

# Approches Microscopiques de la Dynamique Nucléaire

## *Applications aux réactions autour de la barrière*

Cédric Simenel et Benoît Avez

*DSM/DAPNIA/SPhN, CEA SACLAY, 91191 Gif-sur-Yvette Cedex, France*

Denis Lacroix

*GANIL, B.P. 55027, 14076 CAEN Cedex 5, France*

### Résumé

Ce cours introduit certaines approches microscopiques de la dynamique nucléaire avec pour objectif de décrire au mieux les collisions d'ions lourds à basse énergie. Nous présentons le formalisme et des applications pratiques de la théorie Hartree-Fock dépendante du temps (TDHF) qui est une approche de champ moyen dynamique basée sur l'approximation de particules indépendantes. À titre d'exemple, nous appliquons TDHF à l'étude de la fusion de noyaux sphériques ou déformés. Nous nous intéressons aussi au transfert de nucléons entre ions lourds sous la barrière. Ces études nous permettent d'identifier le cadre d'application de TDHF et notamment ses limitations, comme, par exemple, l'impossibilité de décrire la fusion par effet tunnel. Les approches de champ moyen dépendant du temps doivent être améliorées pour prendre en compte ces effets, ainsi que la dissipation et/ou les fluctuations quantiques. Certaines approches, dites "au-delà de TDHF" sont introduites. Elles incluent, par exemple, l'appariement nucléaire et/ou des termes de collision nucléon-nucléon. Finalement, nous discutons des progrès récents sur des méthodes exactes basées sur le concept de champ moyen stochastique.

### Abstract

This lecture introduces several microscopic approaches to nuclear dynamics. Our goal is to provide a good description of low energy heavy ions collisions. We present both formal aspects and practical applications of the time-dependent Hartree-Fock (TDHF) theory. The TDHF approach gives a mean field dynamics of the system under the assumption that particles evolve independently in their self-consistent average field. As an example, we study the fusion of both spherical and deformed nuclei with TDHF. We also show that nucleon transfer may occur between nuclei below the barrier. These studies allow us to specify the field of applications of TDHF in one hand, and, in the other hand, its intrinsic limitations: no fusion by tunneling, missing dissipative effects and/or quantum fluctuations. Time-dependent mean-field theories should be improved to properly account for these effects. Several approaches, generically named "beyond TDHF" are presented which account for instance for pairing and/or direct nucleon-nucleon collisions. Finally we discuss recent progresses in exact ab-initio methods based on the stochastic mean-field concept.

# Table des matières

<b>1</b>	<b>Introduction</b>	<b>4</b>
1.1	Généralités . . . . .	4
1.2	Approches microscopiques non relativistes . . . . .	4
1.3	Indépendantes, les particules ? . . . . .	4
1.3.1	particules indépendantes et corrélées . . . . .	5
1.3.2	champ moyen . . . . .	5
1.3.3	libre parcours moyen et justification du champ moyen en physique nucléaire . . . . .	5
1.3.4	symétries et corrélations . . . . .	6
1.3.5	au delà du champ moyen . . . . .	6
1.4	Interaction effective et Énergie Fonctionnelle de la Densité . . . . .	7
1.5	Formalisme du problème à N-corps quantique . . . . .	8
<b>2</b>	<b>La théorie de champ moyen dynamique</b>	<b>9</b>
2.1	Valeurs moyennes d'observables à un corps . . . . .	9
2.1.1	écriture générale . . . . .	9
2.1.2	matrice densité à un corps . . . . .	10
2.1.3	cas d'un système de particules indépendantes . . . . .	11
2.1.4	évolution : théorème d'Erhenfest . . . . .	12
2.2	La théorie Hartree-Fock dépendante du temps (TDHF) . . . . .	12
2.2.1	évolution exacte de $\rho^{(1)}$ . . . . .	12
2.2.2	champ moyen dépendant du temps . . . . .	14
2.3	Interaction effective de Skyrme . . . . .	15
2.4	Résolution de l'équation TDHF : aspects pratiques . . . . .	16
2.4.1	états Hartree-Fock . . . . .	16
2.4.2	méthode du temps imaginaire . . . . .	16
2.4.3	construction de l'état à deux noyaux . . . . .	18
2.4.4	mise en mouvement des noyaux . . . . .	19
2.4.5	évolution dynamique . . . . .	20
<b>3</b>	<b>Étude des réactions autour de la barrière avec TDHF</b>	<b>20</b>
3.1	Généralités sur la fusion . . . . .	21
3.1.1	définition de la fusion . . . . .	21
3.1.2	modèle à une dimension . . . . .	21
3.1.3	couplages entre mouvement relatif et degrés de liberté internes . . . . .	23
3.1.4	distribution de barrières . . . . .	24
3.2	Barrières de fusion et fonction d'excitation . . . . .	24
3.2.1	trajectoire des fragments . . . . .	24
3.2.2	barrière de fusion de deux noyaux sphériques . . . . .	24
3.2.3	barrières de fusion d'un noyau sphérique avec un noyau déformé . . . . .	25
3.2.4	fonction d'excitation . . . . .	29
3.3	Transfert de nucléons sous la barrière . . . . .	30
3.3.1	observation du transfert . . . . .	30
3.3.2	états décrivant les fragments . . . . .	31
3.4	Résumé : succès et limitations de TDHF . . . . .	32
<b>4</b>	<b>Théories dynamiques au delà de l'approximation de particules indépendantes</b>	<b>32</b>
4.1	Champ moyen dynamique avec appariement . . . . .	33
4.1.1	états produits de quasi-particules . . . . .	33
4.1.2	valeurs moyennes d'opérateurs sur un vide de quasi-particule . . . . .	34
4.1.3	équations TDHFB . . . . .	35

4.1.4	application de la théorie TDHFB . . . . .	36
4.2	Quand sort-on de l'image de (quasi)particules indépendantes? . . . . .	36
4.2.1	décomposition du Hamiltonien sur la base des états de particule (p) et de trou (h) . . . . .	37
4.2.2	limitation de la théorie de champ moyen . . . . .	38
4.3	Dynamique corrélée générale : la hiérarchie BBGKY . . . . .	38
4.4	La théorie de la matrice densité dépendant du temps (TDDM) . . . . .	39
4.5	Liens entre TDDM et TDHFB . . . . .	40
4.6	TDHF étendu et stochastique . . . . .	40
4.6.1	évolution moyenne : processus irréversibles dans TDHF étendu . . . . .	42
4.6.2	discussion sur TDHF stochastique . . . . .	42
4.7	Intégrale fonctionnelle et traitement exact du problème à $N$ corps d'un système corrélé avec des théories de champ moyen stochastique . . . . .	43
4.7.1	discussion générale . . . . .	43
4.7.2	techniques de l'intégrale fonctionnelle dans un cas modèle . . . . .	44
4.7.3	introduction aux intégrales fonctionnelles . . . . .	44
4.7.4	Hamiltonien général à $N$ corps . . . . .	46
4.8	Résumé . . . . .	46
<b>Remerciements</b>		<b>46</b>
<b>ANNEXES</b>		<b>47</b>
<b>A Rappels de mécanique quantique</b>		<b>47</b>
A.1	opérateurs de création et d'annihilation de particule . . . . .	47
A.2	états à $N$ particules identiques . . . . .	48
A.3	théorème de Wick . . . . .	48
A.4	base des états à $N$ particules . . . . .	49
A.5	fonction d'onde à $N$ particules . . . . .	49
<b>B Observables à un corps</b>		<b>50</b>
<b>C Matrice Densité</b>		<b>51</b>
<b>D Corrélations à deux corps</b>		<b>52</b>
<b>E Vide Hartree-Fock et de quasi-particule</b>		<b>52</b>
<b>F Lien entre les corrélations et les états de particules indépendantes</b>		<b>53</b>
<b>G Évolution en champ moyen avec le théorème de Thouless</b>		<b>54</b>

# 1 Introduction

## 1.1 Généralités

Les accélérateurs d'ions lourds ont permis l'étude des réactions nucléaires avec des noyaux stables. Les mesures expérimentales, de plus en plus précises, ont mis l'accent sur l'influence de la structure des noyaux et les mécanismes de réaction. C'est le cas par exemple de la fusion à basse énergie où les sections efficaces sont fortement affectées par la forme des noyaux et leur modes de vibration et de rotation. L'avènement des faisceaux radioactifs, notamment aux basses énergies typiques de SPIRAL2, ouvre des perspectives intéressantes pour l'étude de l'influence de nouvelles structures sur les réactions autour de la barrière. D'un point de vue théorique, les modèles dynamiques microscopiques sont tout indiqués pour ces études car ils permettent de prendre en compte à la fois la structure interne des noyaux et les mécanismes de réaction dans un même formalisme.

Le but de ce cours est de présenter l'état de l'art des modèles dynamiques microscopiques utilisés pour décrire les réactions entre ions lourds aux basses énergies. Nous nous intéressons en détail à la théorie de champ moyen dynamique dans la partie 2 et à ses applications pratiques dans la partie 3. Dans la partie 4, nous nous intéressons aux théories dites "au delà du champ moyen". Il est donc possible d'adopter plusieurs niveaux de lecture de ce cours. Le lecteur principalement intéressé par les applications pratiques pourra "sauter" les démonstrations de la partie 2 lorsqu'il y sera invité. La partie 4, très théorique, nécessite une bonne compréhension préalable de la partie 2 (champ moyen). On trouvera dans l'annexe A quelques rappels de seconde quantification.

## 1.2 Approches microscopiques non relativistes

Les exemples bien connus de théories microscopiques quantiques du noyau atomique sont les différentes variantes du modèle en couche, les approches de type champ moyen et au delà (comme Hartree-Fock-Bogoliubov, Random-Phase-Approximation, ou Generator-Coordinate-Method) [Rin80] ou encore des approches algébriques comme Interactive-Boson-Model [Iac91].

Pourquoi s'orienter vers une approche microscopique pour décrire les réactions entre noyaux ?

- L'étude du problème à N-corps quantique est un sujet de recherche passionnant en soi.
- La plupart des informations sur les noyaux sont obtenues grâce aux réactions nucléaires.
- On peut espérer pouvoir remonter à des informations sur l'interaction nucléon-nucléon dans le milieu.
- Les théories microscopiques ont un grand succès en structure nucléaire.
- Il est conceptuellement intéressant d'avoir un formalisme traitant de façon cohérente la structure et les mécanismes.
- Contrairement à beaucoup d'approches macroscopiques, il n'est, le plus souvent, pas nécessaire de choisir *a priori* le mécanisme à étudier.
- Le peu de paramètres ajustables ainsi que l'universalité donnent confiance quant au pouvoir prédictif de ces théories, ce qui est prometteur pour la physique des noyaux exotiques.

Enfin, les approches microscopiques citées ci-dessus ont en commun de se restreindre à un cadre non-relativiste, justifié par la faible vitesse des nucléons dans le noyau par rapport à la vitesse de la lumière :  $(v/c)^2 \sim 1/10$ .

## 1.3 Indépendantes, les particules ?

Il est courant d'entendre les termes "théorie de champ moyen" ou "particules indépendantes" ainsi que leur pendant "au delà du champ moyen" ou "états corrélés". Commençons par expliciter ces termes. On pourra alors définir l'approximation *zéro* de la physique nucléaire qui sert de point de départ à la plupart des théories microscopiques modernes.

### 1.3.1 particules indépendantes et corrélées

Considérons tout d'abord deux fermions identiques libres, un dans l'état  $|\mu\rangle$  et l'autre dans l'état  $|\nu\rangle$ . L'état de l'un *ne dépend pas* de l'état de l'autre (à l'antisymétrisation près), ils sont donc *indépendants*. L'état à deux particules s'écrit alors  $|\mu\nu\rangle = (|1 : \mu, 2 : \nu\rangle - |1 : \nu, 2 : \mu\rangle) / \sqrt{2}$ . Un tel état est appelé indifféremment *état de particules indépendantes* ou *déterminant de Slater* (voir annexe A).

A l'inverse, nous avons un *état de particules corrélées* si nous pouvons écrire :

- si une particule est dans l'état  $|\nu_1\rangle$ , alors l'autre est dans l'état  $|\mu_1\rangle$
- si une particule est dans l'état  $|\nu_2\rangle$ , alors l'autre est dans l'état  $|\mu_2\rangle$
- etc.

Un tel état s'écrit comme une somme de déterminants de Slater  $\sum_{\alpha} c_{\alpha} |\mu_{\alpha}\nu_{\alpha}\rangle$  où les  $c_{\alpha}$  sont les amplitudes de probabilité associées à chaque configuration.

La généralisation à un système à  $N$  particules est triviale. En utilisant la seconde quantification (voir annexe A), un déterminant de Slater s'écrit

$$|\phi_{\nu_1 \dots \nu_N}\rangle = \left( \prod_{i=1}^N \hat{a}_{\nu_i}^{\dagger} \right) |-\rangle. \quad (1)$$

et un état corrélé est une somme de déterminants de Slater  $|\psi\rangle = \sum_{\alpha} c_{\alpha} |\phi_{\alpha}\rangle$  (Eq. (136)) où  $\alpha$  représente le jeu de  $N$  états à une particule ayant servi à construire le déterminant de Slater  $|\phi_{\alpha}\rangle$ .

### 1.3.2 champ moyen

Une caractéristique des théories de champ moyen en physique nucléaire est de décrire un système auto-lié (*i.e.* sans potentiel extérieur) dans son repère *intrinsèque*<sup>1</sup>. Un déterminant de Slater construit à partir de fonctions d'onde de l'oscillateur harmonique ou d'états propres d'un potentiel de Wood-Saxon est une description possible d'un système lié localisé dans l'espace. On interprète alors ce potentiel harmonique ou de Wood-Saxon comme un *champ moyen* dans lequel "baigne" chaque particule. Le champ moyen simule en moyenne les interactions entre les particules. En d'autres termes, **chaque particule évolue librement dans le champ moyen généré par l'ensemble des autres particules**. Pour des électrons dans un atome, le potentiel extérieur du noyau vient s'ajouter au champ moyen.

Dans ce cours, nous introduirons des champs moyens plus évolués tels que les champs moyens Hartree-Fock (HF) et Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB). Le premier agit sur des états de particules indépendantes, le second sur des états plus complexes appelés états de quasi-particules indépendantes (voir Partie 4.1). Dans la partie 2.2, nous noterons que l'approximation de particules indépendantes implique que l'on ne garde que la partie champ moyen de l'interaction. Cependant, ce ne sont pas deux hypothèses qui s'ajoutent<sup>2</sup>. Enfin, bien que ce ne soit pas le sujet de ce cours, il est important de mentionner que l'introduction des interactions effectives rend les discussions sur les corrélations plus complexes [Sto07].

### 1.3.3 libre parcours moyen et justification du champ moyen en physique nucléaire

Est-il possible d'avoir une bonne description du noyau, voire des collisions entre noyaux, en faisant l'approximation de particules indépendantes ? La justification de l'approximation de champ moyen est largement basée sur l'observation que de nombreuses propriétés macroscopiques des noyaux varient doucement avec le nombre de nucléons : rayons, énergies de liaison...

<sup>1</sup>en opposition au repère du laboratoire.

<sup>2</sup>TDHF peut se montrer soit en négligeant les corrélations, soit en négligeant l'interaction résiduelle (partie de l'interaction qui ne peut se ramener à un champ moyen).

Basées sur ces observations, les théories de champ moyen ont été introduites avec succès. La solution de facilité, mais intellectuellement insatisfaisante, serait de le vérifier en confrontant les prédictions théoriques à l'expérience pour valider l'hypothèse de particules indépendantes *a posteriori*.

En fait, l'hypothèse de particules indépendantes en physique nucléaire se justifie par le fait que le libre parcours moyen d'un nucléon dans le noyau est au moins de l'ordre de la taille du noyau [Boh69]. Cela signifie qu'un nucléon a une forte probabilité de se propager d'un bord à l'autre du noyau sans entrer en collision avec d'autres nucléons. Ce phénomène est généré par le *blocage de Pauli* qui interdit à un nucléon, à la suite d'une collision avec un autre nucléon, de sauter vers un état déjà occupé. Il pourrait sauter dans un état non occupé d'énergie plus élevée, mais la conservation de l'énergie implique que l'autre nucléon aille dans un état d'énergie plus basse, donc probablement occupé, ce qu'interdit le principe de Pauli. Le fait que les états sous le niveau de Fermi soient pratiquement tous occupés implique donc que les nucléons évoluent presque sans collision dans le champ moyen.

### 1.3.4 symétries et corrélations

Petite remarque contre-intuitive : un état de particules indépendantes dans un champ moyen contient des corrélations. En effet, le champ moyen induit des *corrélations spatiales* entre les particules puisqu'il les localise. Mais pour inclure ces corrélations, il a fallu considérer un champ moyen qui brise explicitement l'invariance par translation. En guise d'illustration, raisonnons par l'absurde et cherchons un champ moyen qui ne brise pas l'invariance par translation. La seule solution est évidemment un champ moyen constant dans tout l'espace dont les états propres sont des ondes planes. On revient alors à un problème de particules libres qui ne sont plus piégées par le champ moyen. Il est donc impossible d'écrire un déterminant de Slater à partir de ces ondes planes qui décrivent un système lié et localisé.

On met ici le doigt sur une technique importante et très utilisée qui est d'inclure des corrélations en brisant des symétries (voir par exemple [Ben03]). On peut par exemple considérer un champ moyen déformé (brisure de l'invariance par rotation) pour inclure des corrélations à longue portée<sup>3</sup>. On peut aussi briser la symétrie de jauge (*i.e.* associée à la conservation du nombre de particules) avec un champ moyen qui mélange des états ayant des nombres de particules différents pour inclure les corrélations d'appariement (voir la partie 4.1). Dans ce dernier cas, et tout en restant dans une approximation de champ moyen, nous devons nous affranchir de l'approximation de particules indépendantes et considérer des états plus généraux appelés états de quasi-particules indépendantes (le lecteur noyé par tant de subtilités trouvera une aide précieuse dans le tableau 1 résumant les approches microscopiques présentées dans ce cours).

Enfin, précisons qu'en toute rigueur, il est nécessaire de *restaurer* les symétries brisées, par exemple à l'aide de méthodes de projection [Rin80, Bla86, Ben03].

### 1.3.5 au delà du champ moyen

Le champ moyen est souvent considéré comme l'approximation "zéro" du problème microscopique à partir duquel diverses extensions sont possibles (on en verra plusieurs au chapitre 4). Ces extensions *au delà du champ moyen* sont utiles, que ce soit en structure ou en dynamique nucléaire pour inclure un maximum de corrélations nécessaires à une description précise de la physique des noyaux. En effet, toutes les corrélations ne peuvent être incluses en brisant des symétries. Il est donc parfois nécessaire de s'affranchir de l'approximation de champ moyen en considérant que l'état à  $N$  particules est décrit non plus par un mais par une somme d'états de (quasi)particules indépendantes.

---

<sup>3</sup>Si un noyau a une forme de cigare, la présence d'un nucléon à un bout du cigare rend probable la présence d'autres nucléons à l'autre bout du cigare. Il s'agit de corrélations à longue portée car elles affectent le noyau dans son ensemble.

La nomenclature étant ce qu'elle est, nous réserverons le terme *état non corrélé* à un déterminant de Slater, bien qu'on ait vu qu'il soit possible d'y inclure certaines corrélations en brisant des symétries. Un *état corrélé* quant à lui, par opposition à un état de particules indépendantes est une somme de déterminants de Slater.

Le tableau 1 résume les différentes approches abordées dans ce cours et le type de corrélations qu'elles incluent.

nom	approximations	espace variationnel	observables accessibles
TDHF	champ moyen	part. indép.	1 corps
TDHF-Bogoliubov	c.m. + appariement	quasipart. indép.	1 corps généralisées
Extended-TDHF	c.m. + collision (dissipation)	états corrélés	1 corps
Stochastic-TDHF	c.m. + collision (dissipation+fluctuations)	états corrélés	1 corps
Time Dependent Density Matrix	c.m. + corrélations à 2 corps	états corrélés	1 et 2 corps
Stochastic Mean Field (intégrale fonctionnelle)	exact (erreur statistique)	états corrélés	toutes

TAB. 1 – résumé des approches microscopiques présentées dans ce cours

## 1.4 Interaction effective et Énergie Fonctionnelle de la Densité

Nous choisissons dans ce cours une approche assez classique du problème à  $N$ -corps quantique nucléaire, à savoir nous utilisons explicitement un Hamiltonien microscopique et introduisons la théorie Hartree-Fock. Il doit toutefois être noté que l'utilisation des interactions nucléaires "nues" dans HF ne donnera pas de bons résultats, voire diverge. L'introduction des forces effectives fut une avancée majeure. Toutefois, ces interactions ne sont pas directement connectées à l'interaction nue. De plus, elles incluent des effets (notamment de milieu) qui vont au delà de la théorie HF. Dans ce sens, les théories de champ moyen en physique nucléaire ont de nombreux aspects communs avec les théories de la fonctionnelle de la densité (DFT) en matière condensée. Toutefois, en physique nucléaire, le concept d'interaction effective est souvent gardé. Les plus répandues sont l'interaction de Skyrme, de portée nulle, et de Gogny, de portée finie. Les applications de ce cours utilisent l'interaction de Skyrme, plus facile à traiter numériquement. L'intérêt de ces interactions effectives est qu'elles permettent de construire des Énergies Fonctionnelles de la Densité (EDF) à la fois simples et réalistes  $E[\rho]$  où  $\rho$  est la matrice densité à un corps. Notons enfin que certaines approches modernes considèrent la fonctionnelle et non plus l'interaction comme ingrédient de base de la théorie [Dob07, Ben07].

## 1.5 Formalisme du problème à N-corps quantique

L'évolution de l'état à N-corps  $|\psi\rangle$  du système est donnée par l'équation de Schroedinger dépendant du temps

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle. \quad (2)$$

Cette équation est équivalente au principe variationnel qui stipule que l'action est stationnaire lors de l'évolution entre l'instant initial  $t_0$  et l'instant final  $t_1$

$$\delta \left[ \int_{t_0}^{t_1} dt \langle \psi | \hat{H} - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \psi \rangle \right] = 0. \quad (3)$$

Le Hamiltonien d'un système de  $N$  nucléons en interaction se décompose en un terme cinétique et un terme d'interaction à deux corps (nous ne considérerons pas ici les interactions à trois corps ou plus)

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \frac{\hat{p}(i)^2}{2m} + \sum_{i>j=1}^N \hat{v}(i, j). \quad (4)$$

En seconde quantification, ce Hamiltonien s'écrit

$$\hat{H} = \sum_{ij} t_{ij} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \bar{v}_{ijkl} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_k \quad (5)$$

où les éléments de matrice de l'opérateur énergie cinétique et ceux associés à l'interaction s'écrivent

$$t_{ij} = \frac{1}{2m} \langle i | \hat{p}^2 | j \rangle \quad (6)$$

$$\bar{v}_{ijkl} = v_{ijkl} - v_{ijlk} \quad (7)$$

$$v_{ijkl} = \langle 1 : i, 2 : j | \hat{v}(1, 2) | 1 : k, 2 : l \rangle. \quad (8)$$

L'état  $|1 : i, 2 : j\rangle$  n'est pas antisymétrisé. Il signifie que la particule 1 est dans l'état  $|i\rangle$  et la particule 2 dans l'état  $|j\rangle$  (voir annexe A).

Voici donc le problème posé. Même si nous étions capables de résoudre l'Eq. (2) sans faire d'approximation, ce qui n'est pas le cas à l'heure actuelle, nous obtiendrions alors toute l'information possible sur l'évolution du système, ce qui est bien plus que ce dont nous avons réellement besoin, par exemple pour calculer une section efficace de fusion. Ce serait donc comme écraser une mouche avec un marteau. La construction d'un modèle microscopique doit donc être guidée par deux principes :

- ne chercher à décrire que ce dont nous avons vraiment besoin,
- et faire les approximations pertinentes pour le problème considéré.

Un schéma d'approximation possible consiste à restreindre le sous-espace des états accessibles pour l'écriture du principe variationnel de l'Eq. (3) [Bla86]. Ce choix de sous-espace est crucial car il constitue souvent l'essentiel des hypothèses physiques de la théorie.

Parmi les modèles microscopiques, la théorie Hartree-Fock Dépendante du Temps (TDHF) est l'une des plus utilisées. Il s'agit d'une théorie de champ moyen dont le seul ingrédient phénoménologique est l'interaction effective entre les nucléons. TDHF peut s'obtenir, par exemple, en restreignant le principe variationnel de l'Eq. (3) au sous-espace des états de particules indépendantes.

Après une présentation de la théorie TDHF, nous nous intéresserons à des applications aux réactions autour de la barrière. Les succès et limitations de TDHF nous indiqueront des pistes à suivre pour améliorer la description de la dynamique de systèmes corrélés. Ainsi, un ensemble de techniques permettant d'aller au delà de l'approximation de champ moyen seront discutées.



## 2 La théorie de champ moyen dynamique

Nous devons donc commencer par répondre aux deux questions :

- De quelle information avons nous besoin pour décrire une réaction nucléaire ?
- Quelles approximations devons nous faire pour pouvoir résoudre le problème ?

La connaissance des trajectoires des fragments après une collision, de leur forme ou encore de leur nombre de particules permet déjà une description fine des mécanismes en jeu. Ces quantités sont des observables à un corps (voir annexe B) et il semble donc naturel, dans un premier temps de se limiter à décrire leur évolution. Nous avons répondu à la première question. De plus, nous verrons très vite lors de l'écriture des équations d'évolution des observables à un corps que le problème n'est aisément soluble qu'au prix de l'approximation de particules indépendantes, ce qui répondra à la seconde question.

Nous commencerons donc par écrire l'évolution des observables à un corps à partir de l'équation de Schroedinger. Pour cela, nous introduirons la matrice densité à un corps. Ensuite, nous simplifierons le problème à l'aide de l'approximation de particules indépendantes. Nous spécifierons alors l'interaction effective de Skyrme utilisée par la suite. Nous détaillerons enfin les aspects pratiques de la résolution des équations TDHF dans l'espace des coordonnées.

Le lecteur non intéressé par les détails techniques peut passer ce qui suit et reprendre à l'Eq. (34) qui donne l'évolution exacte de la matrice densité à un corps.

