecki, and C. Tsang, *Annals of Physics* **105**, 427 (1977), ISSN 0003-4916.
- [16] S. Panebianco, J.-L. Sida, H. Goutte, J.-F. Lemaître, N. Dubray, and S. Hilaire, *Phys. Rev. C* **86**, 064601 (2012).
- [17] J. Randrup, P. Moller, and A. J. Sierk, *Phys. Rev. C* **84**, 034613 (2011).
- [18] G. Adeev and V. Pashkevich, *Nuclear Physics A* **502**, 405 (1989), ISSN 0375-9474.

- [19] A. V. Karpov, P. N. Nadtochy, D. V. Vanin, and G. D. Adeev, *Phys. Rev. C* **63**, 054610 (2001).
- [20] Y. Aritomo, S. Chiba, and F. Ivanyuk, *Phys. Rev. C* **90**, 054609 (2014).
- [21] J. Toke and W. Swiatecki, *Nuclear Physics A* **372**, 141 (1981), ISSN 0375-9474.
- [22] T. Kawano, P. Talou, I. Stetcu, and M. Chadwick, *Nuclear Physics A* **913**, 51 (2013), ISSN 0375-9474.
- [23] O. Litaize and O. Serot, *Phys. Rev. C* **82**, 054616 (2010).
- [24] M. Chadwick, M. Herman, P. Obložinský, M. Dunn, Y. Danon, A. Kahler, D. Smith, B. Pritychenko, G. Arbanas, R. Arcilla, et al., *Nuclear Data Sheets* **112**, 2887 (2011), ISSN 0090-3752, special Issue on ENDF/B-VII.1 Library.
- [25] C. Wagemans, *The Nuclear Fission Process* (Taylor & Francis, 1991), ISBN 9780849354342.
- [26] H. Baba, T. Saito, N. Takahashi, A. Yokoyama, T. Miyauchi, S. Mori, D. Yano, T. Hakoda, K. Takamiya, K. Nakanishi, et al., *Journal of Nuclear Science and Technology* **34**, 871 (1997).
- [27] C. Budtz-Jørgensen and H.-H. Knitter, *Nuclear Physics A* **490**, 307 (1988), ISSN 0375-9474.
- [28] Vorobyev, A.S., Shcherbakov, O.A., Gagarski, A.M., Val'ski, G.V., and Petrov, G.A., *EPJ Web of Conferences* **8**, 03004 (2010).
- [29] K.-H. Schmidt, S. Steinhauser, C. Bockstiegel, A. Grewe, A. Heinz, A. Jung-hans, J. Benlliure, H.-G. Clerc, M. de Jong, J. Muller, et al., *Nuclear Physics A* **665**, 221 (2000), ISSN 0375-9474.
- [30] D. C. Hoffman, *Journal of Alloys and Compounds* **213 - 214**, 67 (1994), ISSN 0925-8388, international Conference on Actinides.
- [31] V. E. Viola, K. Kwiatkowski, and M. Walker, *Phys. Rev. C* **31**, 1550 (1985).
- [32] A. N. Andreyev, J. Elseviers, M. Huyse, P. Van Duppen, S. Antalic, A. Barzakh, N. Bree, T. E. Cocolios, V. F. Comas, J. Diriken, et al., *Phys. Rev. Lett.* **105**, 252502 (2010).
- [33] S. Goriely, J.-L. Sida, J.-F. Lemaître, S. Panebianco, N. Dubray, S. Hilaire, A. Bauswein, and H.-T. Janka, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 242502 (2013).
- [34] S. Cohen and W. Swiatecki, *Annals of Physics* **19**, 67 (1962), ISSN 0003-4916.
- [35] K. Krane, *Introductory Nuclear Physics* (Wiley, 1988), ISBN 9780471859147.
- [36] R. Hasse and W. Myers, *Geometrical relationships of macroscopic nuclear physics*, Springer series in nuclear and particle physics (Springer-Verlag, 1988), ISBN 9783540175100.

- [37] S. Goriely, M. Samyn, and J. M. Pearson, *Phys. Rev. C* **75**, 064312 (2007).
- [38] P. Moller and J. R. Nix, *Atomic Data and Nuclear Data Tables* **26**, 165 (1981), ISSN 0092-640X.
- [39] S. Goriely, S. Hilaire, M. Girod, and S. Péru, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 242501 (2009).
- [40] S. Goriely, N. Chamel, and J. M. Pearson, *Phys. Rev. C* **88**, 024308 (2013).
- [41] J. Berger, M. Girod, and D. Gogny, *Computer Physics Communications* **63**, 365 (1991), ISSN 0010-4655.
- [42] A. Koning, S. Hilaire, and S. Goriely, *Nuclear Physics A* **810**, 13 (2008), ISSN 0375-9474.
- [43] S. Goriely, S. Hilaire, and A. J. Koning, *Phys. Rev. C* **78**, 064307 (2008).
- [44] W. D. Niven, *Philosophical Transactions of the Royal Society of London* **170**, 379 (1879).
- [45] G. Darwin, F. Darwin, E. Brown, F. Stratton, and J. Jackson, *Scientific Papers : Figures of equilibrium of rotating liquid and geophysical investigations. 1910*, Scientific Papers (Cambridge Univ. Press, 1910).
- [46] M. Abramowitz and I. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions*, Applied mathematics series (U.S. Department of Commerce, National Bureau of Standards, 1972), tenth printing ed.
- [47] A. Sommerfeld, *Zeitschrift für Physik* **47**, 1 (1928), ISSN 0044-3328.
- [48] H. A. Bethe, *Phys. Rev.* **50**, 332 (1936).
- [49] K. Huang, *Statistical mechanics* (Wiley, 1987), ISBN 9780471815181.
- [50] M. Trocheris, *Les modèles du noyau*, Bibliothèque des sciences et techniques nucléaires (Institut national des sciences et techniques nucléaires, 1959).

Notations

LD	goutte liquide (<i>Liquid Drop</i>)
KE	distribution en énergie cinétique des fragments en fonction de leur masse
TKE	énergie cinétique totale moyenne d'un système fissionnant
A	nombre de nucléons d'un noyau
\tilde{q}	moment quadrupolaire réduit d'un noyau
HFB	Hartree Fock Bogoliubov
E_{SX}	énergie individuelle X calée (<i>Shifted</i>) sur les masses expérimentales sans appariement
E_{SPX}	énergie individuelle X calée (<i>Shifted</i>) sur les masses expérimentales avec appariement (<i>Pairing</i>)
E_{LD}	énergie individuelle goutte liquide (<i>Liquid Drop</i>)
E_{HFB}	énergie individuelle HFB
AE	énergie disponible (<i>Available Energy</i>)
AS	nombre d'état disponible (<i>Available States</i>)