### 2.1 Valeurs moyennes d'observables à un corps

#### 2.1.1 écriture générale

Soit un état à  $N$  particules  $|\psi\rangle$  (corrélées ou non) et un opérateur à un corps  $\hat{F} = \sum_{i=1}^N \hat{f}(i)$  (voir Eq. (145)). L'expression des fonctions d'onde à  $N$  particules (Eq. (138)) et la relation de fermeture (Eq. (144)) permettent d'écrire la valeur moyenne de  $\hat{F}$  sur  $|\psi\rangle$

$$\begin{aligned} \langle \hat{F} \rangle_\psi &= \langle \psi | \frac{1}{N!} \int d\xi_1 \dots d\xi_N |\xi_1 \dots \xi_N\rangle \langle \xi_1 \dots \xi_N | \sum_{i=1}^N \hat{f}(i) \frac{1}{N!} \int d\xi'_1 \dots d\xi'_N |\xi'_1 \dots \xi'_N\rangle \langle \xi'_1 \dots \xi'_N | \psi \rangle \\ &= \frac{1}{N!} \int d\xi_1 \dots d\xi_N d\xi'_1 \dots d\xi'_N \psi^*(\xi_1 \dots \xi_N) \psi(\xi'_1 \dots \xi'_N) \sum_{i=1}^N \langle \xi_1 \dots \xi_N | \hat{f}(i) | \xi'_1 \dots \xi'_N \rangle \end{aligned} \quad (9)$$

où nous avons regroupé les degrés de liberté d'espace, de spin et d'isospin sous la notation  $\xi \equiv (\mathbf{r} s \tau)$ . Le théorème de Wick (voir annexe A.3) permet de calculer le dernier terme

$$\langle \xi_1 \dots \xi_N | \hat{f}(i) | \xi'_1 \dots \xi'_N \rangle = \begin{vmatrix} \langle \xi_1 | \xi'_1 \rangle & \dots & \langle \xi_1 | \xi'_{i-1} \rangle & \langle \xi_1 | \hat{f} | \xi'_i \rangle & \langle \xi_1 | \xi'_{i+1} \rangle & \dots & \langle \xi_1 | \xi'_N \rangle \\ \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ \langle \xi_N | \xi'_1 \rangle & \dots & \langle \xi_N | \xi'_{i-1} \rangle & \langle \xi_N | \hat{f} | \xi'_i \rangle & \langle \xi_N | \xi'_{i+1} \rangle & \dots & \langle \xi_N | \xi'_N \rangle \end{vmatrix}. \quad (10)$$

L'antisymétrie permet de ne considérer l'action de  $\hat{f}$  que sur un seul indice dans l'intégrale de l'Eq. (9) (on choisit l'indice 1). En notant  $f(\xi, \xi') = \langle \xi | \hat{f} | \xi' \rangle$  les éléments de matrice de  $f$ , nous obtenons

$$\langle \hat{F} \rangle_\psi = N \int d\xi d\xi' d\xi_2 \dots d\xi_N \psi^*(\xi \xi_2 \dots \xi_N) \psi(\xi' \xi_2 \dots \xi_N) f(\xi, \xi'). \quad (11)$$

### 2.1.2 matrice densité à un corps

Il est très pratique d'introduire la matrice densité à un corps  $\rho^{(1)}$  associée à l'état  $|\psi\rangle$  dont les éléments de matrice dans la base  $\{\xi\}$  s'écrivent

$$\rho^{(1)}(\xi, \xi') = N \int d\xi_2 \dots d\xi_N \psi^*(\xi' \xi_2 \dots \xi_N) \psi(\xi \xi_2 \dots \xi_N) \quad (12)$$

qui permet de simplifier l'équation (11)

$$\langle \hat{F} \rangle_\psi = \int d\xi d\xi' \rho^{(1)}(\xi', \xi) f(\xi, \xi') = \text{Tr}[\rho^{(1)} f]. \quad (13)$$

Nous voyons ainsi que toute l'information nécessaire au calcul de la valeur moyenne d'une observable à un corps est contenue dans la matrice densité à un corps. Celle-ci peut être définie pour n'importe quel état à  $N$  particules<sup>4</sup>. Sauf indication contraire, nous considérons toujours la densité à un corps dans la suite de la partie 2 et omettons l'exposant <sup>(1)</sup> dans la notation.

Les éléments de la matrice densité à un corps  $\rho$  peuvent s'écrire en utilisant la seconde quantification (voir Eq. (151))

$$\rho_{ij} = \langle \psi | \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i | \psi \rangle = \langle \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i \rangle_\psi. \quad (14)$$

En effet, on retrouve l'Eq. (12) en utilisant les Eqs. (134), (138) et (144)

$$\begin{aligned} \rho(\xi, \xi') &= \langle \hat{a}^\dagger(\xi') \hat{a}(\xi) \rangle_\psi \\ &= \frac{1}{N!} \int d\xi_1 \dots d\xi_N d\xi'_1 \dots d\xi'_N \psi^*(\xi_1 \dots \xi_N) \psi(\xi'_1 \dots \xi'_N) \langle \xi_1 \dots \xi_N | \hat{a}^\dagger(\xi') \hat{a}(\xi) | \xi'_1 \dots \xi'_N \rangle \\ &= \frac{N^2}{N!} \int d\xi_2 \dots d\xi_N d\xi'_2 \dots d\xi'_N \psi^*(\xi' \xi_2 \dots \xi_N) \psi(\xi \xi_2 \dots \xi_N) \langle \xi_2 \dots \xi_N | \xi'_2 \dots \xi'_N \rangle \\ &= N \int d\xi_2 \dots d\xi_N \psi^*(\xi' \xi_2 \dots \xi_N) \psi(\xi \xi_2 \dots \xi_N). \end{aligned} \quad (15)$$

Nous verrons au chapitre 2.4 que dans un calcul TDHF dans l'espace des coordonnées, les éléments fondamentaux du calcul sont les fonctions d'onde à une particule. Pour les faire apparaître, utilisons les équations (122) et (123)

$$\rho(\mathbf{r} s \tau, \mathbf{r}' s' \tau') = \langle \psi | \hat{a}^\dagger(\mathbf{r}' s' \tau') \hat{a}(\mathbf{r} s \tau) | \psi \rangle = \sum_{ij} \langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j \rangle_\psi \varphi_i^{s' \tau'}(\mathbf{r}') \varphi_j^{s \tau}(\mathbf{r}) \quad (16)$$

où la fonction d'onde à une particule  $\varphi_i^{s \tau}(\mathbf{r})$  est définie dans l'Eq. (117).

Notons qu'il est toujours possible d'écrire la matrice densité à un corps sous forme d'un opérateur dans l'espace de Hilbert des états à une particule<sup>5</sup> [Rin80]

$$\hat{\rho} = \sum_{ij} \rho_{ij} |i\rangle \langle j|. \quad (17)$$

La particularité de cet opérateur est qu'il dépend explicitement de l'état du système  $|\psi\rangle$ . Ainsi, dans un problème dynamique tel que le traitement d'une collision nucléaire, la matrice densité dépend du temps.

<sup>4</sup>Notons qu'il est possible de généraliser au cas d'observables à  $M$ -corps qui peuvent se calculer à l'aide de la matrice densité à  $M$ -corps (voir annexe C).

<sup>5</sup>Notons bien que  $\hat{\rho}$  n'est pas un opérateur à un corps comme défini dans l'annexe B puisqu'il n'agit pas dans l'espace de Hilbert à  $N$  particules, mais sur des états à une particule uniquement.

Revenons aux quantités physiques d'intérêt, à savoir les valeurs moyennes d'observables à un corps. L'usage de la seconde quantification permet de retrouver le résultat de l'équation (13) pour n'importe quelle valeur moyenne d'observable à un corps plus rapidement à partir de l'Eq. (145)

$$\langle \hat{F} \rangle_\psi = \langle \psi | \sum_{ij} f_{ij} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j | \psi \rangle = \sum_{ij} f_{ij} \rho_{ji} = \text{Tr}(\rho f). \quad (18)$$

On voit alors que pour étudier l'évolution de ces quantités, il est nécessaire de connaître l'évolution de la matrice densité à un corps du système.

### 2.1.3 cas d'un système de particules indépendantes

Rappelons que nous serons vite amenés à faire l'approximation de particules indépendantes. Prenons donc les devants et explicitons la matrice densité à un corps  $\rho$  dans le cas particulier d'un système de  $N$  particules indépendantes dans l'état  $|\phi\rangle \equiv |\phi_{\nu_1 \dots \nu_N}\rangle$ . Dans l'annexe E, nous montrons qu'un Slater est un vide (appelé vide HF) pour des opérateurs qui sont des combinaisons linéaires de  $\hat{a}^\dagger$  et  $\hat{a}$ . Nous sommes donc dans le cadre d'application du théorème de Wick. Le calcul des contractions est effectué dans l'annexe F et permet de montrer (Eq. (165)) que seuls les états occupés contribuent à la somme de l'Eq. (16). Nous obtenons alors

$$\rho(\mathbf{r}s\tau, \mathbf{r}'s'\tau') = \sum_{n=1}^N \varphi_{\nu_n}^{s'\tau'*}(\mathbf{r}') \varphi_{\nu_n}^{s\tau}(\mathbf{r}). \quad (19)$$

On voit donc que la connaissance des fonctions d'onde occupées suffit à caractériser entièrement la matrice densité à un corps pour un système de particules indépendantes. En fait, dans ce cas particulier, on peut montrer que *toute* l'information sur le système est contenue dans la matrice densité à un corps. En effet, il n'y a pas de corrélation et la matrice densité à  $M$ -corps (voir annexe C) s'exprime alors comme un produit antisymétrisé de matrice densité à un corps. Cela montre que, dans ce cas, toute l'information sur le système est contenue dans la matrice densité à un corps<sup>6</sup>.

Dans un problème dynamique où l'état est contraint à rester un état de particules indépendantes (cas de la théorie TDHF présentée au chapitre 2.2), il suffit donc de suivre l'évolution des états à une particule occupés pour caractériser l'évolution de la matrice densité.

Notons enfin une propriété utile. On montre aisément que, pour un état de particules indépendantes, on a la propriété sur la matrice densité du système  $\rho^2 = \rho$ . En effet, l'opérateur associé à la matrice densité défini à l'Eq. (17) s'écrit alors

$$\hat{\rho} = \sum_{n=1}^N |\nu_n\rangle \langle \nu_n|. \quad (20)$$

Dans ce cas,  $\hat{\rho}$  est un projecteur dans l'espace de Hilbert des états à une particule occupés qui ont servi à la construction de  $|\phi_{\nu_1 \dots \nu_N}\rangle$  puisque l'on a

$$\hat{\rho}^2 = \sum_{m,n=1}^N |\nu_m\rangle \langle \nu_m | \nu_n\rangle \langle \nu_n| = \hat{\rho}. \quad (21)$$

Cette dernière relation est *équivalente* avec le fait que l'état  $|\phi\rangle$  est un état de particules indépendantes.

---

<sup>6</sup>Voir annexes D et F pour le cas de la matrice densité à 2 corps.

### 2.1.4 évolution : théorème d'Erhenfest

Nous nous intéressons à l'évolution de valeurs moyennes d'observables à un corps. C'est par exemple ce que nous ferons lorsque nous chercherons à retracer la trajectoire des centres de masse des noyaux. En partant de l'équation de Schroedinger (Eq. (2)) et de sa transposée pour un état quelconque à  $N$  particules  $|\psi\rangle$ , on peut écrire, pour une observable à un corps  $\hat{F}$ ,

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle \hat{F} \rangle_\psi = \left( \frac{i}{\hbar} \langle \psi | \hat{H} \right) \hat{F} |\psi\rangle + \langle \psi | \hat{F} \left( \frac{-i}{\hbar} \hat{H} |\psi\rangle \right) = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{F}] \rangle_\psi \quad (22)$$

ce qui n'est autre que le théorème d'Ehrenfest appliqué à  $\hat{F}$ . Notons ici qu'aucune approximation n'a été faite, à savoir que l'état  $|\psi\rangle$  peut être un état corrélé, et que  $\hat{H}$  est le Hamiltonien microscopique initial (voir Eqs. (4) et (5)). Comme  $\hat{F}$  se décompose comme une somme linéaire de  $\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j$ , il suffit de suivre les valeurs moyennes  $\langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j \rangle$  qui ne sont autres que les composantes de  $\rho$ .

Pour un opérateur indépendant du temps, on a, d'après l'Eq. (18),

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j \rangle_\psi = \frac{\partial}{\partial t} \rho_{ji} = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j] \rangle_\psi. \quad (23)$$

## 2.2 La théorie Hartree-Fock dépendante du temps (TDHF)

### 2.2.1 évolution exacte de $\rho^{(1)}$

Dans cette théorie, on décide de décrire "au mieux" les observables à un corps. Pour se faire, nous ferons une seule approximation, qui sera de considérer l'état du système comme un état de particules indépendantes à tout instant. On verra apparaître le fait que cette approximation implique tout naturellement une théorie de champ moyen. D'autres démonstrations de l'équation TDHF que celle proposée ici sont possibles. Nous avons choisi de partir du théorème d'Erhenfest car la démonstration est alors à la fois élégante, simple et rapide.

En remplaçant l'expression du Hamiltonien (Eq. (5)) dans l'équation d'évolution des  $\rho_{ji}$  (Eq. (23)), nous obtenons

$$i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j \rangle_\psi = \sum_{kl} t_{kl} \langle [\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j, \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l] \rangle_\psi + \frac{1}{4} \sum_{klmn} \bar{v}_{klmn} \langle [\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j, \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_n \hat{a}_m] \rangle_\psi. \quad (24)$$

Calculons tout d'abord le terme associé à l'énergie cinétique. En utilisant les Eqs. (120) et (121), on montre que

$$\begin{aligned} \langle [\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j, \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l] \rangle_\psi &= \langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l \rangle_\psi - \langle \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j \rangle_\psi \\ &= \delta_{jk} \langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_l \rangle_\psi - \langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_j \hat{a}_l \rangle_\psi - \delta_{il} \langle \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_j \rangle_\psi + \langle \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_j \rangle_\psi \\ &= \delta_{jk} \rho_{li} - \delta_{il} \rho_{jk}. \end{aligned} \quad (25)$$

Le terme associé à l'énergie cinétique s'écrit alors

$$\sum_{kl} t_{kl} \langle [\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j, \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l] \rangle_\psi = \sum_k (t_{jk} \rho_{ki} - t_{ki} \rho_{jk}). \quad (26)$$

Pour le terme d'interaction, nous devons tout d'abord exprimer la valeur moyenne du commutateur

$$\begin{aligned} \langle [\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j, \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_n \hat{a}_m] \rangle_\psi &= \langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_n \hat{a}_m \rangle_\psi - \langle \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_n \hat{a}_m \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j \rangle_\psi \\ &= \langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_n \hat{a}_m \rangle_\psi \delta_{jk} - \langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_n \hat{a}_m \rangle_\psi \delta_{jl} + \langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_j \hat{a}_n \hat{a}_m \rangle_\psi \\ &\quad - \langle \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_n \hat{a}_j \rangle_\psi \delta_{mi} + \langle \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_m \hat{a}_j \rangle_\psi \delta_{ni} - \langle \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_n \hat{a}_m \hat{a}_j \rangle_\psi. \end{aligned} \quad (27)$$

Les deux termes avec 6 créateurs / annihilateurs s'annulent. Les autres termes sont des éléments de la matrice densité à deux corps. Celle-ci se décompose en une somme d'un produit de matrices densité à un corps  $\rho^{(1)}$  et d'un terme non trivial  $C^{(2)}$ , encore appelé *matrice de corrélations* (voir annexe D), qui ne peut pas se décomposer comme un simple produit d'opérateurs à un corps. En utilisant cette décomposition (Eq. (154)), le commutateur de l'Eq. (27) devient

$$\begin{aligned} \left\langle \left[ \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j, \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_n \hat{a}_m \right] \right\rangle_\psi &= (\rho_{mi}\rho_{nl} - \rho_{ml}\rho_{ni} + C_{mnil}) \delta_{jk} + (\rho_{mk}\rho_{ni} - \rho_{mi}\rho_{nk} + C_{nmik}) \delta_{jl} \\ &\quad + (\rho_{jl}\rho_{nk} - \rho_{jk}\rho_{nl} + C_{njkl}) \delta_{mi} + (\rho_{jk}\rho_{ml} - \rho_{jl}\rho_{mk} + C_{mjkl}) \delta_{ni} \end{aligned} \quad (28)$$

où les exposants <sup>(1)</sup> et <sup>(2)</sup> de l'équation (154) ont été omis pour être concis. Le terme associé à l'interaction à deux corps dans l'Eq. (24) s'écrit alors

$$\begin{aligned} \frac{1}{4} \sum_{klmn} \bar{v}_{klmn} \left\langle \left[ \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j, \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_n \hat{a}_m \right] \right\rangle_\psi &= \frac{1}{2} \sum_{klm} [\bar{v}_{jklm} (\rho_{li}\rho_{mk} - \rho_{lk}\rho_{mi} + C_{lmik}) \\ &\quad + \bar{v}_{klim} (\rho_{jl}\rho_{mk} - \rho_{jk}\rho_{ml} + C_{mjkl})] \\ &= \sum_{klm} \left[ \bar{v}_{jklm} \left( \rho_{li}\rho_{mk} + \frac{1}{2} C_{lmik} \right) \right. \\ &\quad \left. - \bar{v}_{klim} \left( \rho_{jk}\rho_{ml} + \frac{1}{2} C_{jmkl} \right) \right] \end{aligned} \quad (29)$$

où on a utilisé  $\bar{v}_{klmn} = -\bar{v}_{klnm} = -\bar{v}_{lkmn}$  et les mêmes relations<sup>7</sup> pour  $C^{(2)}$ . On peut finalement réécrire ce terme comme

$$\sum_k (U[\rho]_{jk} \rho_{ki} - U[\rho]_{ki} \rho_{jk}) + \frac{1}{2} \sum_{klm} (\bar{v}_{jklm} C_{kmil} - \bar{v}_{klim} C_{jmkl}) \quad (30)$$

où  $U[\rho]$  est le champ moyen de Hartree-Fock. Il s'écrit comme une trace partielle

$$U[\rho]_{ij} = \sum_{kl} \bar{v}_{ikjl} \rho_{lk} = \langle i | \text{Tr}_2 \{ \bar{v}(1, 2) \rho(2) \} | j \rangle = \text{Tr}_2 \{ \bar{v}(1, 2) \rho(2) \}_{ij}. \quad (31)$$

La trace est effectuée sur les degrés de liberté de la particule 2 tandis que les indices  $i$  et  $j$  indiquent ceux de la particule 1. L'objet  $U[\rho]$  obtenu après la trace partielle est donc une matrice représentant un opérateur à un corps. Dans la suite nous écrirons souvent  $\bar{v}_{12} \equiv \bar{v}(1, 2)$  et  $\rho_2 \equiv \rho(2)$  par soucis de compacité. L'équation (31) devient alors  $U[\rho]_1 = \text{Tr}_2 \{ \bar{v}_{12} \rho_2 \}$ .

Le deuxième terme de l'équation (30) correspond aux corrélations. Il fait intervenir lui aussi une trace partielle puisque

$$\sum_{klm} \bar{v}_{ilkm} C_{kmjl} = \text{Tr}_2 \{ \bar{v}_{12} C_{12} \}_{ij}. \quad (32)$$

En utilisant les équations (14), (24), (26), (30) et (32) on obtient l'équation d'évolution des éléments de la matrice densité à un corps

$$\begin{aligned} i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \rho_{ji} &= \sum_k [(t_{jk} + U_{jk}[\rho]) \rho_{ki} - (t_{ki} + U_{ki}[\rho]) \rho_{jk}] \\ &\quad + \frac{1}{2} [ \text{Tr}_2 \{ \bar{v}_{12} C_{12} \}_{ji} - \text{Tr}_2 \{ C_{12} \bar{v}_{12} \}_{ji} ]. \end{aligned} \quad (33)$$

---

<sup>7</sup> $C^{(2)}$  est antisymétrique car  $\rho^{(2)}$  l'est, ce qui découle directement des relations d'anticommutation (120) et de la définition de  $\rho^{(2)}$  (Eq. (151))

L'antisymétrie de  $\bar{v}_{12}$  et  $C_{12}$  implique  $\text{Tr}_2\{\bar{v}_{12} C_{12}\} = 2 \text{Tr}_2\{v_{12} C_{12}\}$  et conduit à

$$i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \rho_{ji} = [h[\rho], \rho]_{ji} + \text{Tr}_2[v_{12}, C_{12}]_{ji}. \quad (34)$$

où

$$h[\rho] = t + U[\rho] \quad (35)$$

est la matrice représentant le Hamiltonien Hartree-Fock. Notons que cette équation est exacte car jusqu'à présent nous n'avons fait aucune approximation.

### 2.2.2 champ moyen dépendant du temps

Dans la théorie TDHF, on néglige les corrélations  $C^{(2)}$  de la matrice densité à deux corps (Eq. (154)) à tout instant  $t$ , ce qui revient à considérer que l'état du système est et reste un état de particules indépendantes. Ce dernier point est montré dans l'annexe F. L'évolution de la matrice densité à un corps  $\rho$  associée à cet état est donnée par l'équation TDHF qui s'obtient en négligeant le terme de corrélation dans l'équation (34)

$$i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \rho = [h[\rho], \rho]. \quad (36)$$

Dans ce chapitre, nous ne considérons plus que des systèmes de particules indépendantes.

Dans l'Eq. (36),  $h$  et  $\rho$  sont des matrices représentant les opérateurs  $\hat{h}$  et  $\hat{\rho}$  qui agissent dans l'espace de Hilbert des états à une particule. Leurs actions sur des états à une particule s'écrivent

$$\hat{\rho}|i\rangle = \sum_j \rho_{ji} |j\rangle \quad (37)$$

$$\hat{h}|i\rangle = \sum_j h[\rho]_{ji} |j\rangle \quad (38)$$

où  $\{|i\rangle\}$  est une base quelconque de cet espace avec la relation de fermeture  $\sum_i |i\rangle\langle i| = \hat{1}$ . L'équation (36) peut s'écrire pour des opérateurs

$$i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho} = [\hat{h}[\rho], \hat{\rho}]. \quad (39)$$

Faire l'approximation de particules indépendantes revient donc à ne garder de l'interaction que la partie champ moyen. Celle-ci dépend explicitement de la matrice densité à un corps du système. Cela revient à négliger l'interaction résiduelle  $\hat{V}_{res} = \sum_{i < j=1}^N \hat{v}(i, j) - \sum_{i=1}^N \hat{U}[\rho](i)$ . Dans la théorie TDHF, les particules évoluent donc indépendamment les unes des autres dans un champ moyen auto-cohérent (*i.e.* qui dépend de l'état du système, ici de sa matrice densité) généré par l'ensemble des particules. Aller au delà de TDHF signifie que l'on prend en compte une partie des corrélations, par exemple l'appariement, et par là même une partie de l'interaction résiduelle (voir chapitre 4.1).

L'équation (39) préserve la propriété  $\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$ . On a donc à tout instant  $\hat{\rho} = \sum_{n=1}^N |\nu_n\rangle\langle\nu_n|$  (Eq. (20)). L'équation TDHF peut alors se réécrire sous forme de  $N$  équations couplées par l'auto-cohérence du champ moyen

$$i \hbar \frac{\partial}{\partial t} |\nu_n(t)\rangle = \hat{h}[\rho(t)] |\nu_n(t)\rangle, \quad 1 \leq n \leq N \quad (40)$$

En effet, les Eqs. (40) mènent à

$$i\hbar \sum_{n=1}^N \left[ \left( \frac{\partial}{\partial t} |\nu_n\rangle \right) \langle \nu_n| + |\nu_n\rangle \left( \frac{\partial}{\partial t} \langle \nu_n| \right) \right] = [\hat{h}, \hat{\rho}],$$

où nous reconnaissons dans le terme de gauche  $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho}$ .

Les équations (40) ont la forme d'une équation de Schroedinger dans un espace de Hilbert des états à une particule avec un Hamiltonien dépendant du temps. Elles sont cependant non linéaires car le Hamiltonien dépend de l'état du système par l'intermédiaire de sa matrice densité. Nous voyons la difficulté de résoudre ce type d'équation. En effet, nous cherchons à d'écrire l'évolution du système entre un instant initial et un instant final, mais le Hamiltonien  $\hat{h}[\rho]$  dépend lui même de l'état du système à l'instant final...

## 2.3 Interaction effective de Skyrme

Toutes les équations de ce cours sont valables quelque soit l'interaction. Cependant, si l'on veut faire des applications, il est nécessaire de choisir une interaction qui ne soit pas trop coûteuse numériquement. Dans le cadre de TDHF, le choix le plus répandu est l'interaction effective de type Skyrme [Sky56]. Dans sa forme standard, celle-ci s'écrit

$$\begin{aligned} \hat{v}(1,2) = & t_0 \left( 1 + x_0 \hat{P}_\sigma \right) \hat{\delta} \\ & + \frac{1}{2} t_1 \left( 1 + x_1 \hat{P}_\sigma \right) \left( \hat{\mathbf{k}}^2 \hat{\delta} - \hat{\delta} \hat{\mathbf{k}}^2 \right) \\ & + t_2 \left( 1 + x_2 \hat{P}_\sigma \right) \left( \hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\delta} \hat{\mathbf{k}} \right) \\ & + \frac{1}{6} t_3 \left( 1 + x_3 \hat{P}_\sigma \right) \rho^\alpha(\hat{\mathbf{R}}) \hat{\delta} \\ & + i W_0 \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \left( \hat{\mathbf{k}} \times \hat{\delta} \hat{\mathbf{k}} \right) \end{aligned} \quad (41)$$

avec  $\hat{\delta} = \delta(\hat{\mathbf{r}}(1) - \hat{\mathbf{r}}(2))$ ,  $\hat{\mathbf{k}} = (\hat{\mathbf{p}}(1) - \hat{\mathbf{p}}(2))/\hbar$  (moment relatif),  $\hat{\boldsymbol{\sigma}} = \hat{\boldsymbol{\sigma}}(1) + \hat{\boldsymbol{\sigma}}(2)$ ,  $\hat{\mathbf{R}} = (\hat{\mathbf{r}}(1) + \hat{\mathbf{r}}(2))/2$ ,  $\hat{\boldsymbol{\sigma}}(i) = \hat{\sigma}_x(i) \mathbf{e}_x + \hat{\sigma}_y(i) \mathbf{e}_y + \hat{\sigma}_z(i) \mathbf{e}_z$ ,  $\hat{\sigma}_{xyz}(i)$  sont les opérateurs agissant sur le spin de la particule  $i$  et sont représentés par les matrices de Pauli dans l'espace de spin,  $\hat{P}_\sigma = (1 + \hat{\boldsymbol{\sigma}}(1) \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}(2))/2$  est l'opérateur d'échange de spin et  $\rho(\mathbf{r}) \equiv \sum_{s\tau} \rho^{(1)}(\mathbf{r}s\tau, \mathbf{r}s\tau)$  est la densité de particules au point  $\mathbf{r}$ . Les termes " $t_1$ " et " $t_2$ " sont non locaux et simulent une courte portée de l'interaction. Le terme " $W_0$ " est le terme de spin-orbite.

Cette interaction présente l'avantage d'être de portée nulle, ce qui simplifie les calculs en représentation des coordonnées. Ses paramètres ( $t_{0-3}$ ,  $x_{0-3}$ ,  $W_0$  et  $\alpha$ ) sont ajustés pour reproduire des propriétés de structure nucléaire, comme la saturation de la matière nucléaire infinie (voir entre autres [Cha97, Cha98, Mey00]).

Notons un point de détail dans la procédure d'ajustement de ces paramètres qui peut avoir son importance dans les études quantitatives de collisions nucléaires. Pour des calculs de structure, il est fréquent de retrancher à l'énergie une contribution due au mouvement du centre de masse (voir chapitre 3.2. de la référence [Cha98]) afin d'obtenir une meilleure description des noyaux dans leur référentiel intrinsèque. Une collision est par contre décrite par un observateur extérieur qui définit ainsi le repère du laboratoire. Il ne faut donc pas prendre en compte cette correction dans les ajustements de forces dédiées à des calculs de collisions. C'est par exemple ce qui différencie la paramétrisation SLy4, avec correction à un corps du mouvement du centre de masse [Cha98], de la paramétrisation SLy4d, sans cette correction [Kim97] (le  $d$  signifiant "dynamique").

Notons enfin que le terme " $t_3$ " de l'équation (41) dépend explicitement de la densité du système. En cela, et puisque la densité n'est *a priori* pas constante dans l'espace, l'interaction de Skyrme brise explicitement l'invariance par translation dans l'espace (mais pas l'invariance Galiléenne [Tho62]). En toute rigueur, il serait nécessaire de reformuler TDHF en terme de fonctionnelle de la densité, ce qui n'est pas l'objet de ce cours. Rappelons enfin que l'équation (41) n'est donnée qu'à titre indicatif : nous n'utilisons pas de forme explicite de l'interaction dans la dérivation des équations de ce cours.

## 2.4 Résolution de l'équation TDHF : aspects pratiques

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

- construire l'état fondamental HF des partenaires de collision en résolvant leurs équations HF
- construire un unique Slater à partir de ces deux états en les plaçant à une distance  $D_0$
- mettre les noyaux en vitesse en fonction de l'énergie et du moment angulaire désirés
- résoudre itérativement l'équation TDHF pour obtenir l'évolution des états occupés
- calculer les observables d'intérêt à partir de ces fonctions d'onde.

Les sous-chapitres 2.4.1 à 2.4.4 détaillent la construction du déterminant de Slater initial décrivant les deux noyaux dans leur état fondamental sur une trajectoire de Rutherford. Le sous-chapitre 2.4.5 décrit quant à lui la résolution de la dynamique du système.

### 2.4.1 états Hartree-Fock

On suppose qu'à l'instant initial, les deux partenaires de collision sont dans leur état fondamental. Pour être cohérent avec l'approche TDHF, nous calculons les états fondamentaux des partenaires de collision dans l'approximation de champ moyen. Les états à  $N$  particules indépendantes obtenus sont appelés états Hartree-Fock (HF) et sont donc associés à une matrice densité  $\hat{\rho}$  qui rend stationnaire l'équation TDHF (Eq. (39)) et qui sont donc solution de l'équation HF statique

$$\left[ \hat{h}[\rho], \hat{\rho} \right] = 0. \quad (42)$$

Cette équation reste abstraite tant que l'on n'a pas choisi une base d'états à une particule pour résoudre le problème concrètement. Comme deux opérateurs qui commutent possèdent la propriété d'avoir une base d'états propres commune, il est tout naturel de choisir cette base que l'on note  $\{|\alpha\rangle\}$ . On a ainsi  $\hat{h} |\alpha\rangle = e_\alpha |\alpha\rangle$  et  $\hat{\rho} |\alpha\rangle = n_\alpha |\alpha\rangle$  avec les nombres d'occupation  $n_\alpha = 0$  ou 1. Les états occupés ( $n_\alpha = 1$ ) servent à construire l'état à  $N$  particules indépendantes du noyau.

Les valeurs propres  $e_\alpha$  de  $\hat{h}$  peuvent quant à elles être interprétées comme les énergies des états à une particule [Vau72]. L'état fondamental étant l'état d'énergie minimum, il s'obtient dans l'approximation HF en remplissant les  $N$  états de plus basses énergies. Il suffit donc de trouver les  $N$  états propres de  $\hat{h}$  qui ont les valeurs propres les plus basses pour pouvoir construire l'état HF.

### 2.4.2 méthode du temps imaginaire

La méthode du temps imaginaire [Dav80] est une des méthodes couramment utilisées pour trouver la valeur propre la plus basse d'un opérateur (s'il existe une borne inférieure à son



spectre de valeurs propres). Illustrons-la dans le cas simple d'une seule particule dans un potentiel extérieur. Considérons un *état d'essai*  $|\nu_e\rangle$  que l'on décompose sur les états propres d'un Hamiltonien ( $\hat{H}|\mu_n\rangle = E_n|\mu_n\rangle$ )

$$|\nu_e\rangle = \sum_n c_n |\mu_n\rangle. \quad (43)$$

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

$$e^{-\beta\hat{H}}|\nu_e\rangle = \sum_n c_n e^{-\beta E_n} |\mu_n\rangle = e^{-\beta E_0} \sum_n c_n e^{-\beta(E_n - E_0)} |\mu_n\rangle. \quad (44)$$

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

$$|\mu_0\rangle = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{e^{-\beta\hat{H}} |\nu_e\rangle}{\langle \nu_e | e^{-2\beta\hat{H}} | \nu_e \rangle^{1/2}} \quad (45)$$

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

Obtenir le spectre d'états et de valeurs propres du Hamiltonien HF à une particule  $\hat{h}$  n'est pas aussi direct que le suggère l'équation (45). Deux difficultés sont à relever :

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

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

L'équation (46) donne un possible schéma de résolution avec la méthode du temps imaginaire.

$$\begin{aligned} \{|\nu_1^{(n)}\rangle \cdots |\nu_N^{(n)}\rangle\} &\Rightarrow \rho^{(n)} \Rightarrow \hat{h}^{(n+1)} = \lambda \hat{h}[\rho^{(n)}] + (1 - \lambda) \hat{h}^{(n)} \\ &\quad \uparrow \qquad \qquad \qquad \downarrow \\ |\nu_i^{(n+1)}\rangle = \frac{1}{\mathcal{N}_i} \left( |\nu_i'\rangle - \sum_{j=0}^{i-1} \langle \nu_j^{(n+1)} | \nu_i' \rangle |\nu_j^{(n+1)}\rangle \right) &\Leftarrow |\nu_i'\rangle = (1 - \Delta\beta \hat{h}^{(n+1)}) |\nu_i^{(n)}\rangle \end{aligned} \quad (46)$$

où  $\mathcal{N}_i$  est la norme de l'état entre parenthèses. Le paramètre  $\lambda$  est un facteur d'amortissement utilisé pour assurer la convergence [Bon05]. Il impose que le champ moyen soit un mélange du champ HF et du champ à l'itération  $n - 1$ . Les états à une particule sont ensuite évolués avec un pas en temps imaginaire "petit" pour assurer la convergence, et pour lequel l'opérateur d'évolution s'écrit au premier ordre  $e^{-\Delta\beta \hat{h}^{(n)}} \simeq (1 - \Delta\beta \hat{h}^{(n)})$ . Comme cette opération n'est pas unitaire, il est nécessaire d'orthonormaliser les états à une particule obtenus à l'aide de la procédure de Graham-Schmidt afin d'obtenir l'état à l'itération  $n + 1$ .

Il va de soi que le schéma proposé dans l'équation 46 n'est pas résolu numériquement tel quel, avec des opérateurs et des états de l'espace de Hilbert. En pratique, on choisit d'abord

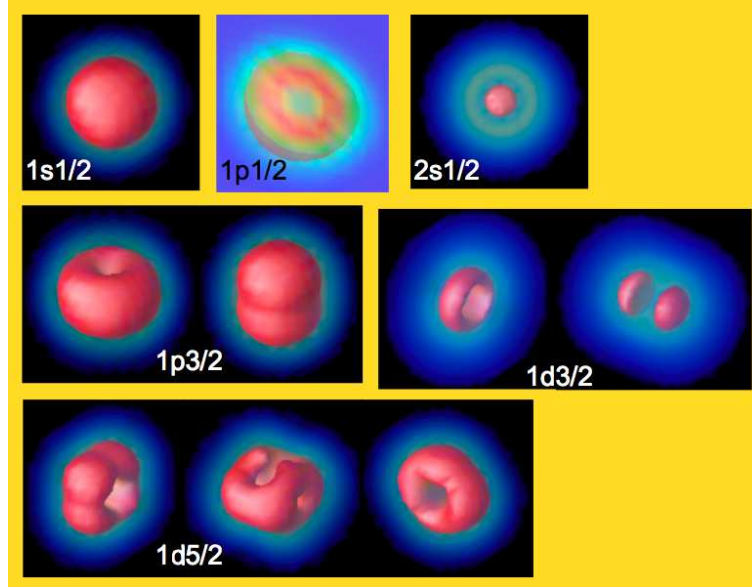


FIG. 1 – densité spatiale des états à une particule neutron de l' $^{16}\text{O}$ . L'état  $1p_{1/2}$  est coupé en 2 pour montrer qu'il est creux en son centre.

une base de cet espace, par exemple les coordonnées  $|\mathbf{r} s \tau\rangle$  ou celui des impulsions  $|\mathbf{p} s \tau\rangle$  que l'on discrétise sur un réseau, ou encore une base d'oscillateur harmonique  $|nljm\rangle$  que l'on tronque à une certaine valeur du nombre quantique principal  $n_{max}$ . Une fois la base choisie, on peut alors écrire les éléments de matrice des opérateurs et décomposer les états à une particule qui deviennent, par exemple, des fonctions d'onde spatiales si l'on choisit l'espace des coordonnées.

On obtient donc, après convergence, un jeu de fonctions d'onde à une particule occupées servant à construire l'état HF. Il est bien entendu aussi possible de déterminer les états non occupés d'énergies supérieures au niveau de Fermi, même si ceux-ci n'affectent ni la densité ni le champ moyen du système. La figure 1 représente les densités  $|\varphi_\nu(\mathbf{r})^{s\tau}|^2$  associées aux états à une particule neutron de l' $^{16}\text{O}$  et obtenues à l'aide de la méthode du temps imaginaire. La résolution est effectuée dans l'espace des coordonnées discrétisé. Le réseau est pris assez grand pour traiter correctement les comportements asymptotiques des fonctions d'onde, donnant l'aspect diffus des densités. Les conditions aux limites du réseau utilisé sont dites *à bords durs*. Cela signifie que les fonctions d'onde s'annulent en dehors du réseau. Notons enfin que dans le calcul présenté, seuls les états  $1s_{1/2}$ ,  $1p_{3/2}$  et  $1p_{1/2}$  sont occupés<sup>8</sup>.

### 2.4.3 construction de l'état à deux noyaux

Chaque noyau est initialement dans son état fondamental HF. On dispose donc de deux états de particules indépendantes pour construire la condition initiale alors que l'équation TDHF (Eq. (36)) ne peut servir à décrire l'évolution que d'un seul déterminant de Slater.

Cependant il est possible de construire un état  $|\phi\rangle = |\phi_{\nu_1 \dots \nu_A}\rangle$  de  $A = A_1 + A_2$  particules indépendantes à partir de deux déterminants de Slater  $|\phi_1\rangle = |\phi_{\alpha_1 \dots \alpha_{A_1}}\rangle$  et  $|\phi_2\rangle = |\phi_{\beta_1 \dots \beta_{A_2}}\rangle$ . Pour montrer sous quelles conditions cela est possible, considérons les matrices densité à un corps  $\hat{\rho}_1 = \sum_{n=1}^{A_1} |\alpha_n\rangle \langle \alpha_n|$  et  $\hat{\rho}_2 = \sum_{n=1}^{A_2} |\beta_n\rangle \langle \beta_n|$  de ces états. Comme il s'agit d'états de particules indépendantes, elles obéissent à la propriété  $\hat{\rho}_i^2 = \hat{\rho}_i$  (voir chapitre 2.1.3).

<sup>8</sup>Chaque état représenté sur la figure 1 a une dégénérescence 2 car le calcul statique préserve la symétrie par renversement du temps.

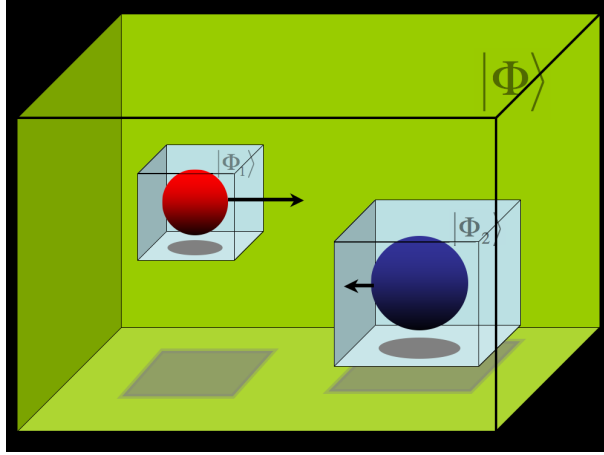


FIG. 2 – Schéma représentant les 2 réseaux HF initiaux inclus dans le réseau TDHF.

Calculons le carré de la matrice densité totale  $\hat{\rho} = \hat{\rho}_1 + \hat{\rho}_2$

$$\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}_1^2 + \hat{\rho}_2^2 + \hat{\rho}_1 \hat{\rho}_2 + \hat{\rho}_2 \hat{\rho}_1 = \hat{\rho} + \sum_{m=1}^{A_1} \sum_{n=1}^{A_2} (|\alpha_m\rangle \langle \alpha_m | \beta_n \rangle \langle \beta_n| + \text{H.c.}) \quad (47)$$

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

#### 2.4.4 mise en mouvement des noyaux

La théorie TDHF est quantique, dans le sens où le système est représenté par une fonction d'onde à  $N$  particules. Cependant la restriction à des états de particules indépendantes n'autorise pas, en général, une interprétation *probabiliste* des voies de réaction. C'est ce que nous verrons notamment dans le cas de la fusion (la probabilité de fusion vaut 1 ou 0). Cela signifie que TDHF donne essentiellement pour résultat des *trajectoires classiques*.

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

En utilisant les notations du chapitre 2.4.3, on donne une vitesse  $\mathbf{v}_i$  au noyau  $i = 1$  ou  $2$  en lui appliquant une impulsion  $\mathbf{P}_i = A_i m \mathbf{v}_i$ . Cela se fait grâce à une translation de sa matrice densité  $\rho_i$  dans l'espace des impulsions [Tho62]

$$\hat{\rho}_i(t = 0) = e^{i m \mathbf{v}_i \cdot \hat{\mathbf{r}} / \hbar} \hat{\rho}_i e^{-i m \mathbf{v}_i \cdot \hat{\mathbf{r}} / \hbar} \quad (48)$$

où l'opérateur position  $\hat{\mathbf{r}} = \hat{x} \mathbf{e}_x + \hat{y} \mathbf{e}_y + \hat{z} \mathbf{e}_z$  agit dans l'espace des états à une particule. Lorsque la dépendance en temps n'est pas indiquée sur  $\rho_i$ , il s'agit d'un état HF statique.

En pratique, si on choisit une représentation dans l'espace des coordonnées, ce sont donc les fonctions d'onde à une particule que nous allons suivre, et la transformation de l'équation (48) revient à appliquer une phase aux fonctions d'onde en chaque point du réseau. Les fonctions d'onde à l'instant initial s'écrivent ainsi

$$\begin{aligned}\varphi_{\alpha_n}^{st}(\mathbf{r}, t=0) &= e^{i m \mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{r}} \varphi_{\alpha_n}^{st}(\mathbf{r}) & 1 \leq n \leq A_1 \\ \varphi_{\beta_n}^{st}(\mathbf{r}, t=0) &= e^{i m \mathbf{v}_2 \cdot \mathbf{r}} \varphi_{\beta_n}^{st}(\mathbf{r}) & 1 \leq n \leq A_2.\end{aligned}\quad (49)$$

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

### 2.4.5 évolution dynamique

Pour trouver l'évolution dynamique du système, nous devons résoudre les équations TDHF pour les états occupés (Eq. (40)). La difficulté vient principalement du fait que le Hamiltonien dépend du temps. En conséquence, comme dans le cas du temps imaginaire, une procédure spécifique doit être mise en place pour prendre en compte l'auto-cohérence du Hamiltonien HF dans le propagateur. Nous procédons donc itérativement par petits pas en temps  $\Delta t$  durant lesquels nous supposons que le Hamiltonien reste constant. Pour conserver l'énergie, il est nécessaire d'appliquer un algorithme symétrique par renversement du temps, et donc d'estimer le Hamiltonien à  $t + \frac{\Delta t}{2}$  pour faire évoluer le système entre  $t$  à  $t + \Delta t$  [Flo78]

$$|\nu(t + \Delta t)\rangle \approx e^{-i \frac{\Delta t}{\hbar} \hat{h}(t + \frac{\Delta t}{2})} |\nu(t)\rangle. \quad (50)$$

Une algorithme possible est schématisé par

$$\begin{array}{ccccc} \{|\nu_1^{(n)}\rangle \dots |\nu_N^{(n)}\rangle\} & \Rightarrow & \rho^{(n)} & \Rightarrow & \hat{h}^{(n)} \equiv \hat{h}[\rho^{(n)}] \\ & \uparrow & & & \downarrow \\ |\nu_i^{(n+1)}\rangle = e^{-i \frac{\Delta t}{\hbar} \hat{h}^{(n+\frac{1}{2})}} |\nu_i^{(n)}\rangle & & & & |\tilde{\nu}_i^{(n+1)}\rangle = e^{-i \frac{\Delta t}{\hbar} \hat{h}^{(n)}} |\nu_i^{(n)}\rangle \\ & \uparrow & & & \downarrow \\ \hat{h}^{(n+\frac{1}{2})} \equiv \hat{h}[\rho^{(n+\frac{1}{2})}] & \Leftarrow & \rho^{(n+\frac{1}{2})} = \frac{\rho^{(n)} + \tilde{\rho}^{(n+1)}}{2} & \Leftarrow & \tilde{\rho}^{(n+1)} \end{array} \quad (51)$$

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

D'autre part, l'opérateur d'évolution s'écrit sous forme d'une exponentielle. Numériquement, on ne sait pas appliquer directement une exponentielle d'opérateur et il est nécessaire de développer et de tronquer l'exponentielle. Ceci est possible car  $\Delta t$  est petit, mais ce n'est pas sans poser de problème car l'opérateur d'évolution perd alors son unitarité. Il est alors nécessaire de contrôler l'orthonormalité des fonctions d'onde au cours du temps.

## 3 Étude des réactions autour de la barrière avec TDHF

Les premières applications de TDHF en physique nucléaire datent d'une trentaine d'années, et concernent essentiellement la fusion [Bon76, Bon78, Flo78, Neg82]. La figure 3, extraite de la référence [Bon78] par P. Bonche *et al.*, illustre le succès des calculs de l'époque quant à la reproduction des sections efficaces de fusion au dessus de la barrière. Cependant les calculs comportaient des symétries limitant ainsi leur champ d'application. Ils utilisaient aussi des versions simplifiées de la force de Skyrme. Il n'y a que très récemment que des codes TDHF

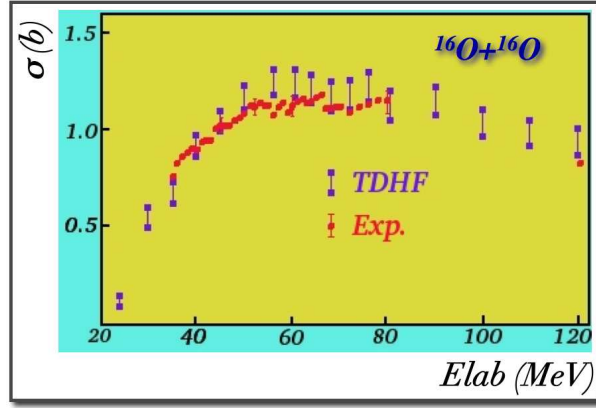


FIG. 3 – Une des toutes premières fonctions d’excitation de fusion obtenue avec un calcul TDHF comparée à l’expérience pour le système  $^{16}\text{O}+^{16}\text{O}$  [Bon78].

sans aucune symétrie et utilisant une fonctionnelle complète de Skyrme ont vu le jour [Uma06a]. Nous présentons ici quelques applications modernes de TDHF aux réactions nucléaires autour de la barrière de fusion. Tous les calculs sont réalisés dans l’espace des coordonnées avec la paramétrisation SLy4d [Kim97] de la force de Skyrme.

Après quelques généralités sur la fusion, nous examinerons la position de ces barrières avec TDHF. Ensuite nous étudierons le transfert de nucléons sous la barrière et nous conclurons sur les succès et limitations de TDHF.

### 3.1 Généralités sur la fusion

#### 3.1.1 définition de la fusion

La réaction de fusion entre ions lourds est un processus qui implique deux noyaux en voie d’entrée et qui mène à la formation d’un système composé qui a perdu la mémoire de la voie d’entrée et décroît par un processus statistique (hypothèse de Bohr). Cette définition est simple, mais la mesure expérimentale n’est pas toujours triviale. En effet, les lois de conservations du moment angulaire et de l’énergie impliquent que le noyau composé est formé avec une grande énergie d’excitation et un grand moment angulaire. En conséquence, il décroît en émettant des particules (en plus des gammas), laissant le noyau final avec une distribution de masses proche du noyau composé, ou, alternativement, il décroît par fission. Il y a donc plusieurs voies de sortie à identifier dont certaines peuvent être dues à d’autres mécanismes de réaction. C’est le cas par exemple de la fission qui peut se confondre avec la quasifission (processus similaire mais ne passant pas par un noyau composé, donc gardant la mémoire de la voie d’entrée). De même il peut être difficile de distinguer entre la fusion complète et incomplète (fusion d’un fragment du noyau avec le partenaire de collision), notamment dans le cas de noyaux faiblement liés comme les noyaux exotiques. D’un point de vue expérimental, il n’est donc pas toujours évident de distinguer sans ambiguïté les événements de fusion.

#### 3.1.2 modèle à une dimension

Traditionnellement, les réactions de fusion sont décrites à l’aide d’un modèle simple basé sur une barrière de potentiel à une dimension résultant de la compétition des parties nucléaire (attractive à courte portée) et Coulombienne (répulsive à longue portée) de l’interaction noyau-noyau (cf. figure 4). Dans ce cas, le degré de liberté principal est la distance  $r$  entre les centres

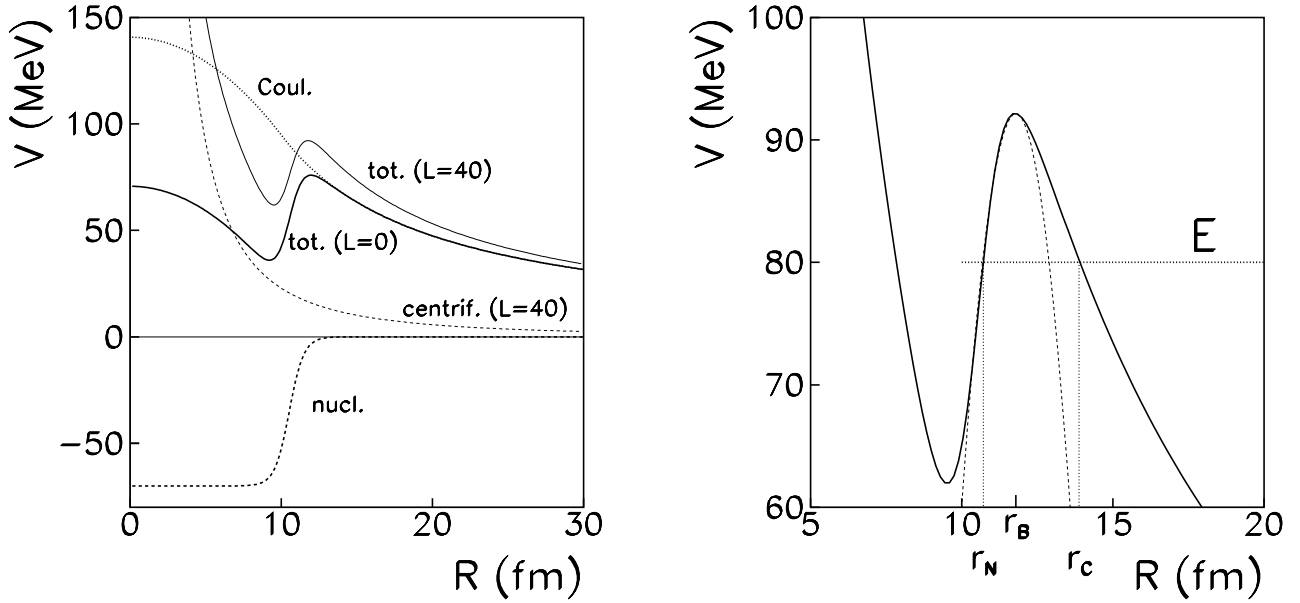


FIG. 4 – Gauche : exemple de potentiels nucléaire, Coulombien, centrifuge ( $\ell = 40$ ), et totaux ( $\ell = 0$  et  $\ell = 40$ ) du système  $^{16}\text{O} + ^{208}\text{Pb}$ . La paramétrisation de Wong est utilisée pour le potentiel nucléaire [Won73]. Droite : zoom autour de la barrière pour un moment orbital  $\ell = 40$  où nous avons représenté les "points tournant" interne (en  $r_N$ ) et externe (en  $r_C$ ) à l'énergie  $E$  ainsi que l'approximation parabolique de la barrière (tirets).

de masse des noyaux. On suppose qu'il y a fusion lorsque le système atteint la région intérieure de la barrière ( $r < r_N$  sur la figure 4).

Avec cette hypothèse, la section efficace de fusion s'exprime en fonction du coefficient de transmission  $T_\ell(E)$  à travers la barrière pour chaque onde partielle  $\ell$ .

$$\sigma_{fus}(E) = \sum_{\ell} \frac{\pi \hbar^2}{2\mu E} (2\ell + 1) T_\ell(E) \quad (52)$$

où  $\mu$  est la masse réduite du système. En dessous de la barrière ( $E < B$ ), la fusion est interdite classiquement, mais peut survenir par effet tunnel. Les coefficients de transmission peuvent se calculer à l'aide de l'approximation WKB (Wentzel-Kramers-Brillouin)

$$T_\ell(E) = \left[ 1 + \exp \left( \frac{2}{\hbar} \int_{r_C}^{r_N} dr \sqrt{2\mu(U(\ell, r) - E)} \right) \right]^{-1} \quad (53)$$

où  $U(\ell, r)$  est le potentiel total (nucléaire + Coulomb + centrifuge) et  $r_C$  et  $r_N$  sont les "points tournants" à l'énergie  $E$  (cf. Fig. 4). Une autre hypothèse consiste à approximer le potentiel par une parabole de courbure  $\hbar\omega_B$ , ce qui est justifié pour des énergies pas trop en dessous de la barrière. Nous obtenons alors

$$T_\ell(E) = \frac{1}{1 + \exp [2\pi(B - E)/\hbar\omega_B]} \quad (54)$$

La somme sur les ondes partielles  $\ell$  amène à la formule de Wong [Won73]

$$\sigma_{fus}(E) = \frac{R_C^2 \hbar \omega_B}{2E} \ln \left\{ 1 + \exp \left[ \frac{2\pi}{\hbar \omega_B} (E - B) \right] \right\} \quad (55)$$

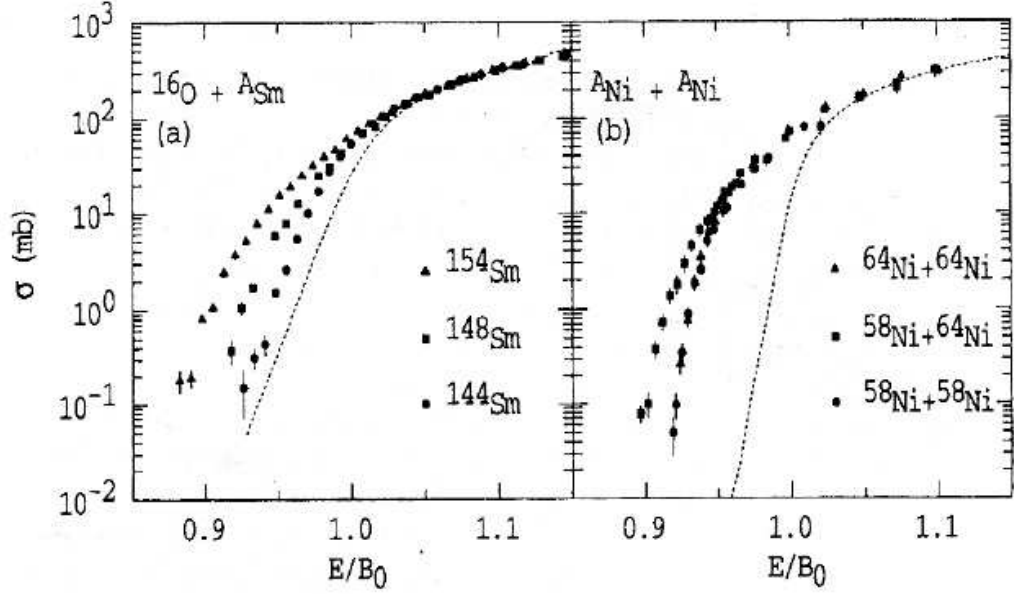


FIG. 5 – Sections efficaces de fusion de différents systèmes en fonction de l'énergie :  $^{16}\text{O}$  sur différents isotopes de Samarium (gauche) et Nickel sur Nickel (droite). Les énergies dans le centre de masse sont divisées par la la hauteur de la barrière. Les courbes représentent des prédictions du modèle de pénétration de barrière en une dimension avec des paramétrisations standards des potentiels noyau-noyau. Figure tirée de [Das98].

Les prédictions de ce modèle à une dimension sont comparées à l'expérience sur la figure 5. Elles sont satisfaisantes au dessus de la barrière mais sont mises en défaut en dessous. Le modèle sous-estime les sections efficaces de plusieurs ordres de magnitude sous la barrière et ce malgré le fait que les potentiels noyau-noyau (similaires à celui présenté sur la figure 4) sont connus avec une assez bonne précision, au moins pour  $r \geq r_B$ . De plus, les données expérimentales montrent une assez forte dépendance d'un isotope à l'autre qui ne peut pas être simplement expliquée par les différences de rayons des noyaux. Notons enfin que s'affranchir de l'approximation WKB ou de celle du potentiel parabolique n'améliore pas significativement les prédictions.

### 3.1.3 couplages entre mouvement relatif et degrés de liberté internes

Le problème vient du fait que l'on a traité les noyaux comme des objets sans structure, alors qu'il s'agit de systèmes complexes à plusieurs corps. En fait, la fusion autour de la barrière est affectée par le couplage entre la structure interne des noyaux et leur mouvement relatif. Or, prendre en compte la structure des noyaux nécessite d'introduire de nouveaux degrés de liberté du système. Il n'est alors plus possible de décrire le système juste avec la distance relative entre les noyaux. En d'autres termes, nous nous trouvons face à un cas de pénétration de barrières à plusieurs dimensions (voir [Lac02]), qui peut difficilement être simulé par un seul degré de liberté. Par exemple, si un de noyaux est déformé, alors la barrière dépend de son orientation lorsqu'il entre en contact avec son partenaire. Dans ce cas, il est nécessaire d'introduire un deuxième degré de liberté qui est l'orientation du noyau. C'est ce que nous verrons dans le cas de calculs TDHF par la suite.

La fusion sous la barrière offre une belle manifestation des effets des couplages aux degrés de liberté internes des noyaux sur l'effet tunnel. Ce couplage engendre un ensemble de barrières appelées *distribution de barrières*. L'effet le plus visible est une augmentation de la fusion sous

la barrière de l'approche à une dimension de plusieurs ordres de grandeur. Ceci est rendu possible par l'apparition de barrières plus basses grâce aux couplages<sup>9</sup>. Une bonne description des données expérimentales nécessite alors de prendre en compte les excitations inélastiques, notamment vers les modes collectifs, et dans certains cas le transfert (voir [Bal98, Das98]).

La situation peut changer dans le cas de noyaux faiblement liés. Dans ce cas, le noyau peut subir une cassure dans la voie d'entrée. Quel est l'effet de la cassure sur la fusion ? Augmente-t-elle sous la barrière comme dans le cas des autres couplages ou diminue-t-elle à cause de la diminution de flux de particules dans la voie d'entrée ? La question n'est toujours pas tranchée après une décennie d'études théoriques et expérimentales. Dans ce cadre, de nouvelles expériences de fusion autour de la barrière auront lieu au près des nouveaux accélérateurs d'ions radioactifs.

### 3.1.4 distribution de barrières

La distribution de barrières expérimentale  $D_B^{exp}(E)$  s'obtient à partir de la fonction d'excitation  $\sigma_{fus}(E)$  en calculant la quantité [Row91]

$$D_B^{exp}(E) = \frac{d^2(\sigma_{fus}E)}{dE^2}. \quad (56)$$

Elle peut être interprétée comme la probabilité pour que le système ait sa barrière de fusion à l'énergie  $E$ .

Sans que cela constitue une preuve, considérons le cas d'un modèle classique avec une seule barrière  $B$ . Dans ce cas, la distribution de barrière est proportionnelle à la distribution de Dirac  $\delta(E - B)$ . La limite classique ( $\hbar \rightarrow 0$ ) de l'équation (55) donne  $\sigma = 0$  sous la barrière et  $\pi R_B^2(1 - \frac{B}{E})$  pour  $E \geq B$ . La distribution de barrière (Eq. (56)) donne alors bien le comportement attendu  $D_B(E) = \pi R_B^2 \delta(E - B)$ .

## 3.2 Barrières de fusion et fonction d'excitation

Dans ce chapitre, nous étudions la fusion avec TDHF. Les calculs numériques sont tirés de la référence [Sim07b] et de [Uma06b].

### 3.2.1 trajectoire des fragments

La première application "pratique" de TDHF consiste à suivre les trajectoires des noyaux au cours d'une collision. Lorsqu'il existe deux fragments distants, il est aisé de définir la distance qui les sépare. Par contre, lorsqu'ils sont en contact cela peut s'avérer plus compliqué. En pratique, on calcule l'axe principal de la distribution de matière (axe correspondant à la plus forte déformation), puis on cherche un minimum local du profil de densité le long de cet axe, définissant ainsi le plan de séparation en deux fragments dont il est aisé de calculer la distance entre les centres de masse (voir figure 6). Notons que cette distance ne s'annule pas, même pour une sphère.

### 3.2.2 barrière de fusion de deux noyaux sphériques

Intéressons nous, pour commencer, au système  $^{16}\text{O} + ^{208}\text{Pb}$ . Initialement, les noyaux sont dans leur état HF à une distance de 44.8 fm. La figure 7 donne l'évolution de la distance entre les fragments pour différentes collisions frontales<sup>10</sup> ( $b = 0$  fm) à des énergies dans le référentiel

<sup>9</sup>En contrepartie, les barrières qui apparaissent à plus haute énergie engendrent une diminution de la fusion au dessus de la barrière à une dimension.

<sup>10</sup>A titre indicatif, chaque trajectoire (i.e. une énergie donnée) nécessite environ 4h de calcul sur un processeur NEC/SX-8.



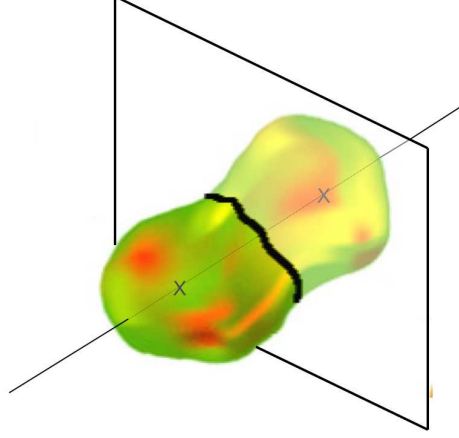


FIG. 6 – schéma illustrant la séparation en deux fragments lorsque les noyaux sont en contact.

du centre de masse comprises entre 74.2 et 75 MeV. On voit qu'après des phases d'approche peu différentes car les énergies sont voisines, les évolutions après 600 fm/c deviennent très différentes. On distingue notamment deux groupes de trajectoires :

- $E \leq 74.44$  MeV, les deux fragments se séparent en voie de sortie.
- $E \geq 74.45$  MeV, la distance reste inférieure à 10 fm.

Il est clair que l'interprétation est que le système s'est re-séparé en deux fragments dans le premier cas et a fusionné dans le second. Ces calculs prédisent donc une barrière de fusion entre 74.44 et 74.45 MeV. Expérimentalement, celle-ci se distribue autour de 74 MeV, avec une largeur à mi-hauteur de 4 MeV. Il est donc frappant d'obtenir un tel accord entre l'expérience et une théorie dans laquelle, rappelons-le, aucun ajustement sur des mécanismes de réaction n'est effectué.

Pour étudier plus en détail ce qui se passe autour de la barrière, nous avons représenté sur les figures 8 et 9 l'évolution des densités de nucléons  $\rho(\mathbf{r}) = \sum_{s\tau} \rho(\mathbf{r}s\tau, \mathbf{r}s\tau)$  juste au dessous et au dessus de la barrière. Dans le premier cas, le système "hésite" à fusionner. Il forme un système di-nucléaire pendant un temps relativement long à l'échelle de la collision ( $\sim 500$  fm/c), durant lequel de la matière est échangée d'un noyau à l'autre. Puis la répulsion Coulombienne l'emporte et le système se sépare en deux fragments. Dans le deuxième cas, le système franchit la barrière de fusion grâce aux 10 keV supplémentaires pour former un noyau plus lourd. Enfin, ces figures illustrent la richesse des phénomènes physiques décrits par TDHF : la diffusivité des surfaces nucléaires, la formation d'un col au commencement de la fusion, la forme octupolaire du système composé...

L'accord entre barrières expérimentale et théorique est aussi bon pour toute une série de systèmes comme le montre la figure 10. Divers projectiles allant de l' $^{16}\text{O}$  au  $^{58}\text{Ni}$  et cibles allant du  $^{40}\text{Ca}$  au  $^{238}\text{U}$  sont considérées. Le barrière la plus basse correspond au système  $^{40}\text{Ca} + ^{40}\text{Ca}$  et la plus haute au système  $^{48}\text{Ti} + ^{208}\text{Pb}$ . Nous voyons sur cette figure que ces calculs TDHF, qui ne comportent pas d'ajustements sur les réactions [Kim97], donnent des résultats un peu plus proches de l'expérience que la barrière de Bass [Bas77, Bas80] alors que celle-ci est ajustée sur des barrières expérimentales.

### 3.2.3 barrières de fusion d'un noyau sphérique avec un noyau déformé

La fusion impliquant au moins un noyau déformé est intéressante car le système peut alors avoir plusieurs barrières aisément interprétables dans une approche classique en terme d'orientations du noyau. La figure 11 donne des exemples de distributions de barrières expérimentales (Eq. 56) de deux systèmes impliquant un noyau lourd déformé avec un noyau léger sphérique.

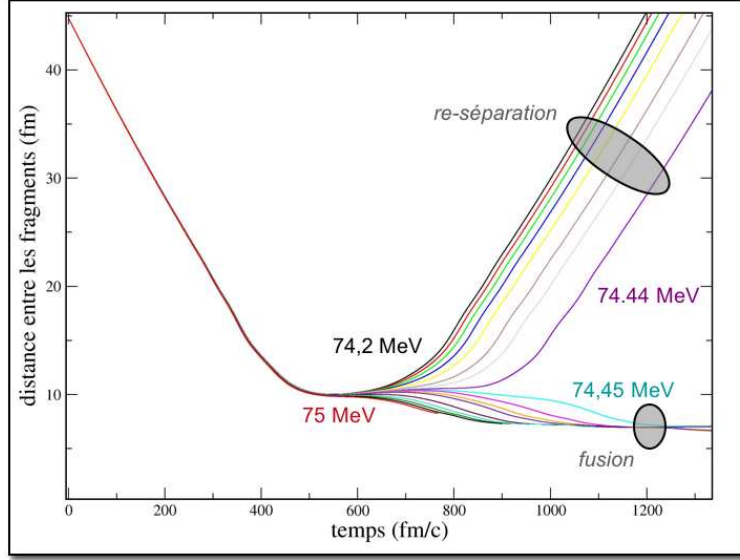


FIG. 7 – Distance entre les fragments lors de collisions centrales  $^{16}\text{O}+^{208}\text{Pb}$  à diverses énergies

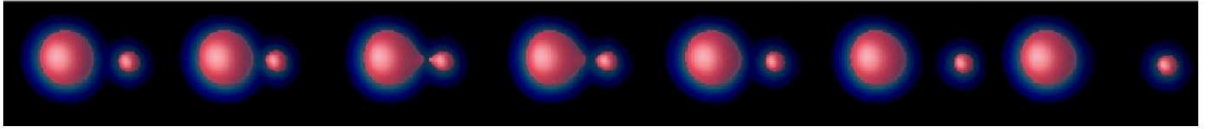


FIG. 8 – Evolution de la densité de nucléons du système  $^{16}\text{O}+^{208}\text{Pb}$  en collision frontale à une énergie du centre de masse de 74.44 MeV (juste en dessous de la barrière). La surface représente une isodensité à la moitié de la densité de saturation. Chaque figure est séparée en temps de 135 fm/c.

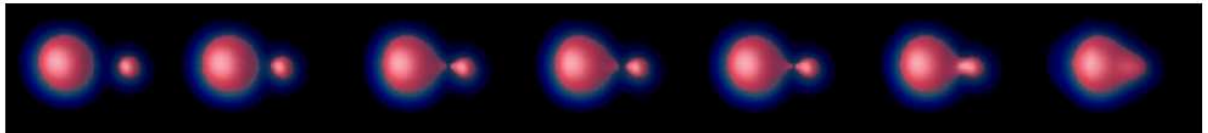


FIG. 9 – Idem figure 8 à 74.45 MeV (juste au dessus de la barrière).

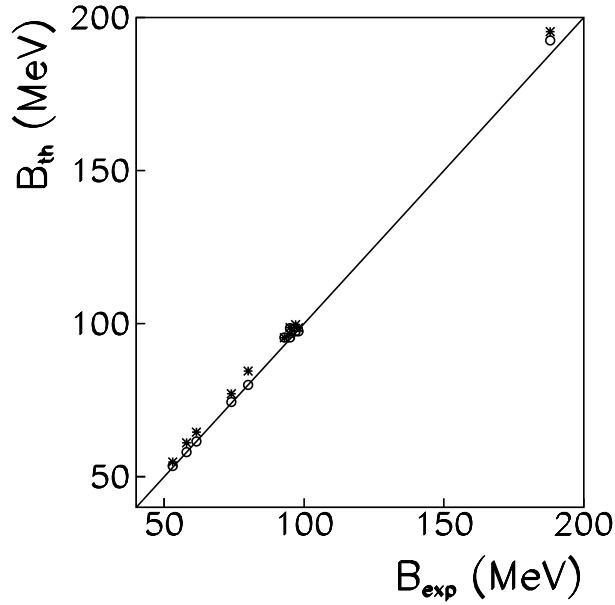


FIG. 10 – Barrières de fusion macroscopiques de Bass (étoiles) et de calculs TDHF (cercles) en fonction des barrières expérimentales (centroïdes des distributions de barrières) . Figure tirée de [Sim07b].

Ces distributions ont une largeur de  $\sim 10$  MeV. L'effet Tunnel n'induisant qu'une largeur de  $\sim 2 - 3$  MeV [Row91], l'étalement observé a donc une autre origine.

Les calculs TDHF permettent de comprendre cet étalement comme un effet de l'orientation du noyau déformé au point de contact. En effet, pour un noyau allongé, si l'axe de déformation est parallèle à l'axe de collision (à paramètre d'impact nul), alors TDHF prédit une barrière plus basse que dans le cas contraire où l'axe de déformation est perpendiculaire à l'axe de collision. Ces deux cas extrêmes définissent bien les limites inférieure et supérieure de la distribution de barrière comme l'indiquent les flèches sur la figure 11.

Cet effet est illustré sur la figure 12 où les potentiels sont obtenus à la suite de calculs TDHF des trajectoires de fusion. Dans le cas où les axes sont parallèles, le contact entre les noyaux a lieu pour une distance de séparation des centres de masse supérieure par rapport au cas où les

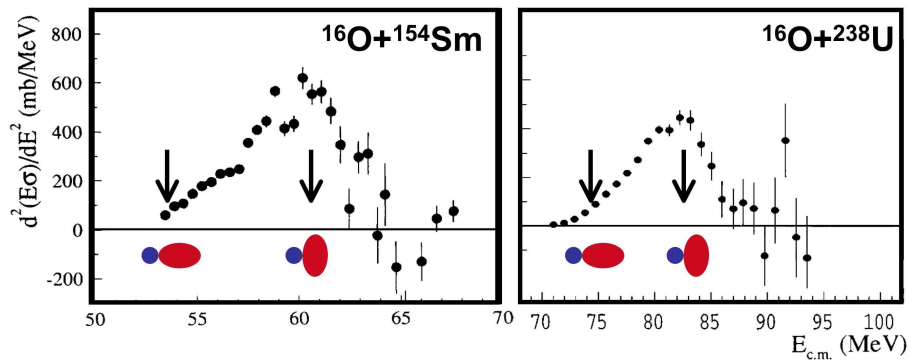


FIG. 11 – Distributions de barrières de fusion expérimentales pour deux systèmes. Les flèches représentent les barrières obtenues avec TDHF pour les différentes orientations du noyaux déformé au point de contact.

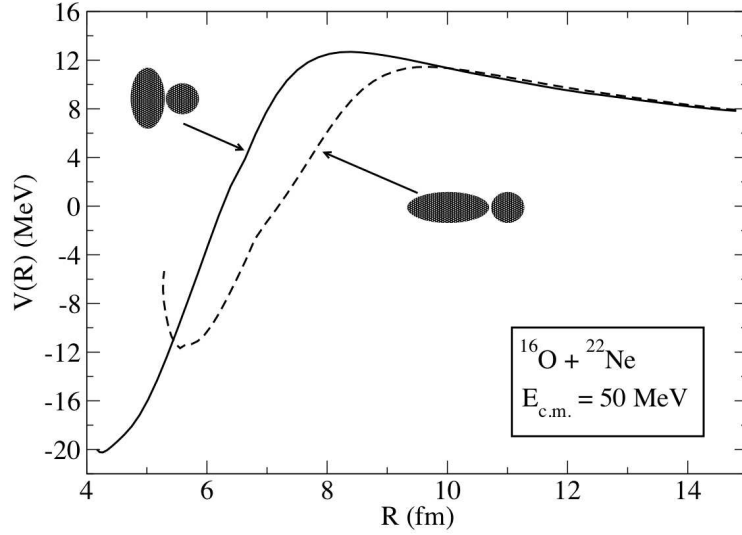


FIG. 12 – Potentiels noyau-noyau avec un noyau sphérique et un noyau déformé pour deux orientations différentes. Figure tirée de [Uma06b].

axes sont perpendiculaires. Il en résulte que la répulsion Coulombienne, diminuant avec cette distance, est donc plus faible et implique une barrière plus basse.

Nous remarquons aussi que les distributions de barrières de la figure 11 sont piquées pour les barrières les plus élevées. Cela signifie que le système a plus de chance de voir une barrière élevée qu'une barrière basse. Ceci est dû au fait que le noyau déformé est allongé et pas aplati. Pour le comprendre, imaginons un cas simplifié où l'axe de collision est l'axe  $z$  et où l'axe de déformation ne peut prendre que trois orientations, selon  $x$ ,  $y$  ou  $z$ . Seul le cas où l'axe de déformation est selon  $z$  aura une barrière plus basse alors que les orientations selon  $x$  ou  $y$  auront une barrière plus élevée. Si la probabilité d'orientation est la même pour les trois axes, alors le système aura deux fois plus de chance d'avoir la barrière haute que la barrière basse. Ce modèle simplifié explique donc bien la forme des distributions de barrières de la figure 11. Si le noyau déformé était aplati, c'est alors la barrière basse qui serait la plus probable.

Dans cette simple interprétation, nous avons supposé une isotropie de distribution des orientations du noyau déformé au point de contact. Cette isotropie est en général brisée par l'interaction Coulombienne de longue portée qui a tendance à mettre le noyau en rotation pour qu'il se rapproche de la configuration où les axes de déformation et de collision sont perpendiculaires. Ceci est dû au fait que la répulsion Coulombienne est plus forte sur l'extrémité du noyau la plus proche du partenaire de collision que sur celle la plus éloignée, générant ainsi un couple mettant en rotation le noyau déformé. Cet effet de l'excitation Coulombienne peut modifier la distribution de barrière par rapport au "cas isotrope", et ce surtout si le noyau déformé est léger et son partenaire de collision lourd [Sim04].

Pour conclure ce chapitre, nous avons vu que la position de la barrière pouvait dépendre de la structure des partenaires de collisions. Bien qu'il soit difficile d'envisager des études de structure nucléaire en utilisant la position des barrières, il n'en demeure pas moins que leurs distributions peuvent distinguer, par exemple, une déformation aplatie d'une déformation allongée d'un partenaire de collision, donnant ainsi accès au signe du paramètre de déformation qu'il est difficile d'obtenir avec les techniques classiques de spectroscopie.

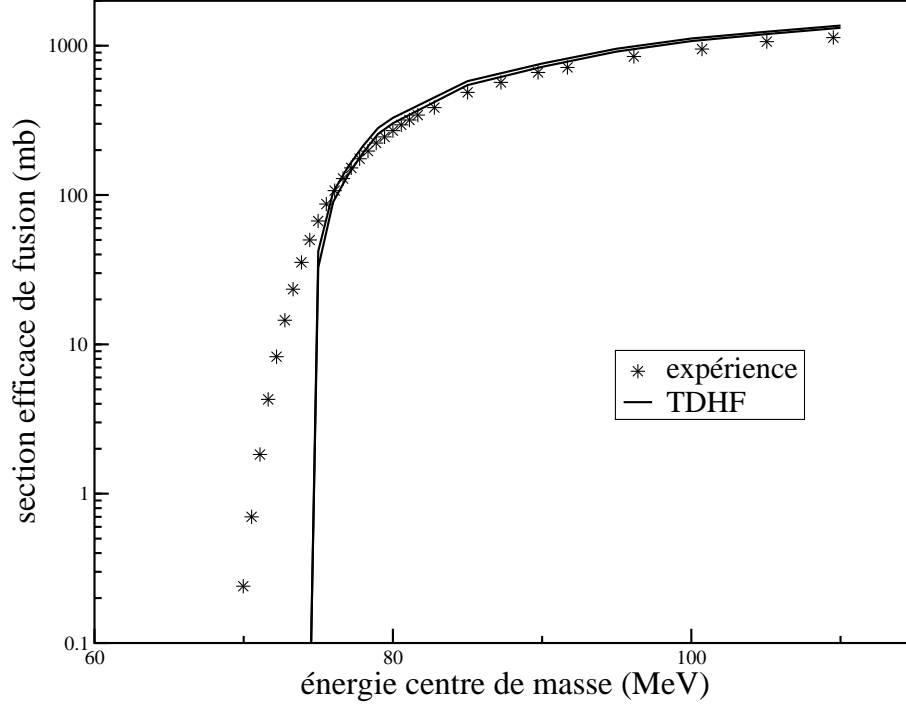


FIG. 13 – Section efficace de fusion expérimentale (étoiles) et provenant d'un calcul TDHF (lignes) du système  $^{16}\text{O}+^{208}\text{Pb}$ . Les lignes représentent les limites inférieure et supérieure des sections efficaces de fusion théoriques. Les barres d'erreur expérimentales sont inférieures aux étoiles.

### 3.2.4 fonction d'excitation

Jusqu'à présent nous nous sommes intéressés aux barrières de fusion qui s'obtiennent à partir de calculs TDHF à paramètre d'impact nul. Si l'on veut effectuer des calculs de fonctions d'excitation comme sur la figure 3, il faut réaliser des calculs à des énergies au dessus de la barrière et à des paramètres d'impact non nuls. La section efficace de fusion à une énergie donnée s'obtient alors en mesurant le moment angulaire orbital critique  $l_c$  en dessous duquel le système fusionne et au dessus duquel le système se sépare en deux fragments dans la voie de sortie.

La section efficace de fusion est donnée par l'Eq. (52) en fonction du coefficient de transmission  $T_\ell(E)$  qui n'est autre que la probabilité de fusion à l'énergie du centre de masse  $E$  pour un moment angulaire  $\sqrt{l(l+1)}\hbar$ . La restriction à un état de particules indépendantes implique que  $T_\ell(E) = 1$  pour  $l \leq l_{max}(E)$  et 0 pour  $l > l_{max}(E)$ . Nous obtenons ainsi l'expression connue sous le nom de "quantum sharp cut-off formula" [Bla54]

$$\sigma_{fus}(E) = \frac{\pi\hbar^2}{2\mu E} (l_{max}(E) + 1)^2. \quad (57)$$

Pour éviter les discontinuités introduites par la coupure et le fait que  $l_{max}(E)$  soit entier, nous approximations  $(l_{max}(E) + 1)\hbar$  par son équivalent classique  $\mathcal{L}_c$ . Ce dernier est le seuil du moment angulaire classique  $\mathcal{L} = \sqrt{2\mu E} b$ , où  $b$  est le paramètre d'impact, en dessous duquel la fusion a lieu [Bas80]. Cette approximation est justifiée par le fait que  $(l_{max} + 1)^2$  et  $\mathcal{L}_c^2/\hbar^2$  sont tous deux plus grands que  $l_{max}(l_{max} + 1)$  et plus petits que  $(l_{max} + 1)(l_{max} + 2)$ . Nous obtenons finalement l'expression classique pour la section efficace de fusion  $\sigma_{fus}(E) \simeq \pi\mathcal{L}_c^2/2\mu E = \pi b^2$ .

La figure 13 donne une comparaison des fonctions d'excitation expérimentale et obtenue par un calcul TDHF pour le système  $^{16}\text{O}+^{208}\text{Pb}$ . Les moments angulaires critiques étant obtenus

par dichotomie, le calcul donne une limite inférieure et supérieure de la section efficace de fusion à chaque énergie. On voit qu'au dessus de la barrière de fusion, les calculs TDHF reproduisent correctement la fonction d'excitation expérimentale, la surestimant toutefois d'environ 20%. Par contre, la nature classique des trajectoires TDHF interdit la fusion sous la barrière, et la section efficace chute alors brutalement pour s'annuler à la barrière.

### 3.3 Transfert de nucléons sous la barrière

Dans ce chapitre, nous étudions le transfert de nucléons sous la barrière avec TDHF. Pour cela, nous allons d'abord observer le nombre moyen de nucléon dans un fragment. Si celui-ci est différent de la voie d'entrée, alors il s'agit d'une signature possible du transfert. Nous calculerons ensuite la variance du nombre de nucléons dans un fragment. Celle-ci peut être non nulle en cas de transfert de nucléons.

#### 3.3.1 observation du transfert

Nous avons vu sur la figure 8 deux noyaux qui entrent en contact, forment un col puis se séparent en deux fragments. Il n'y a *a priori* aucune raison que ces deux fragments aient les mêmes nombres de neutrons et de protons que dans la voie d'entrée (sauf dans les réactions symétriques). En effet, lors de la formation du col, un échange de nucléons est possible. Dans un tel calcul TDHF, ce sont les fonctions d'onde à une particule qui peuvent être transférées, au moins en partie, d'un noyau à l'autre et ainsi modifier le nombre de nucléons de chaque fragment.

Définissons l'opérateur qui mesure le nombre de particules "à droite" (région des  $x < 0$ ). Il s'écrit dans l'espace des coordonnées

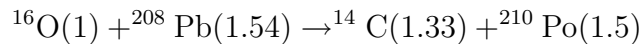
$$\hat{N}_D = \sum_{s\tau} \int d\mathbf{r} \hat{a}^\dagger(\mathbf{r}s\tau) \hat{a}(\mathbf{r}s\tau) \mathcal{H}(x) \quad (58)$$

où  $\mathcal{H}(x)$  est la fonction de Heavyside valant 1 si  $x > 0$  et 0 sinon.

En notant  $\langle i|j \rangle_D = \sum_{s\tau} \int d\mathbf{r} \varphi_i^{s\tau*}(\mathbf{r}) \varphi_j^{s\tau}(\mathbf{r}) \mathcal{H}(x)$  le recouvrement dans la partie droite de deux états à une particule et en utilisant l'Eq. (165) pour un état de particules indépendantes  $|\phi\rangle$ , on obtient (dans la base qui a servit à construire  $|\phi\rangle$ )

$$\langle \hat{N}_D \rangle_\phi = \sum_{ij} \langle i|j \rangle_D \langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j \rangle_\phi = \sum_i \langle i|i \rangle_D n_i. \quad (59)$$

La figure 14 donne le nombre moyen final de neutrons et de protons du petit fragment en voie de sortie lors de la réaction  $^{16}\text{O} + ^{208}\text{Pb}$  en fonction de l'énergie. On voit que plus l'énergie augmente, plus l' $^{16}\text{O}$  tend à perdre des protons. À la barrière, il a transféré en moyenne  $\sim 2$  protons au  $^{208}\text{Pb}$ . Une explication possible est que, lors de la collision, les effets de couche responsables de la stabilité de l' $^{16}\text{O}$  et du  $^{208}\text{Pb}$  disparaissent et c'est alors l'énergie d'asymétrie qui tente à "rééquilibrer" les rapport  $N/Z$  des deux noyaux. En effet, si on considère la réaction de transfert de deux protons



où les chiffres entre parenthèses sont les rapports  $N/Z$  des noyaux, on voit que les charges tendent à s'équilibrer entre le contact et la séparation en deux fragments. Notons que le même processus d'équilibration des charges a lieu lors de la fusion, et ce d'autant plus que l'asymétrie en  $N/Z$  est forte dans la voie d'entrée [Bon81, Cho93, Sim01, Sim07a].

Notons enfin que ces résultats sont en accord qualitatif avec l'expérience. En effet, il a été observé expérimentalement que le transfert d'un proton de l' $^{16}\text{O}$  vers le  $^{208}\text{Pb}$  domine sous

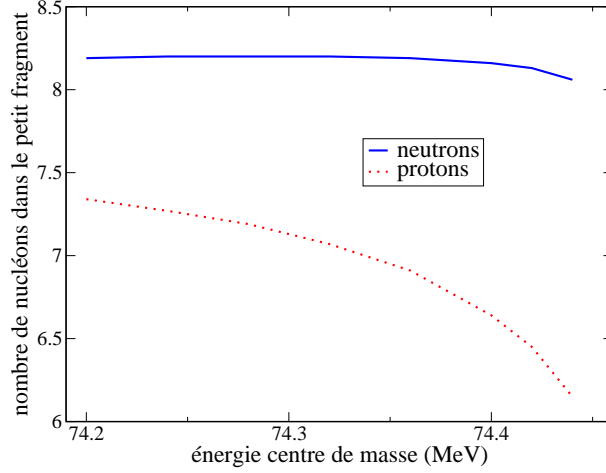


FIG. 14 – Nombre moyen de neutrons (ligne pleine) et de protons (ligne pointillée) dans le petit fragment en voie de sortie lors de collisions frontales  $^{16}\text{O} + ^{208}\text{Pb}$  sous la barrière en fonction de l'énergie.

la barrière, tandis que celui de deux protons domine à partir de la barrière [Vul86]. De plus, toujours dans cette expérience, il n'est pas observé de transfert de proton du  $^{208}\text{Pb}$  vers l' $^{16}\text{O}$ . Ces observations sont donc cohérentes avec les calculs TDHF.

### 3.3.2 états décrivant les fragments

Dans une collision à une énergie bien inférieure à la barrière, il n'y a pas de transfert et le petit fragment est dans ce cas un  $^{16}\text{O}$  avec un *bon* nombre de protons et de neutrons<sup>11</sup>. Cela se traduit par une variance nulle du nombre de particules à droite  $\sigma_D = \sqrt{\langle \hat{N}_D^2 \rangle - \langle \hat{N}_D \rangle^2} = 0$ .

Ce n'est plus le cas lorsqu'on se rapproche de la barrière à cause du transfert. Chaque fragment n'a plus un bon nombre de particules après la réaction et n'est donc plus un déterminant de Slater, mais un état corrélé, bien que l'état total décrivant les deux fragments reste, lui, un état de particules indépendantes. Pour nous en convaincre, calculons la variance de  $\hat{N}_D$  après la collision. Suivons pour cela la démarche de Dasso *et al.* [Das79]. En utilisant la relation d'anticommution (121), la relation de fermeture  $\sum_i |i\rangle\langle i| = \hat{1}$ , et l'Eq. (163), on montre de la même manière que lors du calcul de l'Eq. (59)

$$\langle \hat{N}_D^2 \rangle_\phi = \sum_{ijkl} \langle i|j \rangle_D \langle k|l \rangle_D \langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l \rangle_\phi \quad (60)$$

$$\begin{aligned} &= \sum_{ijkl} \langle i|j \rangle_D \langle k|l \rangle_D \left( \langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_l \rangle_\phi \delta_{jk} + \langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j \rangle_\phi \langle \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l \rangle_\phi - \langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_l \rangle_\phi \langle \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_j \rangle_\phi \right) \\ &= \sum_i n_i \langle i|i \rangle_D + \sum_{i,j} n_i n_j (\langle i|i \rangle_D \langle j|j \rangle_D - |\langle i|j \rangle_D|^2). \end{aligned} \quad (61)$$

Le carré de la variance s'écrit

$$\sigma_D^2 = \langle \hat{N}_D^2 \rangle_\phi - \langle \hat{N}_D \rangle_\phi^2 = \sum_{i=1}^N \langle i|i \rangle_D - \sum_{i,j=1}^N |\langle i|j \rangle_D|^2. \quad (62)$$

<sup>11</sup>Avoir un "bon" nombre de nucléons signifie être un état propre de l'opérateur qui mesure le nombre de particules  $\hat{N} = \sum_i |i\rangle\langle i|$ .

Appliquée au petit fragment après la collision à 74.44 MeV, cette équation donne numériquement  $\sigma_{D_p} \simeq 0.5$  pour les protons et  $\sigma_{D_n} \simeq 0.3$  pour les neutrons. Ce résultat indique nettement que le fragment n'est pas un état pur, mais qu'il décrit un mélange quantique de plusieurs noyaux de nombres de nucléons différents. De plus, même si en moyenne le nombre de neutrons bouge peu, la variance non nulle indique que la probabilité de transfert de neutrons est, quant à elle, non nulle.

Enfin, la variance est maximale lorsque les recouvrements "droite" entre deux fonctions d'onde sont nuls, *i.e.* si on a  $\langle i|j \rangle_D \propto \delta_{ij}$ . L'Eq. (62) devient alors une distribution binomiale

$$\sigma_D^2 = \sum_{i=1}^N \langle i|i \rangle_D (1 - \langle i|i \rangle_D). \quad (63)$$

La variance est donc bornée par

$$\sigma_D \leq \sqrt{\langle \hat{N}_D \rangle_\phi \left( 1 - \frac{\langle \hat{N}_D \rangle_\phi}{\langle \hat{N} \rangle_\phi} \right)} \leq \sqrt{N/4}. \quad (64)$$

Il s'agit d'une limite intrinsèque à tout état de particules indépendantes qui ne pourra donc jamais représenter des distributions de nucléons dans les fragments plus larges que cette valeur maximale. Il s'agit d'une limitation de TDHF car, en général, les calculs TDHF sous-estiment les largeurs de distributions de nucléons, notamment dans le cas de collisions profondément inélastiques qui peuvent mener à des largeurs de distributions de nombres de nucléons dans les fragments supérieures à la borne de l'Eq. (64) [Das79, Goe82]. Pour espérer reproduire ces largeurs, il faut s'affranchir de l'approximation de particules indépendantes.

### 3.4 Résumé : succès et limitations de TDHF

On a vu dans cette partie que TDHF était dans bien des cas compatible avec l'expérience :

- position des barrières
- forme des distributions des barrières avec des noyaux déformés
- fonction d'excitation
- populations de fragments sous la barrière (d'un point de vue qualitatif).

Nous avons aussi relevé des limitations à TDHF :

- pas de fusion sous la barrière
- limitation de la largeur des distributions du nombre de particules d'un fragment.

Il existe d'autres limitations intrinsèques à la théorie TDHF, non étudiées dans ce cours. TDHF n'inclut pas, par exemple la largeur d'étalement (couplage au noyau composé) dans la décroissance des résonances géantes [Lac04]. Ces limitations sont autant d'arguments qui poussent au développement de théories dynamiques allant au delà de l'approximation de particules indépendantes.

## 4 Théories dynamiques au delà de l'approximation de particules indépendantes

Dans les chapitres précédents, nous avons mis en avant certains succès et certaines limitations de l'approche de champ moyen pour décrire les réactions nucléaires. L'application de TDHF aux excitations et aux réactions nucléaires a permis des avancées importantes en physique nucléaire. Cependant, l'hypothèse de particules indépendantes amène à négliger des effets physiques qui peuvent jouer un rôle important dans les noyaux. Par exemple, certaines



corrélations de courtes et longues portées n'ont pu être incorporées en structure nucléaire qu'en traitant correctement l'appariement et, respectivement, en considérant des mélanges de configurations [Rin80].

De même, en augmentant l'énergie de collision de deux noyaux, le principe de Pauli devient moins efficace à bloquer les collisions directes entre deux nucléons dans le noyau. Il faut alors traiter explicitement les corrélations à deux corps. Ces dernières sont importantes, par exemple, pour thermaliser le système. Plusieurs approches ont été proposées pour introduire les corrélations au delà de l'approximation de particules indépendantes. Nous abordons succinctement certaines d'entre elles dans ce chapitre.

## 4.1 Champ moyen dynamique avec appariement

Dans les systèmes nucléaires une partie importante des corrélations qui est négligée lors de l'approximation de particules indépendantes correspond aux corrélations d'appariement [Rin80, Bri05]. Une méthode naturelle d'extension du champ moyen qui permet d'inclure ces corrélations est de considérer des états produits non plus de particules mais de quasi-particules, ce qui conduit à la théorie de Hartree-Fock-Bogoliubov dépendante du temps (TDHFB).

### 4.1.1 états produits de quasi-particules

Le théorème de Wick (voir annexe A) permet de calculer simplement des valeurs moyennes d'observables sur un vide quelconque, par exemple le vide de particule  $|-\rangle$ . Dans l'annexe E, nous montrons qu'un Slater est, d'une part, lui aussi un vide  $|\phi\rangle$  (appelé vide HF) et qu'il est, d'autre part, un exemple trivial de vide de quasi-particule. La transformation canonique et unitaire de l'Eq. 159 qui définit les opérateurs de création  $\hat{\beta}_\alpha^\dagger$  et d'annihilation  $\hat{\beta}_\alpha$  de la quasi-particule  $\alpha$  est appelée transformation de Bogoliubov [Bog58]. Le vide associé à ces quasi-particules s'écrit de façon générique comme

$$|\psi_{bogo}\rangle \sim \prod_k \hat{\beta}_k |-\rangle, \quad (65)$$

ce qui assure  $\hat{\beta}_i |\psi_{bogo}\rangle = 0$ .

Afin de montrer qu'un tel état permet de traiter l'appariement nucléaire, considérons le cas particulier où la transformation se met sous la forme diagonale par blocs  $2 \times 2$

$$\hat{\beta}_p = u_p \hat{a}_p - v_p \hat{a}_{\bar{p}}^\dagger, \quad \hat{\beta}_{\bar{p}} = u_{\bar{p}} \hat{a}_{\bar{p}} + v_p \hat{a}_p^\dagger. \quad (66)$$

Dans ce cas,  $v_p^2$  est la probabilité que l'état  $p$  soit occupé et  $u_p^2 = 1 - v_p^2$  celle qu'il ne le soit pas. Cette transformation est une transformation de type BCS [Bar57] où les états de particule  $p$  et  $\bar{p}$  forment une paire de Cooper. Par convention, les indices peuvent être positifs ou négatifs avec  $\bar{p} = -p$ . En effet, l'équation (65) s'écrit, en groupant les états de quasi-particules par paires et en utilisant les relations d'anticommution (120) et (121)

$$|\psi_{bogo}\rangle = \prod_{p>0} \left( u_p + v_p \hat{a}_p^\dagger \hat{a}_{\bar{p}}^\dagger \right) |-\rangle. \quad (67)$$

C'est la forme standard des états BCS qui s'écrit en terme de paires de nucléons appariés  $\{p, \bar{p}\}$ . Plus généralement, toute transformation de Bogoliubov peut se mettre sous une forme similaire à l'équation précédente en utilisant la décomposition de Bloch-Messiah-Zumino [Blo62, Zum62, Rin80]. Ainsi, l'utilisation des vides de quasi-particule plus généraux que les vides HF permet de prendre en compte des corrélations d'appariement qui étaient négligés au niveau du champ moyen.

#### 4.1.2 valeurs moyennes d'opérateurs sur un vide de quasi-particule

De la même manière que pour les vides HF, le théorème de Wick s'applique aux vides de quasi-particule. Cependant, les contractions de base ne sont plus uniquement celles associées à la matrice densité à un corps  $\rho_{\alpha\beta} = \langle \hat{a}_\beta^\dagger \hat{a}_\alpha \rangle$  mais aussi celles associées à la matrice densité anormale définie par  $\kappa_{\alpha\beta} = \langle \hat{a}_\beta \hat{a}_\alpha \rangle$  (ce qui implique aussi  $\kappa_{\alpha\beta}^* = \langle \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\beta^\dagger \rangle$ ). Ces contractions s'annulent dans le cas de particules indépendantes. L'inversion de la transformation de Bogoliubov (Eq. (159)) nous permet d'exprimer les opérateurs  $\hat{a}^\dagger$  et  $\hat{a}$  en fonction des opérateurs de quasi-particule  $\hat{\beta}^\dagger, \hat{\beta}$  :

$$\begin{cases} \hat{a}_\alpha = \sum_i U_{\alpha i} \hat{\beta}_i + V_{\alpha i}^* \hat{\beta}_i^\dagger \\ \hat{a}_\alpha^\dagger = \sum_i V_{\alpha i} \hat{\beta}_i + U_{\alpha i}^* \hat{\beta}_i^\dagger. \end{cases} \quad (68)$$

Reportant ces expressions dans les éléments de matrice de  $\rho$  et  $\kappa$  et utilisant le fait que seules les contractions  $\langle \hat{\beta}_i \hat{\beta}_i^\dagger \rangle$  sont non nulles, nous obtenons

$$\rho_{\alpha\beta} = \sum_i V_{\beta i} V_{\alpha i}^* = (V^* V^T)_{\alpha\beta}, \quad \kappa_{\alpha\beta} = (V^* U^T)_{\alpha\beta}. \quad (69)$$

L'ensemble de ces contractions est représenté par d'une matrice densité généralisée :

$$\mathcal{R} = \begin{pmatrix} \langle \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i \rangle & \langle \hat{a}_j \hat{a}_i \rangle \\ \langle \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i^\dagger \rangle & \langle \hat{a}_j \hat{a}_i^\dagger \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho & \kappa \\ -\kappa^* & 1 - \rho^* \end{pmatrix}. \quad (70)$$

Ces nouvelles contractions permettent de prendre en compte des corrélations négligées jusqu'à présent. En effet, les composantes de la matrice densité à deux corps s'écrivent

$$\begin{aligned} \rho_{ijkl}^{(2)} = \langle ij | \hat{\rho}_{12} | kl \rangle = \langle \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_j \hat{a}_i \rangle &= \overline{\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_i} \overline{\hat{a}_l^\dagger \hat{a}_j} - \overline{\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_j} \overline{\hat{a}_l^\dagger \hat{a}_i} + \overline{\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l^\dagger} \overline{\hat{a}_j \hat{a}_i} \\ &= \rho_{ik} \rho_{jl} - \rho_{il} \rho_{jk} + \kappa_{ij} \kappa_{kl}^*. \end{aligned} \quad (71)$$

Contrairement au cas d'un déterminant de Slater, la matrice de corrélation  $C_{12}$  ne s'annule pas. Dans le cas HFB, elle s'écrit sous une forme *séparable*

$$C_{ijkl} = \kappa_{ij} \kappa_{kl}^*. \quad (72)$$

Le problème est plus complexe qu'avec des vides HF. Par exemple, le nombre de particules n'est plus un bon nombre quantique. Les fluctuations associées à l'opérateur nombre de particules  $\hat{N} = \sum_\alpha \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\alpha$  s'écrivent

$$\langle \hat{N}^2 \rangle - \langle \hat{N} \rangle^2 = 2 \text{Tr}(\kappa \kappa^\dagger) = 2 \text{Tr}(\rho - \rho^2). \quad (73)$$

En général, cette quantité est non nulle pour un vide de quasi-particule. La symétrie associée au nombre de particules est donc explicitement brisée. Dans un calcul de structure, par exemple, il faut contraindre le nombre de particules moyen. Par contre, dans la théorie TDHFB, les différents moments de  $\hat{N}$  sont des constantes du mouvement. Il n'est donc pas nécessaire de contraindre le nombre de particules dans un calcul dynamique.

### 4.1.3 équations TDHFB

Différentes méthodes permettent de dériver les équations du mouvement pour un système dans l'approximation Hartree-Fock-Bogoliubov [Rin80, Ben03, Bla86]. Ici, nous considérons une généralisation de la méthode décrite au chapitre 2.2. Connaître l'évolution du vide de quasi-particule revient à connaître les équations d'évolution des  $\rho_{ij} = \langle \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i \rangle$  et  $\kappa_{ij} = \langle \hat{a}_j \hat{a}_i \rangle$ . Nous utilisons pour cela le théorème d'Ehrenfest

$$i\hbar \frac{d}{dt} \rho_{ji} = i\hbar \frac{d}{dt} \langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j \rangle = \langle [\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j, \hat{H}] \rangle, \quad (74)$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} \kappa_{ji} = i\hbar \frac{d}{dt} \langle \hat{a}_i \hat{a}_j \rangle = \langle [\hat{a}_i \hat{a}_j, \hat{H}] \rangle. \quad (75)$$

#### Équation d'évolution de la densité à un corps

Le terme de droite de l'Eq. (74) est calculé dans le cas d'un état corrélé et d'un Hamiltonien à deux corps dans le chapitre 2.2. Il suffit alors de remplacer les corrélations dans l'Eq. (29) par leur expression pour des quasi-particules indépendantes données par l'Eq. (72)

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \rho_{ji} &= \sum_k (t_{jk} \rho_{ki} - t_{ki} \rho_{jk}) + \sum_{klm} (\bar{v}_{jklm} \rho_{li} \rho_{mk} - \bar{v}_{klim} \rho_{jk} \rho_{ml}) \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{klm} (\bar{v}_{jklm} \kappa_{ik}^* \kappa_{lm} - \bar{v}_{klim} \kappa_{kl}^* \kappa_{jm}) \\ &= \sum_k (h_{jk} \rho_{ki} - h_{ik} \rho_{jk} - \Delta_{jk} \kappa_{ki}^* + \kappa_{jk} \Delta_{ki}^*). \end{aligned} \quad (76)$$

On reconnaît  $h$ , la matrice du Hamiltonien HF auquel vient s'ajouter le champ d'appariement représenté par une matrice d'éléments

$$\Delta_{ij} = \frac{1}{2} \sum_{kl} \bar{v}_{ijkl} \kappa_{kl}. \quad (77)$$

#### Équation d'évolution de $\kappa$

De manière similaire, l'équation d'évolution pour le tenseur d'appariement  $\kappa$  s'écrit

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \kappa_{ji} &= \sum_{kl} t_{kl} \langle [\hat{a}_i \hat{a}_j, \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l] \rangle + \frac{1}{4} \sum_{klmn} \bar{v}_{klmn} \langle [\hat{a}_i \hat{a}_j, \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_n \hat{a}_m] \rangle \\ i\hbar \frac{d}{dt} \kappa_{ji} &= \sum_k (t_{jk} \kappa_{ki} - t_{ik} \kappa_{kj}) + \sum_{klm} (\bar{v}_{jklm} \rho_{lk} \kappa_{mi} - \bar{v}_{kil m} \rho_{lk} \kappa_{mj}) \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{klm} (\bar{v}_{k j l m} \rho_{ik} \kappa_{lm} - \bar{v}_{k i l m} \rho_{jk} \kappa_{lm}) + \frac{1}{2} \sum_{mn} \bar{v}_{j i m n} \kappa_{mn} \\ &= \sum_k (h_{jk} \kappa_{ki} + \kappa_{jk} h_{ki}^* - \Delta_{jk} \rho_{ki}^* - \rho_{jk} \Delta_{ki}) + \Delta_{ji}. \end{aligned} \quad (78)$$

Les équations (76) et (78) se mettent sous la forme

$$i\hbar \frac{d}{dt} \rho = [h, \rho] + \kappa \Delta^* - \Delta \kappa^*, \quad (79)$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} \kappa = h\kappa + \kappa h^* - \rho \Delta - \Delta \rho^* + \Delta. \quad (80)$$

En utilisant la matrice densité généralisée  $\mathcal{R}$  et le Hamiltonien HFB généralisé  $\mathcal{H}$ , défini par

$$\mathcal{H} \equiv \begin{pmatrix} h & \Delta \\ -\Delta^* & -h^* \end{pmatrix}, \quad (81)$$

on peut écrire ces équations sous une forme condensée

$$i\hbar \frac{d\mathcal{R}}{dt} = [\mathcal{H}, \mathcal{R}]. \quad (82)$$

C'est l'équation TDHFB qui généralise l'équation TDHF (Eq. (36)) en prenant en compte les corrélations d'appariement dans la dynamique.

#### 4.1.4 application de la théorie TDHFB

En pratique, la résolution de l'équation TDHFB est plus complexe que pour la théorie TDHF. Ainsi, bien que les premières applications des théories de champ moyen à la dynamique des noyaux datent de plus de 30 ans, très peu de tentatives d'applications de la théorie TDHFB existent en raison de problèmes conceptuels et pratiques inhérents à cette théorie. La première difficulté est que les équations (TD)HFB doivent être résolues dans une base complète d'états alors que la théorie (TD)HF ne requiert qu'un nombre limité d'états (les états occupés). En pratique, il faut tronquer cette base. De plus, les calculs de champ moyen ont été rendus possible grâce aux forces dites de contact (i.e. de portée nulle, c'est à dire essentiellement les forces de Skyrme). Ces forces, très bien adaptées aux calculs (TD)HF, posent problème dans le canal d'appariement. Utiliser une telle force pour l'appariement conduit en particulier à une divergence de l'énergie de liaison lorsqu'on se place dans une base complète. En pratique, soit on utilise des forces de portée finie, soit on a recours à une troncature de la base par l'intermédiaire d'un cut-off et d'une procédure de renormalisation [Dob84, Bul02a, Bul02b, Bul03]. Bien que ces méthodes semblent être des solutions raisonnables pour le problème statique, leur mise en oeuvre dans un calcul dynamique doit être étudiée en détail.

Jusqu'à présent, la théorie TDHFB a été essentiellement appliquée sous sa forme linéarisée (méthode QRPA [Rin80, Kha02]) ou semi-classique (modèles hydrodynamiques [Tor87, Abr06]). Ce n'est que récemment que des applications en physique nucléaire avec l'interaction de Gogny ont vues le jour [Has07].

## 4.2 Quand sort-on de l'image de (quasi)particules indépendantes ?

Dans les chapitres précédents, nous avons considéré des évolutions dynamiques où l'état à  $N$  particules était contraint de rester dans une classe spécifique d'états d'essai (déterminants de Slater ou plus généralement vides de quasi-particule). Cette hypothèse ne donne qu'une approximation de la dynamique exacte. En général, nous nous attendons à ce qu'un système, initialement décrit par un état de (quasi-)particules indépendantes, s'écarte de cet état simple de façon significative au bout d'un certain temps à cause de l'interaction résiduelle.

Reprenant l'objectif initial, nous recherchons la meilleure description possible de la dynamique de systèmes quantiques auto-liés. Supposons que le système soit initialement bien décrit

par un déterminant de Slater<sup>12</sup>, *i.e.*  $|\psi(t=0)\rangle = |\phi\rangle$  avec  $|\phi\rangle = \Pi_{\alpha=1}^N \hat{a}_{\alpha}^{\dagger} |-\rangle$ , où  $\alpha$  est l'indice des états initialement occupés (états de trou). La dynamique exacte de ce système est donnée par l'équation de Schroedinger dépendant du temps (Eq. (2)). Les théories de champ moyen, quant à elles, ne donnent qu'une évolution approchée du système<sup>13</sup>.

#### 4.2.1 décomposition du Hamiltonien sur la base des états de particule (p) et de trou (h)

Pour décrire un système de particules indépendantes, nous n'avons besoin que des états occupés. Cependant, les nucléons dans un noyau ne sont pas totalement indépendants et la description en champ moyen n'est pas exacte. Pour préciser ce qui manque dans la description de champ moyen, nous complétons les états occupés par un jeu (éventuellement infini) d'états à une particule non occupés (aussi appelés états de particule). Indiquons ces états par  $\bar{\alpha}$  (associé aux créateurs/annihilateurs  $\hat{a}_{\bar{\alpha}}^{\dagger}$  et  $\hat{a}_{\bar{\alpha}}$ ). La base complète vérifie

$$\sum_{\alpha} |\alpha\rangle \langle\alpha| + \sum_{\bar{\alpha}} |\bar{\alpha}\rangle \langle\bar{\alpha}| \equiv \hat{\rho} + (1 - \hat{\rho}) = \hat{1}. \quad (83)$$

En utilisant la relation de fermeture ci-dessus, tout opérateur de création  $\hat{a}_i^{\dagger}$  associé à un état à une particule  $|i\rangle$  se décompose comme

$$\hat{a}_i^{\dagger} = \sum_{\alpha} \hat{a}_{\alpha}^{\dagger} \langle\alpha|i\rangle + \sum_{\bar{\alpha}} \hat{a}_{\bar{\alpha}}^{\dagger} \langle\bar{\alpha}|i\rangle. \quad (84)$$

La base de particule-trou est particulièrement utile pour exprimer l'action d'un opérateur sur l'état  $|\phi\rangle$  grâce aux propriétés

$$\hat{a}_{\alpha}^{\dagger} |\phi\rangle = \hat{a}_{\bar{\alpha}} |\phi\rangle = 0. \quad (85)$$

Reprenons l'expression générale de  $\hat{H}$  (Eq. (5)) et remplaçons les opérateurs de création des particules ( $i, j, k, l$ ) par leurs expressions dans la base de particule-trou données par l'Eq. (84) et son Hermitique conjugué. En utilisant les relations d'anticommuation (120) et (121), les propriétés  $\bar{v}_{ijkl} = -\bar{v}_{jikl} = -\bar{v}_{ijlk} = \bar{v}_{jilk}$  et  $\text{Tr}_{12}(\bar{v}_{12}\rho_1\rho_2(1 - P_{12})) = 2\text{Tr}_{12}(\bar{v}_{12}\rho_1\rho_2)$  ainsi que les Eqs. (20), (31), (35) et (85), on montre que

$$\begin{aligned} \hat{H}|\phi\rangle &= \left\{ E[\rho] + \sum_{\bar{\alpha}\alpha} h[\rho]_{\bar{\alpha}\alpha} \hat{a}_{\bar{\alpha}}^{\dagger} \hat{a}_{\alpha} \right. && \Longleftrightarrow \hat{H}_{CM}[\rho] \\ &+ \frac{1}{4} \sum_{\bar{\alpha}\bar{\beta}\alpha\beta} \bar{v}_{\bar{\alpha}\bar{\beta}\beta\alpha} \hat{a}_{\bar{\alpha}}^{\dagger} \hat{a}_{\bar{\beta}}^{\dagger} \hat{a}_{\beta} \hat{a}_{\alpha} && \Longleftrightarrow \hat{V}_{res}[\rho] \\ &\left. \right\} |\phi\rangle \end{aligned} \quad (86)$$

où  $E[\rho] = \langle\phi|\hat{H}_{CM}|\phi\rangle = \text{Tr}[\rho(t + \frac{1}{2}U[\rho])]$  est l'énergie Hartree-Fock. Cette expression permet ainsi de comprendre l'approximation faite lorsque l'on se limite à une description de champ moyen, c'est à dire lorsqu'on néglige l'interaction résiduelle  $\hat{V}_{res}$  et qu'on ne garde que la partie champ moyen  $\hat{H}_{CM}$  du Hamiltonien. Précédemment, nous avons montré que le champ moyen permettait de décrire approximativement les degrés de liberté à un corps. Pour cela, nous avons utilisé le théorème d'Ehrenfest. Dans l'annexe G, nous proposons une autre dérivation de TDHF à l'aide du théorème de Thouless [Tho61]. La base de particule-trou est utilisée à chaque instant et l'approximation de champ moyen est faite explicitement en négligeant l'interaction résiduelle  $\hat{V}_{res}$ .

<sup>12</sup>La discussion ci-dessous se généralise aisément au cas d'un vide de quasi-particule.

<sup>13</sup>L'évolution en champ moyen n'est exacte que dans le cas particulier où le Hamiltonien ne contient que des opérateurs à un corps.

### 4.2.2 limitation de la théorie de champ moyen

Dans l'expression (86), il y a une séparation claire entre ce qui est traité proprement au niveau du champ moyen  $\hat{H}_{CM}[\rho]$  et ce qui est négligé, *i.e.* l'interaction résiduelle  $\hat{V}_{res}[\rho]$ . Auto-risons nous quelques commentaires :

- La validité de l'approximation de champ moyen dépend de l'intensité de l'interaction résiduelle qui elle-même dépend de l'état  $|\phi\rangle$  et donc de la situation physique. À partir d'arguments simples [Lic76], le temps  $\tau_{SD}$  à partir duquel l'image de particules indépendantes n'est plus valide peut s'exprimer par

$$\tau_{SD} = \frac{\hbar}{2} \left( \frac{1}{N} \sum_{\bar{\alpha}\bar{\beta}\alpha\beta} |\langle \bar{\alpha}\bar{\beta} | \hat{v} | \alpha\beta \rangle|^2 \right)^{-1/2}. \quad (87)$$

En physique nucléaire, les valeurs typiques de l'interaction résiduelle mènent à  $\tau_{SD} \simeq 100 - 200$  fm/c. Ainsi, même si initialement l'état se compose de particules indépendantes, l'évolution exacte dévie assez vite de la dynamique de champ moyen. Ce point est une motivation solide pour utiliser des théories au-delà du champ moyen en physique nucléaire.

- Il existe une expression alternative de l'interaction résiduelle valide dans n'importe quelle base

$$V_{res}[\rho]_{12} = \frac{1}{4} (1 - \hat{\rho}_1)(1 - \hat{\rho}_2) \bar{v}_{12} \rho_1 \rho_2. \quad (88)$$

Cette expression illustre le fait que l'interaction résiduelle associée à un Slater peut être interprétée comme une interaction "habillée" par la matrice densité de telle sorte qu'elle couple les états de particule aux états de trou, prenant ainsi en compte proprement le principe de Pauli. Physiquement, l'interaction résiduelle correspond à des collisions directes nucléon-nucléon entre des états occupés (2 trous) qui ne peuvent diffuser que vers des états non occupés (2 particules) à cause du blocage de Pauli. Nous disons parfois que l'interaction résiduelle a une nature 2 particules - 2 trous (2p-2h).

À cause de l'interaction résiduelle, l'état exact à  $N$  particules se décompose comme une superposition de plus en plus complexe de déterminants de Slater durant l'évolution. Comme nous l'avons mentionné dans l'introduction de ce cours, la dynamique exacte est rarement accessible à cause de la complexité du problème à  $N$  corps nucléaire. L'approximation de particules indépendantes est l'approximation "zéro" en physique nucléaire. Elle donne une image trop simple des noyaux mais constitue un excellent point de départ pour inclure des corrélations. Dans le chapitre suivant, l'inclusion de corrélations au delà du champ moyen, comme les collisions nucléon-nucléon ou l'appariement sont discutées.

## 4.3 Dynamique corrélée générale : la hiérarchie BBGKY

En utilisant le théorème d'Ehrenfest (voir chapitre 2.1.4), nous avons montré que la théorie de champ moyen permettait de décrire l'évolution des degrés de liberté à un corps. Une extension naturelle du champ moyen est de suivre explicitement les degrés de liberté à deux corps. Considérons donc, maintenant, le théorème d'Ehrenfest pour les degrés de liberté à un et deux corps. Cela mène à deux équations couplées pour les éléments des matrices densité à un et deux corps  $\rho_{ij}^{(1)} = \langle \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i \rangle$  et  $\rho_{ijkl}^{(2)} = \langle \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_j \rangle$

$$\begin{cases} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rho_1 = [t_1, \rho_1] + \frac{1}{2} \text{Tr}_2 [\bar{v}_{12}, \rho_{12}] \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rho_{12} = [t_1 + t_2 + \frac{1}{2} \bar{v}_{12}, \rho_{12}] + \frac{1}{2} \text{Tr}_3 [\bar{v}_{13} + \bar{v}_{23}, \rho_{123}]. \end{cases} \quad (89)$$

Ces équations sont les deux premières d'une hiérarchie d'équations appelée la hiérarchie de Bogoliubov-Born-Green-Kirkwood-Yvon (BBGKY) [Bog46, Bor46, Kir46] où l'évolution de la densité à trois corps est aussi couplée à la densité à 4 corps et ainsi de suite. Ici, nous nous restreignons aux équations sur  $\rho^{(1)}$  et  $\rho^{(2)}$  qui ont souvent servi de point de départ des théories au delà du champ moyen [Cas90, Rei94, Rei96, Ayi04].

#### 4.4 La théorie de la matrice densité dépendant du temps (TDDM)

Nous avons montré que l'équation d'évolution de la matrice densité à un corps se réduit à l'équation TDHF si on néglige les corrélations à deux corps et au delà. C'est alors que les équation sur  $\rho^{(1)}$  se réduisent à l'équation TDHF. Une extension naturelle qui inclut des effets à deux corps est de traiter explicitement les corrélations à deux corps et de négliger celles à trois corps ( $C_{123} = 0$ ) et au delà<sup>14</sup>. Nous obtenons une théorie où la densité à un corps  $\rho_1$  et les corrélations à deux corps  $C_{12}$  sont suivies au cours du temps. C'est la théorie de la "matrice densité dépendant du temps" (TDDM) (voir par exemple [Cas90])

$$\left\{ \begin{array}{l} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rho_1 = [h_1[\rho], \rho_1] + \frac{1}{2} \text{Tr}_2 [\bar{v}_{12}, C_{12}] \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} C_{12} = [h_1[\rho] + h_2[\rho], C_{12}] \\ \quad + \frac{1}{2} \left\{ (1 - \rho_1)(1 - \rho_2) \bar{v}_{12} \rho_1 \rho_2 - \rho_1 \rho_2 \bar{v}_{12} (1 - \rho_1)(1 - \rho_2) \right\} \iff B_{12} \\ \quad + \frac{1}{2} \left\{ (1 - \rho_1 - \rho_2) \bar{v}_{12} C_{12} - C_{12} \bar{v}_{12} (1 - \rho_1 - \rho_2) \right\} \iff P_{12} \\ \quad + \text{Tr}_3 [\bar{v}_{13}, (1 - P_{13}) \rho_1 C_{23} (1 - P_{12})] \\ \quad + \text{Tr}_3 [\bar{v}_{23}, (1 - P_{23}) \rho_1 C_{23} (1 - P_{12})] \iff H_{12} \end{array} \right. \quad (92)$$

Nous identifions trois termes responsables de l'apparition des corrélations au cours du temps. Le premier,  $B_{12}$ , appelé le *terme de Born*, contient la physique des collisions directes nucléon-nucléon dans le milieu. En comparant  $B_{12}$  à l'Eq. (88), nous remarquons qu'il est proportionnel à l'interaction résiduelle. En effet, si nous partons d'un déterminant de Slater, alors c'est le seul terme non nul dans l'évolution de  $C_{12}$  sur un temps court. En particulier, c'est lui qui fait sortir le système du sous-espace des déterminants de Slater. L'interprétation physique des termes  $P_{12}$  et  $H_{12}$  est moins évidente. Par exemple, nous pouvons montrer que  $P_{12}$  est relié aux corrélations d'appariement [Toh04] (voir plus loin) tandis que  $H_{12}$  contient des corrélations  $p-p$  et  $h-h$  d'ordre supérieur. Le dernier terme est parfois modifié pour mieux traiter les lois de conservation (voir discussion dans [Pet94]).

Les applications de TDDM rencontrent deux difficultés majeures. Tout d'abord, nous considérons explicitement des degrés de liberté à deux corps. Nous travaillons donc, numériquement, avec des matrices de grandes tailles qu'il est nécessaire de tronquer. Ensuite, pour que les applications numériques ne soient pas trop lourdes, il est nécessaire d'utiliser des interactions de contact comme l'interaction de Skyrme par exemple. Ces interactions, qui ont une portée nulle dans l'espace des coordonnées  $\mathbf{r}$ , sont donc de portée infinie dans l'espace des impulsions  $\mathbf{k}$ . Ce comportement non physique de l'interaction est critique en pratique. En effet, lors de collisions nucléon-nucléon, les particules peuvent diffuser vers des états d'impulsion trop élevée. Il n'y a pas de solution triviale à ce problème dans le cadre de TDDM [Ayi04]. À cause

<sup>14</sup>En utilisant l'opérateur de permutation  $P_{12}$  entre deux particules ( $P_{12} |ij\rangle = |ji\rangle$ ), la matrice des corrélations à deux corps s'écrit

$$C_{12} = \rho_{12} - \rho_1 \rho_2 (1 - P_{12}) \quad (90)$$

tandis que celle des corrélations à trois corps  $C_{123}$  devient

$$C_{123} = \rho_{123} - \rho_1 C_{23} (1 - P_{12} - P_{13}) - \rho_2 C_{13} (1 - P_{21} - P_{23}) - \rho_3 C_{12} (1 - P_{31} - P_{32}) - \rho_1 \rho_2 \rho_3 (1 - P_{13}) (1 - P_{12} - P_{23}). \quad (91)$$

de ces difficultés, seules quelques applications ont été réalisées pour des vibrations collectives [Deb92, Luo99, Toh01, Toh02a], et très récemment pour des collisions nucléaires [Toh02b].

## 4.5 Liens entre TDDM et TDHFB

Le lien entre TDDM et TDHFB a été établi par Tohyama [Toh04]. En supposant des corrélations séparables dans les canaux p-p et h-h comme dans l'équation (72), nous obtenons

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \text{Tr}_2 [\bar{v}_{12}, C_{12}]_{\lambda\lambda'} &= \frac{1}{2} \sum_{kmn} \bar{v}_{\lambda kmn} C_{mn\lambda'k} - \frac{1}{2} C_{\lambda kmn} \bar{v}_{mn\lambda'k} \\ &= \Delta_{\lambda k} \kappa_{\lambda'k}^* - \kappa_{\lambda k} \Delta_{\lambda'k}^* = (\kappa \Delta^* - \Delta \kappa^*)_{\lambda\lambda'} \end{aligned} \quad (93)$$

où  $\Delta$  est le champ d'appariement défini dans l'Eq. (77). Alors, l'évolution de la densité à un corps (première ligne de l'Eq. (92)) se réduit à

$$i\hbar \frac{d}{dt} \rho = [h[\rho], \rho] + \kappa \Delta^* - \Delta \kappa^*. \quad (94)$$

On retrouve ainsi l'Eq. (79) obtenue avec TDHFB.

Dans la référence [Toh04], Tohyama montre que négliger les termes  $B$  et  $H$  dans la seconde équation de (92) mène à une équation de type TDHFB pour les corrélations à deux corps. En ne gardant que  $P$  dans l'évolution de  $C_{12}$  dans l'Eq. (92) et en supposant toujours des corrélations séparables de la forme de l'Eq. (72), nous avons alors

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} C_{ijkl} &= i\hbar \left\{ \frac{d\kappa_{ij}}{dt} \kappa_{kl}^* + \kappa_{ij} \frac{d\kappa_{kl}^*}{dt} \right\} \\ &= \left[ \sum_m (h_{im} \kappa_{mj} + h_{jm} \kappa_{im}) + \frac{1}{2} \sum_{mnpq} (\delta_{im} \delta_{jn} - \delta_{im} \rho_{jn} - \delta_{jn} \rho_{im}) \bar{v}_{mnpq} \kappa_{pq} \right] \kappa_{kl}^* \\ &\quad - \kappa_{ij} \left[ \sum_m (\kappa_{ml}^* h_{mk} + \kappa_{km}^* h_{ml}) + \frac{1}{2} \sum_{mnpq} \kappa_{mn}^* \bar{v}_{mnpq} (\delta_{kp} \delta_{lq} - \delta_{kp} \rho_{ql} - \delta_{lq} \rho_{pk}) \right] \end{aligned} \quad (95)$$

où nous avons identifié les termes proportionnels à  $\kappa_{ij}$  et  $\kappa_{kl}^*$ . Ce dernier donne

$$i\hbar \partial_t \kappa_{ij} = \sum_m (h_{im} \kappa_{mj} + \kappa_{im} h_{mj}^*) + \frac{1}{2} \sum_{mn} (\bar{v}_{ijmn} - \sum_p \rho_{ip} \bar{v}_{pjmn} - \sum_p \rho_{jp} \bar{v}_{ipmn}) \kappa_{mn} \quad (96)$$

En utilisant l'expression du champ d'appariement (Eq. (77)), nous obtenons finalement l'équation TDHFB (Eq. (80)) donnant l'évolution du champ d'appariement. L'équation ci-dessus n'assure pas le fait que la matrice des corrélations demeure séparable au cours du temps. Cependant, en supposant qu'elle le soit, c'est à dire que  $C_{ijkl}(t) \simeq \kappa_{ij}(t) \kappa_{kl}^*(t)$  soit valide à tous temps, l'équation du mouvement s'identifie alors avec l'équation TDHFB. Notons qu'il s'agit d'une dérivation alternative de l'équation TDHFB en partant de TDDM, ce qui permet, en outre, d'illustrer le contenu physique de  $P$ .

## 4.6 TDHF étendu et stochastique

Les corrélations d'appariement deviennent moins importantes lorsque l'excitation interne du système augmente. C'est alors que les collisions directes nucléon-nucléon sont supposées dominer les corrélations au delà du champ moyen. Il est possible de traiter cette partie des corrélations tout en échappant à la complexité de TDDM. Pour cela, il faut se focaliser sur l'évolution de



la matrice densité à un corps (comme pour TDHF), et traiter l'effet des corrélations sur cette évolution approximativement. Nous pouvons, par exemple, négliger les termes  $P$  et  $H$  dans l'évolution de  $C_{12}$  [Won78, Won79, Dan84, Bot90, Ayi80]. Ainsi, l'équation pour les corrélations à deux corps prend une forme simple

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} C_{12} - [h_1[\rho] + h_2[\rho], C_{12}] = B_{12}. \quad (97)$$

Pour résoudre cette équation formellement, développons les corrélations sur un intervalle de temps entre  $t_0$  et  $t$  comme

$$C_{12}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t U_{12}(t, s) B_{12}(s) U_{12}^\dagger(t, s) ds + \delta C_{12}(t), \quad (98)$$

où  $U_{12}(t, s)$  représente la propagation de deux particules indépendantes,  $U_{12} = U_1 \otimes U_2$  avec  $U(t, s) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_s^t h[\rho(t')] dt'\right)$ . Dans l'expression (98), le premier terme représente les corrélations générées par l'interaction résiduelle durant cet intervalle de temps. Le second terme décrit la propagation des corrélations présentes initialement dans le système  $C_{12}(t_0)$  de  $t_0$  à  $t$ , *i.e.*  $\delta C_{12}(t) = U_{12}(t, t_0) C_{12}(t_0) U_{12}^\dagger(t, t_0)$ . En reportant cette expression dans l'évolution de la matrice densité à un corps  $\rho$ , nous obtenons une généralisation de la théorie TDHF

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rho = [h[\rho], \rho] + K[\rho] + \delta K(t), \quad (99)$$

où  $K[\rho]$ , appelé *terme de collision*, s'écrit

$$K[\rho]_1 = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t ds \text{Tr}_2[v_{12}, U_{12}(t, s) B_{12}(s) U_{12}^\dagger(t, s)], \quad (100)$$

tandis que  $\delta K(t)$  est donné par

$$\delta K_1(t) = \text{Tr}_2[v_{12}, \delta C_{12}(t)]. \quad (101)$$

Le terme  $\delta K(t)$ , qui prend en compte les corrélations initiales  $C_{12}(t_0)$  est dominant à  $t_0$ . En principe, ce terme contient tous les corrélations à tous les ordres qui se sont accumulées jusqu'au temps  $t_0$ . Il s'agit donc, *a priori*, d'une quantité complexe à décrire et son traitement va clairement au delà d'une théorie de transport à un corps et une hypothèse statistique est généralement faite sur les corrélations initiales. Nous supposons donc que les corrélations exactes à deux corps accumulées jusqu'au temps  $t_0$  correspondent à des fluctuations aléatoires. Il en résulte que la valeur moyenne des corrélations initiales est nulle. Cette hypothèse est connue sous le nom de *chaos moléculaire* en théorie classique des transports. Cette hypothèse équivaut à supposer que nous pouvons factoriser l'espace des phases de la densité à deux particules avant chaque collision [Kad62, Hua62]. L'équation (99) est alors remplacée par un ensemble d'évolutions à un corps

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rho^n = [h[\rho^n], \rho^n] + K[\rho^n] + \delta K^n(t) \quad (102)$$

où " $n$ " indique le chemin stochastique en question et où  $\delta K^n(t)$  représente un opérateurs qui fluctue et qui s'annule en moyenne. La description statistique complète de  $\delta K^n(t)$  peut être trouvée dans [Ayi01, Ayi04]. L'équation (102) est le point de départ de la plupart des théories de transport qui sont utilisées de nos jours dans la description des collisions d'ions lourds aux énergies intermédiaires. Cependant, à cause de sa complexité, l'équation (102) a été appliquée dans des cas réalistes essentiellement sous sa forme semi-classique, connue sous le nom de la théorie de Boltzmann-Langevin (voir [Cho04] pour une revue récente). Les réactions nucléaires à basse énergie sortent du cadre stricte d'application d'une telle approche semi-classique et nous nous focalisons sur sa version quantique dans la suite.

#### 4.6.1 évolution moyenne : processus irréversibles dans TDHF étendu

Nous nous concentrons tout d'abord sur l'évolution moyenne et illustrons l'avantage de l'introduction d'un terme de collision en plus de la dynamique de champ moyen. En prenant la moyenne de l'équation (102) sur les différentes trajectoires, nous obtenons une équation où  $\rho^n$  est remplacée par la moyenne de la densité à un corps, notée  $\bar{\rho}$  et où seul le terme de collision  $K[\rho]$  reste. La théorie obtenue est appelée TDHF étendu (ETDHF) avec un terme de collision non-Markovien (ou encore avec des *effets de mémoire*). Le terme "non-Markovien" (par opposition à Markovien) vient du fait que le système au temps  $t$  dépend non seulement de la densité à cet instant, mais aussi de toute son histoire à cause de la présence de l'intégrale en temps dans l'Eq. (100).

Il est possible de trouver, à chaque instant, les états propres  $|\alpha(t)\rangle$  de  $\bar{\rho}(t)$ , l'opérateur dans l'espace de Hilbert à une particule associé à  $\bar{\rho}(t)$ . Cette base d'états propres est appelée *base naturelle* ou encore *base canonique*. La matrice densité moyenne s'écrit alors

$$\hat{\bar{\rho}}(t) = \sum_{\alpha} |\alpha(t)\rangle n_{\alpha}(t) \langle \alpha(t)|. \quad (103)$$

En faisant l'*hypothèse de couplage faible* et en utilisant la théorie des perturbations au premier ordre, l'équation ETDHF peut se transformer en une équation maîtresse généralisée qui donne l'évolution des nombres d'occupation en tenant compte du principe de Pauli

$$\frac{d}{dt}n_{\alpha}(t) = \int_{t_0}^t ds \{ (1 - n_{\alpha}(s)) \mathcal{W}_{\alpha}^{+}(t, s) - n_{\alpha}(s) \mathcal{W}_{\alpha}^{-}(t, s) \}. \quad (104)$$

où la forme explicite des noyaux associés au gain  $\mathcal{W}_{\alpha}^{+}$  et à la perte  $\mathcal{W}_{\alpha}^{-}$  sont donnés dans [Lac99]. Ainsi, contrairement à TDHF où les nombres d'occupation sont constants au cours du temps, dans ETDHF, les  $n_{\alpha}$  évoluent et peuvent éventuellement s'équilibrer pour décrire un noyau thermalisé. Dans la référence [Lac99], l'inclusion des corrélations avec ETDHF a été testée dans le cas simple de deux nucléons en interaction dans un potentiel extérieur harmonique à une dimension. Dans ce cas, la dynamique exacte peut être résolue numériquement. Sur la figure 15, nous comparons l'évolution exacte des nombres d'occupation à la prédiction ETDHF dans le cas où le système est initialement décrit par un état non corrélé.

La figure 15 montre que ETDHF est capable de reproduire l'évolution exacte des nombres d'occupation et d'une observable à un corps sur un temps long (voir [Lac99] pour les détails du calcul). Ce résultat est encourageant et indique que ETDHF est appropriée pour décrire la dissipation quand l'interaction résiduelle est faible. Cette application a aussi montré l'importance des effets de mémoire pour décrire proprement des systèmes quantiques en interaction, et ce au prix d'un accroissement significatif de l'effort numérique.

#### 4.6.2 discussion sur TDHF stochastique

L'hypothèse sous-jacente de ETDHF limite son cadre d'application sur des temps courts. La dynamique sur des temps longs nécessite l'inclusion à la fois de la dissipation et des fluctuations et donc de résoudre explicitement la version stochastique de la théorie de transport (Eq. (102)) appelée TDHF stochastique (STDHF). Jusqu'à maintenant, STDHF a été essentiellement appliqué dans la limite semi-classique en négligeant les effets non-Markoviens. Ce n'est que récemment que la théorie quantique incluant tous les effets de mémoire a été appliquée à l'étude des vibrations de petite amplitude [Lac01]. Dans ce cas, la description de l'amortissement des résonances géantes est considérablement améliorée en incluant à la fois les noyaux associés à la dissipation et aux fluctuations. Cependant, à cause de difficultés numériques et conceptuelles, l'application de la mécanique quantique stochastique aux grandes amplitudes, comme les collisions nucléaires, reste un problème ouvert.

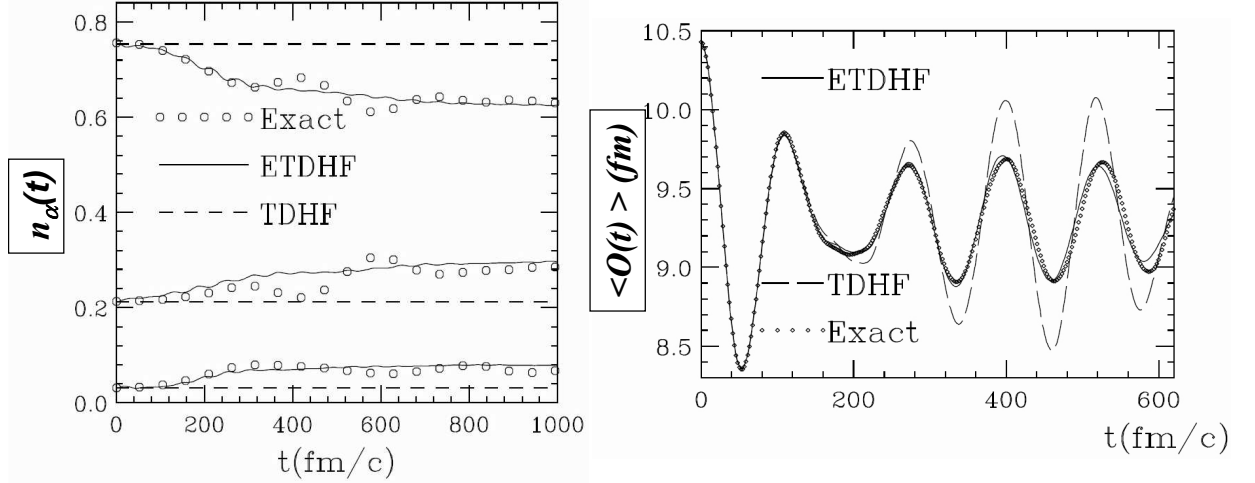


FIG. 15 – Évolutions exacte (cercles), TDHF (tirets) et ETDHF (ligne) de deux nucléons en interaction dans un potentiel extérieur harmonique. À gauche : nombres d’occupation ; à droite : position du centre de masse (tiré de [Lac99]).

Notons que de nombreux travaux sont dédiés aux dérivations formelles de la mécanique quantique dissipative [Kad62] et/ou aux équations stochastiques pour des fermions incluant des effets Markoviens et non-Markoviens [Ayi80, Wei81, Bal81, Ayi88, Lac01, Rei92a, Rei92b, Ohn95]. Dans toutes ces approches, la partie résiduelle de l’interaction introduit du désordre par dessus le champ moyen. Elles aboutissent à des équations de transport complexes difficilement applicables à des cas réalistes. Notons le lien établi récemment entre les équations dissipatives de l’évolution de la matrice densité à un corps et les sauts quantiques entre déterminants de Slater en utilisant soit la théorie des perturbations, soit la connexion entre ETDHF [Rei92a, Rei92b] et les équations de Lindblad [Lac06a] généralement présente dans les théories de systèmes quantiques ouverts [Bre02]. De nouvelles perspectives sont offertes par ces théories dans lesquelles la densité à  $N$  corps est explicitement remplacée par une moyenne sur les densités associées aux déterminants de Slater  $D = \overline{|\phi^n\rangle\langle\phi^n|}$  évoluant selon une équation STDHF.

## 4.7 Intégrale fonctionnelle et traitement exact du problème à $N$ corps d’un système corrélé avec des théories de champ moyen stochastique

### 4.7.1 discussion générale

Partant, à l’instant initial, d’un déterminant de Slater  $|\psi(t=0)\rangle = |\phi(t_0)\rangle$ , les corrélations vont se développer au cours du temps, menant à un état corrélé que l’on peut écrire

$$|\psi(t)\rangle = \sum_k c_k(t) |\phi_k(t)\rangle \quad (105)$$

où  $|\phi_k\rangle$  est une base complète de déterminants de Slater, éventuellement dépendants du temps. De ce fait, la densité à  $N$  corps s’écrit (voir annexe C)

$$\hat{D}(t) = \sum_{k,k'} c_k(t) c_{k'}^*(t) |\phi_k(t)\rangle \langle\phi_{k'}(t)| \quad (106)$$

Les versions étendue et stochastique de TDHF, présentées au chapitre 4.6, approximent implicitement la matrice densité à  $N$  corps du système par sa partie diagonale [Rei92a, Lac06a]

$$\hat{D}(t) \simeq \sum_k P_k |\phi_k(t)\rangle \langle \phi_k(t)| \quad (107)$$

où  $P_k = |c_k(t)|^2$ . Ainsi, les probabilités  $P_k$  obéissent à une équation maîtresse qui, éventuellement, peut être simulée par des sauts quantiques. La matrice densité s'obtient en effectuant la moyenne sur les chemins stochastiques, *i.e.*

$$\hat{D}(t) \simeq \overline{|\phi_k(t)\rangle \langle \phi_k(t)|}. \quad (108)$$

Voici ce que cela signifie physiquement. Les degrés de liberté non pertinents (internes et complexes) interagissent avec les degrés de liberté pertinents (à une particule) et induisent une décroissance rapide vers zéro des éléments de matrices hors diagonaux. Ce phénomène est un processus de décohérence [Kue73, Kie03]. Il est clair qu'une telle approximation induit une perte d'effets quantiques comme les interférences entre les différentes voies. Nous nous attendons donc à ce que TDHF et toutes ses extensions décrites précédemment échouent dans la description d'effets purement quantiques à  $N$  corps.

L'objectif de ce chapitre est de démontrer qu'il est toujours possible de traiter exactement la matrice densité à  $N$  corps donnée par l'Eq. (106) grâce à un processus stochastique approprié entre les déterminants de Slater. La densité exacte sera obtenue par la moyenne des trajectoires stochastiques

$$\hat{D}(t) \simeq \overline{|\phi_k(t)\rangle \langle \phi'_k(t)|} \quad (109)$$

où les états de gauche diffèrent de ceux de droite.

#### 4.7.2 techniques de l'intégrale fonctionnelle dans un cas modèle

Les techniques de l'intégrale fonctionnelle ont souvent été utilisées pour remplacer le problème à  $N$  corps exact par une moyenne sur différents problèmes à un corps effectifs [Lev80a, Lev80b, Neg88]. Dans la référence [Koo97], les auteurs utilisent une méthode Monte-Carlo, appelée *Shell-Model Monte-Carlo* (SMMC), pour obtenir les propriétés des états fondamentaux du système à  $N$  corps. Récemment, cette technique a été combinée avec la théorie de champ moyen pour obtenir les équations TDHF stochastiques qui, en moyenne, mènent à l'évolution exacte [Car01, Jui02]. Nous donnons ici une brève description de ces méthodes.

#### 4.7.3 introduction aux intégrales fonctionnelles

Nous faisons une fois encore l'approximation qu'à un temps donné, l'état du système est un déterminant de Slater  $|\psi(t)\rangle = |\phi\rangle$ . Sur un petit pas en temps  $\Delta t$ , nous avons

$$|\psi(t + \Delta t)\rangle = \exp\left(\frac{\Delta t}{i\hbar} \hat{H}\right) |\phi(t)\rangle \simeq \left(1 + \frac{\Delta t}{i\hbar} \hat{H} + o(\Delta t)\right) |\phi(t)\rangle. \quad (110)$$

L'état  $|\psi(t + \Delta t)\rangle$  n'est plus un état de particules indépendantes à cause de la présence d'une interaction à deux corps dans  $\hat{H}$ . Cependant, il peut toujours s'écrire comme une somme de déterminants de Slater. Par simplicité, nous supposons que le Hamiltonien  $\hat{H}$  s'écrit comme la somme d'un opérateur à un corps  $\hat{H}_1$  et du carré d'un opérateur à un corps<sup>15</sup>  $\hat{O}$ , *i.e.*  $\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{O}^2$ .

---

<sup>15</sup>Le carré d'un opérateur à un corps contient une partie "un corps" et une partie "deux corps". En effet, en utilisant les relations (120) et (121), on montre que  $\left(\sum_{ij} f_{ij} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j\right)^2 = \sum_{ijk} f_{ik} f_{kj} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \sum_{ijkl} f_{ij} f_{kl} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_j$ .

Introduisons la notation  $G(x)$  pour une distribution de probabilités Gaussienne et normalisée de la variable  $x$  avec pour valeur moyenne zéro et pour variance 1

$$\overline{x} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \ x G(x) = 0, \quad \overline{x^2} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \ x^2 G(x) = 1. \quad (111)$$

Définissons le nombre complexe  $\Delta\omega \equiv \sqrt{\frac{2\Delta t}{i\hbar}}$  et l'opérateur à un corps  $\hat{S}(\Delta t, x)$  par

$$\hat{S}(\Delta t, x) \equiv \frac{\Delta t}{i\hbar} \hat{H}_1 + x \Delta\omega \hat{O}. \quad (112)$$

En prenant la valeur moyenne sur  $x$  de  $e^{\hat{S}(\Delta t, x)}$  et en ne gardant que les termes d'ordre  $\Delta t$ , nous obtenons

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \ e^{\hat{S}(\Delta t, x)} G(x) = 1 + \frac{\Delta t}{i\hbar} \hat{H}_1 + \overline{x} \Delta\omega \hat{O} + \frac{1}{2} \overline{x^2} (\Delta\omega)^2 \hat{O}^2 + o(\Delta t) = 1 + \frac{\Delta t}{i\hbar} \hat{H} + o(\Delta t). \quad (113)$$

Nous retrouvons le propagateur exact sur un temps court. Notons que des relations plus générales peuvent être obtenues en utilisant la transformation de Hubbard-Stratonovich (voir par exemple [Koo97]). En utilisant la relation ci-dessus, nous voyons que

$$\exp\left(\frac{\Delta t}{i\hbar} \hat{H}\right) |\phi(t)\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \ G(x) e^{\hat{S}(\Delta t, x)} |\phi(t)\rangle \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} dx \ G(x) |\phi_x(t + \Delta t)\rangle. \quad (114)$$

Chaque  $|\phi_x(t + \Delta t)\rangle$  est un déterminant de Slater grâce à la nature "un corps" de  $\hat{S}$ . En effet, le théorème de Thouless [Tho61] stipule que l'exponentielle d'un opérateur à un corps transforme un Slater en un autre Slater (voir annexe G pour le cas d'une transformation unitaire). Nous avons ainsi montré que l'évolution exacte peut-être obtenue en remplaçant l'état exact par un ensemble de déterminants de Slater.

La technique peut être itérée pour chaque  $|\phi_x(t + \Delta t)\rangle$  afin d'obtenir la dynamique exacte sur un temps long comme une moyenne sur des déterminants de Slater. Autorisons-nous quelques commentaires :

- La dynamique ne préserve pas l'orthogonalité des fonctions d'onde à une particule puisque  $\hat{S}(\Delta t, x)$  n'est a priori pas Hermitique. Cette non-orthogonalité doit être traitée proprement durant l'évolution en temps [Jui02, Lac05].
- En partant de la densité à  $N$  corps  $\hat{D}(t) = |\phi(t)\rangle \langle \phi(t)|$  à un temps intermédiaire, la densité moyenne s'écrit avec deux états

$$\hat{D}(t) = \overline{|\phi_1(t)\rangle \langle \phi_2(t)|}. \quad (115)$$

L'état  $|\phi_1\rangle$  évolue selon l'Eq. (114) tandis que  $\langle \phi_2|$  évolue selon

$$\langle \phi_2(t + \Delta t)| = \langle \phi_2(t)| \exp\left\{-\frac{\Delta t}{i\hbar} \hat{H}_1 + y \Delta\omega^* \hat{O}\right\} \quad (116)$$

où  $y$  est un *bruit* indépendant de  $x$  avec une moyenne en zéro et  $\overline{y^2} = 1$ . Puisque l'évolution est exacte, toute observable à un, deux ou  $k$  corps  $\hat{A}$  estimée par  $\langle \hat{A} \rangle \equiv \text{Tr}(\hat{D}(t) \hat{A})$  suit elle aussi la dynamique exacte.

#### 4.7.4 Hamiltonien général à $N$ corps

Au chapitre précédent, nous avons montré comment la dynamique d'un Hamiltonien à deux corps simplifié, pouvait être remplacée par un processus stochastique entre déterminants de Slater. Nous utilisons maintenant l'expression (86) comme un point de départ pour introduire l'évolution en champ moyen stochastique (SMF). Dans cette expression, le Hamiltonien est naturellement décomposé en une partie à un corps  $\hat{H}_{CM}$  et une partie à deux corps  $\hat{V}_{res}[\rho]$ . Or, l'interaction résiduelle peut toujours être écrite comme une somme de carrés d'opérateurs à un corps [Koo97]  $\langle \bar{\alpha}\bar{\beta}|\hat{v}_{12}|\alpha\beta\rangle = \sum_{\Lambda} c_{\Lambda} \langle \bar{\alpha}|\hat{O}_{\Lambda}|\alpha\rangle \langle \bar{\beta}|\hat{O}_{\Lambda}|\beta\rangle$ , où  $\hat{O}_{\Lambda}$  est un opérateur à un corps et  $c_{\Lambda}$  un jeu de constantes (éventuellement complexes). La généralisation des résultats précédents est donc directe en utilisant cette dernière propriété. L'interaction résiduelle  $\hat{V}_{res}$  se factorise comme  $\hat{V}_{res} = \frac{1}{4} \sum_{\Lambda} c_{\Lambda} \hat{O}_{\Lambda}^2$  où  $\hat{O}_{\Lambda} \equiv \sum_{\alpha\bar{\alpha}} \langle \bar{\alpha}|\hat{O}_{\Lambda}|\alpha\rangle \hat{a}_{\bar{\alpha}}^{\dagger} \hat{a}_{\alpha}$ . Ainsi, pour des interactions réalistes, nous devons introduire autant de variables stochastiques Gaussiennes et indépendantes qu'il y a d'opérateurs dans cette somme. En pratique, ce nombre définit l'effort numérique à réaliser, qui est souvent prohibitif. C'est pour cette raison qu'il y a peu d'applications de SMF et que celles-ci ne concernent que la dynamique de systèmes simplifiés. Enfin, l'extension des théories stochastiques ci-dessus à des états HFB est donnée dans [Lac06b] tandis qu'un lien explicite avec les évolutions d'observables est étudié dans les références [Lac07, Lac05].

### 4.8 Résumé

Dans ce chapitre, nous avons abordé des possibilités d'extensions de TDHF. Certaines incluent les corrélations d'appariement (comme TDHFB et TDDM). D'autres se concentrent sur les collisions directes entre nucléons (ETDHF). La plupart de ces théories n'ont jamais été appliquées à des cas réalistes. Leurs utilisations dans le cadre du problème à  $N$  corps nucléaire est un vrai challenge pour l'avenir.

Une autre difficulté a été honteusement glissée sous le tapis dans ce cours. Il s'agit du fait que toutes les applications à la physique nucléaire des théories quantiques de transport (comme TDHF) reposent sur l'introduction d'interactions effectives (essentiellement de type Skyrme). Ces interactions ont mené au concept plus général de la théorie de l'*Énergie Fonctionnelle de la Densité* (EDF). Cette théorie est supposée, comme dans le cas de la *Théorie de la Fonctionnelle de la Densité* (DFT) en matière condensée, incorporer la plupart des corrélations au niveau du champ moyen. Dans ce cas, l'idée d'aller "au delà du champ moyen" n'a plus de raison d'être. Par exemple, toutes les théories présentées dans ce cours (TDHF, étendu, stochastique...) partent d'un Hamiltonien. Le lien entre EDF et le Hamiltonien microscopique n'étant pas direct, les dérivations à partir d'un Hamiltonien peuvent servir de guide, mais une formulation propre dans le cadre de EDF est nécessaire. La validité et les fondations de EDF pour l'étude des propriétés statiques des noyaux font actuellement débat. Il serait bon d'avoir les mêmes discussions sur ce qui devrait être finalement appelé EDF dépendant du temps (TDEDf) et non plus TDHF dans le cadre de la physique nucléaire.

### Remerciements

Ce cours est dédié à la mémoire de Paul Bonche, précurseur de l'utilisation de TDHF en physique nucléaire, et auteur du code TDHF3D que nous avons utilisé pour la majeure partie des applications numériques de ce cours. Nous remercions de manière générale nos collaborateurs théoriciens de structure nucléaire utilisant les méthodes basées sur le champ moyen pour de nombreuses discussions éclairantes. Enfin, nous remercions Andrea Vitturi pour sa contribution sur la fusion.

## A Rappels de mécanique quantique

Nous faisons ici un bref rappel de mécanique quantique dans le cadre de la *seconde quantification*. Seuls les concepts utiles pour ce cours seront introduits. Pour plus de détails, voir par exemple [Mes59, Bla86].

### A.1 opérateurs de création et d'annihilation de particule

L'état à une particule  $|i\rangle$ , dont la composante de la fonction d'onde de spin  $s$  et d'isospin  $\tau$  s'écrit

$$\varphi_i^{s\tau}(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} s \tau | i \rangle, \quad (117)$$

s'obtient en appliquant l'opérateur de création de particule  $\hat{a}_i^\dagger$  sur un vide de particule  $|-\rangle$

$$\hat{a}_i^\dagger |-\rangle = |i\rangle. \quad (118)$$

Son opérateur Hermitique conjugué est l'opérateur d'annihilation  $\hat{a}_i |i\rangle = |-\rangle$ . Un opérateur d'annihilation appliqué sur le vide de particule donne zéro

$$\hat{a}_i |-\rangle = 0 \quad \forall i. \quad (119)$$

Cette dernière propriété donne une définition du vide associé aux opérateurs  $\hat{a}^\dagger$  et  $\hat{a}$ .

Nous considérons un système de Fermions identiques. Dans ce cas, le principe d'exclusion de Pauli implique que l'on ne puisse pas créer deux particules dans le même état  $\hat{a}_i^\dagger |i\rangle = 0$ . Ces opérateurs obéissent aux relations d'anticommutation

$$\{\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger\} = \{\hat{a}_i, \hat{a}_j\} = 0 \quad (120)$$

$$\{\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j\} = \delta_{ij} \quad (121)$$

où  $\{a, b\} = ab + ba$ .

Il peut être utile de changer de base à une particule, et d'exprimer les opérateurs de création et d'annihilation des états de la nouvelle base en fonction de ceux de la base des états  $\{|i\rangle\}$ . Les deux bases doivent être complètes. Par exemple, le passage dans la base des coordonnées s'écrit

$$\hat{a}(\mathbf{r} s \tau) = \sum_i \varphi_i^{s\tau}(\mathbf{r}) \hat{a}_i \quad (122)$$

$$\hat{a}^\dagger(\mathbf{r} s \tau) = \sum_i \varphi_i^{s\tau*}(\mathbf{r}) \hat{a}_i^\dagger. \quad (123)$$

En utilisant la relation de fermeture  $\sum_{s\tau} \int d\mathbf{r} |\mathbf{r} s \tau\rangle \langle \mathbf{r} s \tau| = 1$ , nous inversons aisément ces relations

$$\hat{a}_i = \sum_{s,\tau} \int d\mathbf{r} \varphi_i^{s\tau*}(\mathbf{r}) \hat{a}(\mathbf{r} s \tau) \quad (124)$$

$$\hat{a}_i^\dagger = \sum_{s,\tau} \int d\mathbf{r} \varphi_i^{s\tau}(\mathbf{r}) \hat{a}^\dagger(\mathbf{r} s \tau). \quad (125)$$

## A.2 états à $N$ particules identiques

Notons  $|\psi\rangle$  un état à  $N$  particules identiques qui, de manière générale, sont corrélées. Les nombres d'occupation d'un état de particules corrélées, par opposition à indépendantes, prennent des valeurs entre 0 et 1. Un état à  $N$  particules indépendantes, noté  $|\phi\rangle$ , s'écrit donc comme un simple produit antisymétrisé de  $N$  états à une particule (encore appelé *déterminant de Slater* à cause de la forme spécifique de leur fonction d'onde associée, voir Eq. (140))

$$|\phi\rangle \equiv |\phi_{\nu_1 \dots \nu_N}\rangle = \sqrt{N!} \hat{\mathcal{A}} |1 : \nu_1, 2 : \nu_2, \dots, N : \nu_N\rangle, \quad (126)$$

où  $|1 : \alpha, 2 : \beta\rangle$  signifie que la particule 1 est dans l'état  $|\alpha\rangle$  et la particule 2 dans l'état  $|\beta\rangle$ . Le facteur  $\sqrt{N!}$  est un facteur de normalisation tandis que l'opérateur d'antisymétrisation s'écrit

$$\hat{\mathcal{A}} = \frac{1}{N!} \sum_{\text{permutation } P} \text{sign}(P) P \quad (127)$$

où  $\text{sign}(P) = 1$  (resp.  $-1$ ) pour un nombre pair (impair) de permutations de particules. Par exemple, l'action de  $\hat{\mathcal{A}}$  sur un état à 2 particules s'écrit

$$\hat{\mathcal{A}} |1 : \alpha, 2 : \beta\rangle = \frac{1}{2} (|1 : \alpha, 2 : \beta\rangle - |1 : \beta, 2 : \alpha\rangle). \quad (128)$$

Dans le formalisme de la seconde quantification, un état de particules indépendantes s'écrit simplement

$$|\phi_{\nu_1 \dots \nu_N}\rangle = \left( \prod_{i=1}^N \hat{a}_{\nu_i}^\dagger \right) |-\rangle. \quad (129)$$

## A.3 théorème de Wick

Le théorème de Wick permet, par exemple, de calculer des valeurs moyennes d'observables pour des états de particules indépendantes. Avant d'énoncer le théorème, nous définissons le terme de *contraction*. Soit  $\hat{A}$  et  $\hat{B}$  deux opérateurs de création et/ou d'annihilation (ou encore des combinaisons linéaires de ces opérateurs) et  $|0\rangle$  leur vide associé. Il peut s'agir d'un vide de particule  $|-\rangle$  mais aussi d'un vide HF, noté  $|\phi\rangle$ , (voir annexe E) ou encore d'un vide HFB (état de quasi-particules indépendantes, voir partie 4.1) par exemple. La contraction  $\overline{\hat{A}\hat{B}}$  est alors la valeur moyenne du produit  $\hat{A}\hat{B}$  sur ce vide

$$\overline{\hat{A}\hat{B}} = \langle 0 | \hat{A}\hat{B} | 0 \rangle. \quad (130)$$

Le théorème de Wick s'énonce :

*La valeur moyenne d'un produit d'opérateurs de création et d'annihilation sur leur vide associé  $|0\rangle$  est égale à la somme de tous les produits possibles des contractions de paires de ces opérateurs, chaque produit de contraction étant multiplié par  $+$  ou  $-$  en fonction de la parité de la permutation requise pour amener ensemble les opérateurs contractés.*

Calculons, à titre d'exemple, le recouvrement entre deux états de deux particules indépendantes

$$\langle \phi_{\alpha\beta} | \phi_{\mu\nu} \rangle = \langle - | \hat{a}_\beta \hat{a}_\alpha \hat{a}_\mu^\dagger \hat{a}_\nu^\dagger | - \rangle. \quad (131)$$

Les contractions se calculent simplement et valent  $\overline{\hat{a}_i \hat{a}_j} = \overline{\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger} = 0$  et  $\overline{\hat{a}_i \hat{a}_j^\dagger} = \langle i | j \rangle$ . On obtient alors

$$\langle \phi_{\alpha\beta} | \phi_{\mu\nu} \rangle = \overline{\hat{a}_\beta \hat{a}_\nu^\dagger} \overline{\hat{a}_\alpha \hat{a}_\mu^\dagger} - \overline{\hat{a}_\beta \hat{a}_\mu^\dagger} \overline{\hat{a}_\alpha \hat{a}_\nu^\dagger} = \langle \beta | \nu \rangle \langle \alpha | \mu \rangle - \langle \beta | \mu \rangle \langle \alpha | \nu \rangle. \quad (132)$$



On peut généraliser ce résultat au recouvrement de deux états de  $N$  particules indépendantes construits à partir de deux bases orthonormées d'états à une particule différentes  $\{|\nu\rangle\}$  et  $\{|\alpha\rangle\}$

$$\langle \phi_{\nu_1 \dots \nu_N} | \phi_{\alpha_1 \dots \alpha_N} \rangle = \langle - | \hat{a}_{\nu_N} \dots \hat{a}_{\nu_1} \hat{a}_{\alpha_1}^\dagger \dots \hat{a}_{\alpha_N}^\dagger | - \rangle. \quad (133)$$

Le terme de droite est une valeur moyenne d'opérateurs de création et d'annihilation de particule sur leur vide associé. On peut alors utiliser le théorème de Wick et montrer que le recouvrement précédent s'écrit comme le déterminant de la matrice des contractions, et donc des recouvrements  $\langle \nu_j | \alpha_i \rangle$

$$\langle \phi_{\nu_1 \dots \nu_N} | \phi_{\alpha_1 \dots \alpha_N} \rangle = \begin{vmatrix} \overline{\hat{a}_{\nu_1} \hat{a}_{\alpha_1}^\dagger} & \dots & \overline{\hat{a}_{\nu_N} \hat{a}_{\alpha_1}^\dagger} \\ \vdots & & \vdots \\ \overline{\hat{a}_{\nu_1} \hat{a}_{\alpha_N}^\dagger} & \dots & \overline{\hat{a}_{\nu_N} \hat{a}_{\alpha_N}^\dagger} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \langle \nu_1 | \alpha_1 \rangle & \dots & \langle \nu_N | \alpha_1 \rangle \\ \vdots & & \vdots \\ \langle \nu_1 | \alpha_N \rangle & \dots & \langle \nu_N | \alpha_N \rangle \end{vmatrix}. \quad (134)$$

#### A.4 base des états à $N$ particules

En partant d'une base orthonormée d'états à une particule, il est toujours possible de construire une base orthonormée d'états à  $N$  particules indépendantes. Pour le montrer, il suffit d'écrire le recouvrement de deux de ces états. Celui-ci est un cas particulier de l'Eq. (134) où les bases d'états à une particule sont identiques

$$\langle \phi_{\nu_1 \dots \nu_N} | \phi_{\nu'_1 \dots \nu'_N} \rangle = \begin{vmatrix} \delta_{\nu_1 \nu'_1} & \dots & \delta_{\nu_N \nu'_1} \\ \vdots & & \vdots \\ \delta_{\nu_1 \nu'_N} & \dots & \delta_{\nu_N \nu'_N} \end{vmatrix}. \quad (135)$$

Ce recouvrement vaut  $\pm 1$  si  $|\phi_{\nu_1 \dots \nu_N}\rangle$  et  $|\phi_{\nu'_1 \dots \nu'_N}\rangle$  contiennent exactement les mêmes états à une particule occupés, et 0 si au moins un état à une particule est occupé dans un seul des états à  $N$  particules. On a donc construit une base orthonormée d'états à  $N$  particules indépendantes<sup>16</sup>. Nous pouvons aussi montrer qu'une telle base est une base complète des états à  $N$  particules, corrélés ou non. En d'autres termes, il est toujours possible d'écrire un état quelconque à  $N$  particules comme une somme d'états à  $N$  particules indépendantes

$$|\psi\rangle = \sum_{\nu_1 \dots \nu_N} C_{\nu_1 \dots \nu_N} |\phi_{\nu_1 \dots \nu_N}\rangle. \quad (136)$$

#### A.5 fonction d'onde à $N$ particules

Le théorème de Wick permet aussi d'écrire la fonction d'onde à  $N$  particules indépendantes comme un recouvrement d'états de particules indépendantes. Considérons un Slater construit à partir des états de base  $|\xi_n\rangle \equiv |\mathbf{r}_n s_n \tau_n\rangle$ , où  $\mathbf{r}$  est la position,  $s$  la projection du spin et  $\tau$  celle de l'isospin. . D'après l'Eq. (126), celui-ci s'écrit

$$|\xi_1 \dots \xi_N\rangle = \sqrt{N!} \hat{\mathcal{A}} |1 : \xi_1 \dots N : \nu_N\rangle. \quad (137)$$

Il s'agit donc d'un état normé et antisymétrisé qui permet d'écrire la fonction d'onde à  $N$  particules

$$\psi(\xi_1 \dots \xi_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \langle \xi_1 \dots \xi_N | \psi \rangle \quad (138)$$

---

<sup>16</sup>En toute rigueur, il faut aussi montrer que la base est complète

où nous avons noté  $\int d\xi \equiv \sum_{s\tau} \int d\mathbf{r}$ . Pour des particules indépendantes, la fonction d'onde devient

$$\phi_{\nu_1 \dots \nu_N}(\xi_1 \dots \xi_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \langle - | \hat{a}(\xi_N) \dots \hat{a}(\xi_1) \hat{a}_{\nu_1}^\dagger \dots \hat{a}_{\nu_N}^\dagger | - \rangle \quad (139)$$

D'après l'Eq. (134), la fonction d'onde s'écrit alors comme un déterminant de Slater

$$\phi_{\nu_1 \dots \nu_N}(\xi_1 \dots \xi_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \varphi_{\nu_1}(\xi_1) & \dots & \varphi_{\nu_1}(\xi_N) \\ \vdots & & \vdots \\ \varphi_{\nu_N}(\xi_1) & \dots & \varphi_{\nu_N}(\xi_N) \end{vmatrix}. \quad (140)$$

Vérifions que cette fonction d'onde est bien normée

$$\text{Norm}[\phi] = \int d\xi_1 \dots d\xi_N \phi_{\nu_1 \dots \nu_N}^*(\xi_1 \dots \xi_N) \phi_{\nu_1 \dots \nu_N}(\xi_1 \dots \xi_N) \quad (141)$$

$$= \frac{1}{N!} \int d\xi_1 \dots d\xi_N \begin{vmatrix} \varphi_{\nu_1}^*(\xi_1) & \dots & \varphi_{\nu_1}^*(\xi_N) \\ \vdots & & \vdots \\ \varphi_{\nu_N}^*(\xi_1) & \dots & \varphi_{\nu_N}^*(\xi_N) \end{vmatrix} \times \begin{vmatrix} \varphi_{\nu_1}(\xi_1) & \dots & \varphi_{\nu_1}(\xi_N) \\ \vdots & & \vdots \\ \varphi_{\nu_N}(\xi_1) & \dots & \varphi_{\nu_N}(\xi_N) \end{vmatrix} \quad (142)$$

En développant les déterminants et en utilisant  $\int d\xi \varphi_i^*(\xi) \varphi_j(\xi) = \delta_{ij}$ , on obtient

$$\begin{aligned} \text{Norm}[\phi] &= \frac{1}{N!} \int d\xi_1 \dots d\xi_N \sum_{\text{Permutation } P} P\{\varphi_{\nu_1}^*(\xi_1) \varphi_{\nu_1}(\xi_1) \dots \varphi_{\nu_N}^*(\xi_N) \varphi_{\nu_N}(\xi_N)\} \\ &= 1. \end{aligned} \quad (143)$$

Pour trouver une relation de fermeture dans l'espace de Hilbert à  $N$  particules, il faut chercher l'opérateur  $\hat{1}_N$  tel que  $\langle \phi | \hat{1}_N | \phi \rangle = \langle \phi | \phi \rangle = \text{Norm}[\phi]$ . En utilisant les Eqs. (138) et (141) ainsi que la base de Slater définie par l'Eq. (137), nous obtenons

$$\hat{1}_N = \frac{1}{N!} \int d\xi_1 \dots d\xi_N |\xi_1 \dots \xi_N\rangle \langle \xi_1 \dots \xi_N|. \quad (144)$$

## B Observables à un corps

Les observables à un corps s'écrivent comme une somme d'opérateurs agissant sur les coordonnées de chaque particule  $i$  de manière indépendante

$$\hat{F} = \sum_{i=1}^N \hat{f}(i). \quad (145)$$

En seconde quantification, elles s'écrivent

$$\hat{F} = \sum_{ij} \underbrace{\langle i | \hat{f} | j \rangle}_{f_{ij}} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j. \quad (146)$$

En effet, l'action de  $\hat{F}$  sur un état de  $N$  particules indépendantes donne le même état avec ces deux écritures. En utilisant les Eqs. (145), (126), (128) et en notant que  $\hat{f}|j\rangle = \sum_i f_{ij}|i\rangle$ , on

obtient

$$\begin{aligned}
\hat{F}|\phi_{\nu_1 \dots \nu_N}\rangle &= \sum_{i=1}^N \hat{f}(i) \sqrt{N!} \hat{\mathcal{A}} |1 : \nu_1, \dots, N : \nu_N\rangle \\
&= \sum_{i=1}^N \sqrt{N!} \sum_{\mu} f_{\mu\nu_i} \hat{\mathcal{A}} |1 : \nu_1, \dots, i : \mu, \dots, N : \nu_N\rangle \\
&= \sum_{i=1}^N \sum_{\mu} f_{\mu\nu_i} \hat{a}_{\nu_1}^\dagger \dots \hat{a}_{\nu_{i-1}}^\dagger \hat{a}_{\mu}^\dagger \hat{a}_{\nu_{i+1}}^\dagger \dots \hat{a}_{\nu_N}^\dagger |-\rangle.
\end{aligned} \tag{147}$$

L'Eq. (146) donne quant à elle

$$\hat{F}|\phi_{\nu_1 \dots \nu_N}\rangle = \sum_{\mu\nu} f_{\mu\nu} \hat{a}_{\mu}^\dagger \hat{a}_{\nu} \hat{a}_{\nu_1}^\dagger \dots \hat{a}_{\nu_N}^\dagger |-\rangle \tag{148}$$

Seuls les  $\nu$  correspondant à un état occupé  $\nu_i$  vont contribuer à cause de l'Eq. 119

$$\begin{aligned}
\hat{F}|\phi_{\nu_1 \dots \nu_N}\rangle &= \sum_{i=1}^N \sum_{\mu} f_{\mu\nu_i} \hat{a}_{\mu}^\dagger \hat{a}_{\nu_1}^\dagger \dots \hat{a}_{\nu_{i-1}}^\dagger (-1)^{i+1} \hat{a}_{\nu_i} \hat{a}_{\nu_i}^\dagger \hat{a}_{\nu_{i+1}}^\dagger \dots \hat{a}_{\nu_N}^\dagger |-\rangle \\
&= \sum_{i=1}^N \sum_{\mu} f_{\mu\nu_i} \hat{a}_{\nu_1}^\dagger \dots \hat{a}_{\nu_{i-1}}^\dagger \hat{a}_{\mu}^\dagger \hat{a}_{\nu_{i+1}}^\dagger \dots \hat{a}_{\nu_N}^\dagger |-\rangle
\end{aligned} \tag{149}$$

où nous avons utilisé les Eqs. (120) et (121). On retrouve bien le résultat de l'Eq. (147). Le tableau 2 donne quelques exemples d'observables à un corps fréquemment utilisées lors de la description de la structure et des réactions nucléaires.

## C Matrice Densité

La matrice densité d'un état à  $N$  particules  $|\psi\rangle$  contient toute l'information sur le système (tout comme  $|\psi\rangle$ ) et s'écrit comme un opérateur dans l'espace de Hilbert à  $N$  particules  $\hat{D} = |\psi\rangle\langle\psi|$  (voir par exemple [Sur95, Abe96, Lac04]). Si nous ne nous intéressons qu'aux observables à  $M$  corps ( $M \leq N$ ), alors nous n'avons besoin que de la matrice densité à  $M$ -corps de l'état  $|\psi\rangle$ . Celle-ci s'écrit comme un opérateur dans l'espace de Hilbert à  $M$  particules à partir de la matrice densité  $\hat{D}$

$$\hat{\rho}^{(M)} = \frac{N!}{(N-M)!} \text{Tr}_{M+1 \dots N} \hat{D}. \tag{150}$$

Elle peut être aussi représentée par un tenseur dont un élément s'écrit

$$\rho_{\nu_1 \dots \nu_M, \mu_1 \dots \mu_M}^{(M)} = \langle \nu_1 \dots \nu_M | \hat{\rho}^{(M)} | \mu_1 \dots \mu_M \rangle = \langle \psi | \hat{a}_{\mu_M}^\dagger \dots \hat{a}_{\mu_1}^\dagger \hat{a}_{\nu_1} \dots \hat{a}_{\nu_M} | \psi \rangle. \tag{151}$$

Dans l'espace des coordonnées ( $\xi \equiv \{\mathbf{r} s \tau\}$ ), nous avons

$$\rho^{(M)}(\xi_1 \dots \xi_M, \xi'_1 \dots \xi'_M) = \frac{N!}{(N-M)!} \int d\xi_{M+1} \dots d\xi_N \psi^*(\xi'_1 \dots \xi'_M \xi_{M+1} \dots \xi_N) \psi(\xi_1 \dots \xi_N). \tag{152}$$

Les autres notations  $\rho^{(M)} \equiv \rho_{1 \dots M} \equiv \rho(1 \dots M)$  sont parfois utilisées. Elle contient toute l'information à  $M$ -corps du système et sert donc à calculer n'importe quelle observable à  $M$ -corps  $\hat{O}^{(M)}$

$$\begin{aligned}
\langle \hat{O}^{(M)} \rangle_\psi &= \int d\xi_1 \dots d\xi_M d\xi'_1 \dots d\xi'_M \rho^{(M)}(\xi'_1 \dots \xi'_M, \xi_1 \dots \xi_M) O^{(M)}(\xi_1 \dots \xi_M, \xi'_1 \dots \xi'_M) \\
&= \text{Tr}_{1 \dots M} [\rho^{(M)} O^{(M)}].
\end{aligned} \tag{153}$$

observable	écriture standard	écriture en seconde quantification
Position du centre de masse $\hat{R}$	$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \hat{\mathbf{r}}(i)$	$\frac{1}{N} \sum_{s\tau} \int d\mathbf{r} \ \mathbf{r} \ \hat{a}^\dagger(\mathbf{r}s\tau) \ \hat{a}(\mathbf{r}s\tau)$
Impulsion du centre de masse $\hat{P}$	$\sum_{i=1}^N \hat{\mathbf{p}}(i)$	$\sum_{s\tau} \int d\mathbf{p} \ \mathbf{p} \ \hat{a}^\dagger(\mathbf{p}s\tau) \ \hat{a}(\mathbf{p}s\tau)$
Nombre de particules $\hat{N}$	$\sum_i \hat{1}(i)$	$\sum_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$
Moment monopolaire $\hat{Q}_0$	$\frac{1}{\sqrt{4\pi}} \sum_{i=1}^N \hat{\mathbf{r}}(i)^2$	$\frac{1}{\sqrt{4\pi}} \sum_{s\tau} \int d\mathbf{r} \ r^2 \ \hat{a}^\dagger(\mathbf{r}s\tau) \ \hat{a}(\mathbf{r}s\tau)$
Moment quadrupolaire $\hat{Q}_{20}$	$\sqrt{\frac{5}{16\pi}} \sum_{i=1}^N (2\hat{z}(i) - \hat{x}(i) - \hat{y}(i))$	$\sqrt{\frac{5}{16\pi}} \sum_{s\tau} \int d\mathbf{r} \ (2z - x - y) \ \hat{a}^\dagger(\mathbf{r}s\tau) \ \hat{a}(\mathbf{r}s\tau)$

TAB. 2 – exemples d’observables à un corps.

## D Corrélations à deux corps

Lorsque nous calculons une valeur moyenne d’observable à deux corps, par exemple celle du Hamiltonien  $\hat{H}$ , on a besoin, en principe, de la matrice densité à deux corps  $\rho^{(2)}$  du système (voir annexe C). Celle-ci comporte une partie triviale, non corrélée, qui s’écrit en fonction de la matrice densité à un corps, et une partie corrélée, notée  $C^{(2)}$ . Les éléments de la matrice densité à deux corps s’écrivent alors

$$\rho_{ijkl}^{(2)} = \langle \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_j \rangle_\psi = \rho_{jl}^{(1)} \rho_{ik}^{(1)} - \rho_{il}^{(1)} \rho_{jk}^{(1)} + C_{ijkl}^{(2)} \quad (154)$$

Les corrélations  $C^{(2)}$  sont donc la partie de la matrice densité à deux corps qui ne peut pas se décomposer en un produit d’opérateurs à un corps.

Il est possible d’écrire la matrice densité à deux corps sous la forme

$$\rho_{12} = \rho_1 \rho_2 (1 - P_{12}) + C_{12} \quad (155)$$

où  $P_{12}$  représente un opérateur de permutation des indices des particules 1 et 2. Rappelons que les notations  $O^{(2)} \equiv O(1, 2) \equiv O_{12}$  sont équivalentes. Notons qu’il est possible de définir des corrélations plus générales, à  $M$ -corps, de façon similaire à partir de la densité à  $M$ -corps [Lac04].

## E Vide Hartree-Fock et de quasi-particule

Un déterminant de Slater est parfois appelé un état de vide HF. L’état  $|\phi\rangle$  est en effet un vide pour les opérateurs de création  $\hat{b}_\mu^\dagger$  et d’annihilation  $\hat{b}_\mu$  exprimés dans la base des états à

une particule qui ont servi à construire le Slater

$$\hat{b}_\mu^\dagger = (1 - n_\mu) \hat{a}_\mu^\dagger + n_\mu \hat{a}_\mu \quad (156)$$

$$\hat{b}_\mu = (1 - n_\mu) \hat{a}_\mu + n_\mu \hat{a}_\mu^\dagger \quad (157)$$

où  $n_\mu = 1$  pour un état occupé (appelé état de *trou*) et 0 pour un état non occupé (état de *particule*). En effet, ces opérateurs obéissent bien aux Eqs. (120) et (121) et  $|\phi\rangle$  est bien leur vide associé puisque

$$\hat{b}_\mu |\phi\rangle = 0 \quad \forall \mu. \quad (158)$$

Un Slater est un cas particulier de vide de quasi-particule. Les opérateurs de création et d'annihilation de quasi-particule s'écrivent en fonction des opérateurs de création et d'annihilation de particule ( $\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_i$ )

$$\begin{cases} \hat{\beta}_\alpha = \sum_i U_{i\alpha}^* \hat{a}_i + V_{i\alpha}^* \hat{a}_i^\dagger \\ \hat{\beta}_\alpha^\dagger = \sum_i U_{i\alpha} \hat{a}_i^\dagger + V_{i\alpha} \hat{a}_i. \end{cases} \quad (159)$$

où les matrices  $U$  et  $V$  sont choisies de sorte que les opérateurs de quasi-particule obéissent aux règles d'anticommutation fermioniques (Eqs. (120) et (121)). Le vide associé à ces quasi-particules s'obtient en annihilant toutes les quasi-particules du vide de particule

$$|\psi_{bogo}\rangle = \mathcal{C} \prod_k \hat{\beta}_k |-\rangle \quad (160)$$

où  $\mathcal{C}$  est un facteur de normalisation. On voit en particulier que cette expression assure  $\hat{\beta}_i |\psi_{bogo}\rangle = 0$ .

## F Lien entre les corrélations et les états de particules indépendantes

Dans cette annexe nous allons montrer, en appliquant le théorème de Wick, qu'annuler les corrélations  $C^{(2)}$  est équivalent à considérer un état de particules indépendantes. En utilisant le fait que le Slater  $|\phi\rangle$  est un vide pour les opérateurs  $\hat{b}_\mu$  (voir annexe E), et en inversant les relations (156) et (157) dans une base quelconque  $|i\rangle$

$$\hat{a}_i^\dagger = \sum_\mu \langle \mu | i \rangle \left[ n_\mu \hat{b}_\mu + (1 - n_\mu) \hat{b}_\mu^\dagger \right] \quad (161)$$

$$\hat{a}_i = \sum_\mu \langle i | \mu \rangle \left[ n_\mu \hat{b}_\mu^\dagger + (1 - n_\mu) \hat{b}_\mu \right] \quad (162)$$

avec  $n_\mu = 0$  ou 1, on peut appliquer le théorème de Wick pour calculer les éléments de la matrice densité à deux corps d'un état de particules indépendantes  $|\phi\rangle$

$$\rho_{ijkl}^{(2)} = \langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_j \rangle_\phi = \overline{\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_k^\dagger} \overline{\hat{a}_i \hat{a}_j} + \overline{\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j} \overline{\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_i} - \overline{\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i} \overline{\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_j} \quad (163)$$

où les contractions sont prises dans le vide HF  $|\phi\rangle$ . Ces contractions sont triviales puisque, par définition,  $\overline{\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j} = \langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j \rangle_\phi = \rho_{ji}$  et, en utilisant l'Eq. (119),  $\overline{\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger} = \overline{\hat{a}_j \hat{a}_i} = 0$ . On obtient finalement l'expression des éléments de la matrice densité à deux corps d'un état de particules indépendantes  $|\phi\rangle$

$$\rho_{ijkl}^{(2)} = \rho_{jl}^{(1)} \rho_{ik}^{(1)} - \rho_{il}^{(1)} \rho_{jk}^{(1)} \quad (164)$$

où l'on voit que les corrélations ont disparues. Faire l'approximation de particules indépendantes revient bien à négliger les corrélations  $C^{(2)}$  dans la matrice densité à deux corps.

Remarquons enfin que les éléments de la matrice densité à un corps associée à l'état de particules indépendantes  $|\phi\rangle$  se calculent aisément en utilisant les Eqs. (161) et (162) dans la base  $\{|\mu\rangle\}$  qui a servi à construire  $|\phi\rangle$ . En rappelant que  $\langle \hat{b}_\mu \hat{b}_\nu^\dagger \rangle_\phi = \delta_{\mu\nu}$  et en utilisant l'Eq. (158), nous obtenons

$$\rho_{\nu\mu} = \overline{\hat{a}_\mu^\dagger \hat{a}_\nu} = n_\mu \delta_{\mu\nu} \quad (165)$$

## G Évolution en champ moyen avec le théorème de Thouless

Nous supposons tout d'abord que seul  $\hat{H}_{CM}[\rho]$  contribue à l'évolution, *i.e.* nous négligeons explicitement l'interaction résiduelle  $\hat{V}_{res}$  dans l'Eq. (86). Supposant un état de particules indépendantes  $|\phi\rangle$  à  $t_0$  et un petit intervalle de temps  $dt$  pendant lequel  $\hat{H}_{CM}[\rho]$  peut être considéré comme constant, l'état à  $t_0 + dt$  s'écrit

$$|\psi(t_0 + dt)\rangle \simeq \exp\left(\frac{dt}{i\hbar} \hat{H}_{CM}[\rho]\right) |\phi\rangle \quad (166)$$

où  $\hat{H}_{CM}[\rho] = E[\rho] + \sum_{\bar{\beta}\alpha} h[\rho]_{\bar{\beta}\alpha} \hat{a}_{\bar{\beta}}^\dagger \hat{a}_\alpha$ , et  $E[\rho] = \text{Tr} [\rho (t + \frac{1}{2}U[\rho])]$ .

D'après le théorème de Thouless [Tho61], une exponentielle d'opérateurs à un corps transforme un déterminant de Slater en un autre Slater. Nous avons en effet

$$\exp\left(\frac{dt}{i\hbar} \hat{H}_{CM}(\rho)\right) |\phi\rangle = \Pi_\alpha \hat{a}_{\alpha+d\alpha}^\dagger |-\rangle \quad (167)$$

où les états  $|\alpha + d\alpha\rangle \equiv |\alpha(t + dt)\rangle$  sont la nouvelle base d'états à une particule déduite des  $|\alpha\rangle$  lors d'une évolution en champ moyen. L'équation (167) se montre en utilisant le fait que  $e^{-\frac{dt}{i\hbar} \hat{H}_{CM}} e^{\frac{dt}{i\hbar} \hat{H}_{CM}} = 1$  et  $e^{\frac{dt}{i\hbar} \hat{H}_{CM}} |-\rangle = e^{\frac{dt}{i\hbar} E_0[\rho]} |-\rangle$

$$\begin{aligned} e^{\frac{dt}{i\hbar} \hat{H}_{CM}} |\phi\rangle &= e^{\frac{dt}{i\hbar} \hat{H}_{CM}} \Pi_\alpha \hat{a}_\alpha^\dagger |-\rangle \\ &= e^{\frac{dt}{i\hbar} \hat{H}_{CM}} \hat{a}_{\alpha_1}^\dagger e^{-\frac{dt}{i\hbar} \hat{H}_{CM}} e^{\frac{dt}{i\hbar} \hat{H}_{CM}} \hat{a}_{\alpha_2}^\dagger e^{-\frac{dt}{i\hbar} \hat{H}_{CM}} \dots e^{\frac{dt}{i\hbar} \hat{H}_{CM}} \hat{a}_{\alpha_N}^\dagger e^{-\frac{dt}{i\hbar} \hat{H}_{CM}} e^{\frac{dt}{i\hbar} E_0[\rho]} |-\rangle. \end{aligned}$$

Le facteur de phase global  $e^{\frac{dt}{i\hbar} E_0[\rho]}$  n'affecte pas l'état du système. Les opérateurs  $\hat{a}_\alpha^\dagger$  se transforment comme  $\hat{a}_{\alpha+d\alpha}^\dagger = e^{\frac{dt}{i\hbar} \hat{H}_{CM}} \hat{a}_\alpha^\dagger e^{-\frac{dt}{i\hbar} \hat{H}_{CM}}$ . On montre aisément que les  $\hat{a}_{\alpha+d\alpha}$  et  $\hat{a}_{\alpha+d\alpha}^\dagger$  obéissent aux relations d'anticommunitation fermioniques (Eqs. (120) et (121)). Ce sont donc des créateurs et des annihilateurs agissant sur le vide de particule  $|-\rangle$ . L'état  $|\psi(t + dt)\rangle$  est donc bien un déterminant de Slater et l'évolution en champ moyen ne sortira pas le système du sous-espace des états de particules indépendantes.

Nous allons voir que pour retrouver l'évolution des états à une particule dans le champ moyen du système, il est utile de réécrire l'action du champ moyen sur  $|\phi\rangle$  en utilisant  $\hat{a}_\beta^\dagger \hat{a}_\alpha |\phi\rangle = \delta_{\alpha\beta} |\phi\rangle$ . Nous obtenons alors

$$\begin{aligned} \hat{H}_{CM}[\rho] |\phi\rangle &= \left( -\frac{1}{2} \text{Tr}(\rho U[\rho]) + \sum_{\beta\alpha} \langle \beta | h[\rho] | \alpha \rangle \hat{a}_\beta^\dagger \hat{a}_\alpha + \sum_{\bar{\beta}\alpha} \langle \bar{\beta} | h[\rho] | \alpha \rangle \hat{a}_{\bar{\beta}}^\dagger \hat{a}_\alpha \right) |\phi\rangle \\ &= \left( -\frac{1}{2} \text{Tr}(\rho U[\rho]) + \sum_{i\alpha} \langle i | h[\rho] | \alpha \rangle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_\alpha \right) |\phi\rangle \end{aligned} \quad (168)$$

où  $\{|i\rangle\}$  est une base complète à une particule. La constante  $-\frac{1}{2}Tr(\rho U[\rho])$  induit une phase globale et n'influence pas l'évolution à une particule. En utilisant l'expression du champ moyen de l'Eq. (168) et en ne gardant que l'ordre 1 en  $dt$  dans l'expression des  $\hat{a}_{\alpha+d\alpha}^\dagger$ , nous avons

$$\hat{a}_{\alpha+d\alpha}^\dagger = \hat{a}_\alpha^\dagger + \frac{dt}{i\hbar} [\hat{H}_{CM}, \hat{a}_\alpha^\dagger] + o(dt^2) = \hat{a}_\alpha^\dagger + \frac{dt}{i\hbar} \sum_i \hat{a}_i^\dagger \langle i | \hat{h}[\rho] | \alpha \rangle + o(dt^2). \quad (169)$$

L'évolution des états à une particule s'obtient en appliquant l'Eq. (169) sur le vide de particule

$$i\hbar \frac{|\alpha + d\alpha\rangle - |\alpha\rangle}{dt} = i\hbar \partial_t |\alpha\rangle = \hat{h}[\rho] |\alpha\rangle. \quad (170)$$

Nous retrouvons l'évolution standard en champ moyen. Nous avons ainsi montré que les équations de champ moyen s'obtiennent en négligeant l'interaction résiduelle.

Le fait que nous retrouvons exactement l'évolution TDHF des états à une particule est dû à l'écriture spécifique du Hamiltonien de champ moyen dans l'Eq. (168). Si, par contre, nous gardons l'expression initiale de  $\hat{H}_{CM}$  donnée dans l'Eq. (86), alors nous obtenons

$$i\hbar \frac{d|\alpha\rangle}{dt} = (1 - \hat{\rho}) \hat{h}[\rho] |\alpha\rangle. \quad (171)$$

Ces évolutions d'états à une particule diffèrent de l'évolution standard (Eq. (170)) mais contiennent cependant la même information car elles mènent aussi à l'équation TDHF

$$i\hbar \partial_t \hat{\rho} = i\hbar \sum_\alpha [(\partial_t |\alpha\rangle) \langle \alpha| + |\alpha\rangle \langle \partial_t \alpha|] = (1 - \hat{\rho}) \hat{h}[\rho] \hat{\rho} - \hat{\rho} \hat{h}[\rho] (1 - \hat{\rho}) = [\hat{h}[\rho], \hat{\rho}]. \quad (172)$$

# Références

- [Abe96] Y. Abe, S. Ayik, P.-G. Reinhard and E. Suraud, Phys. Rep. **275**, 49 (1996).
- [Abr06] V.I. Abrosimov, D.M. Brink, A. Dellafore and F. Matera, 11th Int. Conf. on Nuclear Reaction Mechanisms, Varenna (Italy); arXiv :nucl-th/0610087 (2006).
- [Ayi80] S. Ayik, Z. Phys. A **298**, 83 (1980).
- [Ayi88] S. Ayik and C. Gregoire, Phys. Lett. B **212**, 269 (1988).
- [Ayi01] S. Ayik and Y. Abe, Phys. Rev. C **64**, 024609 (2001).
- [Ayi04] S. Ayik, D. Lacroix and Ph. Chomaz, Prog. Part. Nucl. Phys. **52**, 497 (2004).
- [Bal98] A.B. Balantekin and N. Takigawa, Rev. Mod. Phys. **70**, 78 (1998).
- [Bal81] R. Balian and M. Veneroni, Ann. Phys. **135**, 270 (1981).
- [Bar57] J. Bardeen, L.N. Cooper and J.R. Schrieffer, Phys. Rev. **108**, 1175 (1957).
- [Bas77] R. Bass, Phys. Rev. Lett. **39**, 265 (1977) .
- [Bas80] R. Bass, *Nuclear Reactions* (Springer-Verlag, Berlin, 1980).
- [Ben03] M. Bender, P.-H. Heenen and P.-G. Reinhard, Rev. Mod. Phys. **75**, 121 (2003).
- [Ben07] M. Bender, *Proceedings of the International Les Houches School on "Exotic Nuclei : New Challenges", May 7-18 2007, Les Houches, France*; to appear in Eur. Phys. J. Special Topics.
- [Bla54] J. S. Blair, Phys. Rev. **95**, 1218 (1954).
- [Bla86] J. Blaizot and G. Ripka, *Quantum Theory Of Finite Systems* (MIT Press, Cambridge, 1986).
- [Blo62] C. Bloch and A. Messiah, Nucl. Phys. **39**, 95 (1962).
- [Bog46] N.N. Bogoliubov, J. Phys. (URSS) **10**, 256 (1946).
- [Bog58] N.N. Bogoliubov, Sov. Phys. JETP **7**, 41 (1958).
- [Boh69] A. Bohr and B. Mottelson, *Nuclear Structure* Vol. I, chapter 2 (Benjamin, Reading, MA., 1969)
- [Bon76] P. Bonche, S. Koonin and J. W. Negele, Phys. Rev. C **13**, 1226 (1976).
- [Bon78] P. Bonche, B. Grammaticos and S. Koonin, Phys. Rev. C **17**, 1700 (1978).
- [Bon81] P. Bonche and N. Ngô, Phys. Lett. B **105**, 17 (1981).
- [Bon05] P. Bonche, H. Flocard and P.H. Heenen, Comp. Phys. Com. **171**, 49 (2005).
- [Bor46] H. Born and H.S. Green, Proc. Royl. Soc. **A188**, 10 (1946).
- [Bot90] W. Botermans and R. Malfliet, Phys. Rep. **198**, 115 (1990).
- [Bre02] H.P. Breuer and F. Petruccione, *The Theory of Open Quantum Systems* (Oxford Univ. Press, 2002).
- [Bri05] D.M. Brink and R.A. Broglia, *Nuclear Superfluidity : Pairing in finite systems* (Cambridge Univ. Press, 2005).
- [Bul02a] A. Bulgac and Y. Yu, Phys. Rev. Lett. **88**, 042504 (2002).
- [Bul02b] A. Bulgac, Phys. Rev. C **65**, 051305 (2002).
- [Bul03] A. Bulgac and Y. Yu, Phys. Rev. Lett. **90**, 222501 (2003).
- [Car01] I. Carusotto, Y. Castin and J. Dalibard, Phys. Rev. A **63**, 023606 (2001).
- [Cas90] W. Cassing and U. Mosel, Prog. Part. Nucl. Phys. **25**, 235 (1990).
- [Cha97] E. Chabanat, P. Bonche, P. Haensel, J. Meyer et R. Schaeffer, Nucl. Phys. A **627**, 710 (1997).



- [Cha98] E. Chabanat, P. Bonche, P. Haensel, J. Meyer et R. Schaeffer, Nucl. Phys. A **635**, 231 (1998).
- [Cho93] Ph. Chomaz, M. Di Toro and A. Smerzi, Nucl. Phys. A **563**, 509 (1993).
- [Cho04] Ph. Chomaz, M. Colonna and J. Randrup, Phys. Rep. **389**, 263 (2004).
- [Dan84] P. Danielewicz, Ann. Phys. **152**, 305 (1984).
- [Das79] C.H. Dasso *et al.*, Z. Phys. A **289**, 395 (1979).
- [Das98] M. Dasgupta, D.J. Hinde, N. Rowley et A.M. Stefanini, Annu. Rev. Nucl. Part. Sci. **48**, 401 (1998).
- [Dav80] K.T.R. Davies, H. Flocard, S. Krieger and M.S. Weiss, Nucl. Phys. A **342**, 111 (1980).
- [Deb92] F.V. De VBlasio *et al.*, Phys. Rev. Lett. **68**, 1663 (1992).
- [Dob84] J. Dobaczewski, H. Flocard and J. Treiner, Nucl. Phys. A **422**, 103 (1984).
- [Dob07] J. Dobaczewski, M.V. Stoistov, W. Nazarewicz and P.-G. Reinhard, Phys. Rev. C **76**, 054315 (2007).
- [Flo78] H. Flocard, S.E. Koonin and M.S. Weiss, Phys. Rev. C **17**, 1682 (1978).
- [Goe82] *Time-Dependent Hartree-Fock and Beyond*, ed. K. Goeke and P.-G. Reinhard, Lecture Notes in Physics, vol. 171 (1982).
- [Gog75] D. Gogny, *Nuclear Self-Consistent Fields*, ed. G. Ripka and M. Porneuf (North-Holland, Amsterdam, 1975) p. 333.
- [Hag99] K. Hagino, N. Rowley and A.T. Kruppa, Comp. Phys. Comm. **123**, 143 (1999).
- [Has07] Y. Hashimoto and K. Nodeki, arXiv :nucl-th/0707.3083 (2007).
- [Hua62] K. Huang, *Statistical Mechanics*, (Wiley, N.Y., 1962).
- [Iac91] F. Iachello and P. van Isacker, *The Interacting Boson-Fermion Model* (Cambridge Univ. Press, 1991).
- [Jui02] O. Juillet and Ph. Chomaz, Phys. Rev. Lett. **88**, 142503 (2002).
- [Kad62] L.P. Kadanoff and G. Baym, *Quantum Statistical Mechanics* (Benjamin, N.Y., 1962).
- [Kha02] E. Khan, N. Sandulescu, M. Grasso and Nguyen Van Giai, Phys. Rev. C **66**, 024309 (2002).
- [Kim97] K.-H. Kim, T. Otsuka and P. Bonche, J. Phys. G **23**, 1267 (1997).
- [Kie03] C. Kiefer *et al.*, *Decoherence and the Appearance of a Classical World in Quantum Theory* (Springer, N.Y., 2003).
- [Kir46] J.G. Kirwood, J. Chem. Phys. **14**, 180 (1946).
- [Koo97] S.E. Koonin, Ann. Rev. Nucl. Part. Sci. **47**, 463 (1997).
- [Kue73] O. Kuebler and H.D. Zeh, Ann. Phys. **76**, 405 (1973).
- [Lac99] D. Lacroix, Ph. Chomaz and S. Ayik, Nucl. Phys. A **651**, 369 (1999).
- [Lac01] D. Lacroix, S. Ayik and Ph. Chomaz, Phys. Rev. C **63**, 064305 (2001).
- [Lac02] D. Lacroix, cours de l'école Joliot-Curie (2002).
- [Lac04] D. Lacroix, S. Ayik and Ph. Chomaz, Prog. Part. Nucl. Phys. **52**, 497 (2004).
- [Lac05] D. Lacroix, Phys. Rev. C **71**, 064322 (2005).
- [Lac06a] D. Lacroix, Phys. Rev. C **73**, 044311 (2006).
- [Lac06b] D. Lacroix, nucl-th/0605033 (2006).
- [Lac07] D. Lacroix, Annals Phys. **322**, 2055 (2007).
- [Lev80a] S. Levit, Phys. Rev. C **21**, 1594 (1980).

- [Lev80b] S. Levit, J.W. Negele and Z. Paltiel, Phys. Rev. C **21**, 1603 (1980).
- [Lic76] P.C. Lichtner and J.J. Griffin, Phys. Rev. Lett. **37**, 1521 (1976).
- [Luo99] H.-G. Luo *et al.*, Nucl. Phys. A **652**, 164 (1999).
- [Mes59] A. Messiah, *Mécanique Quantique* (Dunod, 1959).
- [Mey00] J. Meyer, cours de l'école Joliot Curie (2000).
- [Mor99] C.R. Morton *et al.*, Phys. Rev. C **60**, 044608 (1999).
- [Neg82] J.W. Negele, Rev. Mod. Phys. **54**, 913 (1982).
- [Neg88] J.W. Negele and H. Orland, *Quantum Many Particles* (Frontiers in Physics, Addison-Wesley pub. comp., N.Y., 1988).
- [Ohn95] A. Ohnishi and J. Randrup, Phys. Rev. Lett. **75**, 596 (1995).
- [Pet94] A. Peter *et al.*, Nucl. Phys. A **573**, 93 (1994).
- [Rei92a] P.-G. Reinhard and E. Suraud, Ann. Phys. **216**, 98 (1992).
- [Rei92b] P.-G. Reinhard and E. Suraud, Nucl. Phys. A **545**, 59 (1992).
- [Rei94] P.-G. Reinhard and C. Toepffer, Int. J. Mod. Phys. E **3**, 435 (1994).
- [Rei96] P.-G. Reinhard, Y. Abe, S. Ayik and E. Suraud, Phys. Rep. **275**, 49 (1996).
- [Rin80] P. Ring and P. Schuck, *The Nuclear Many-Body Problem* (Springer-Verlag 1980).
- [Row91] N. Rowley, G.R. Satchler and P.H. Stelson, Phys. Lett. B **254**, 25 (1991).
- [Sag97] R.N. Sagaidak *et al.*, in *Proc. of VI International School-Seminar "Heavy Ion Physics"*, Dubna, 1997, ed. Yu. Ts. Oganessian and R. Kalpakchieva (World Scientific, Singapore, 1998), p. 323.
- [Sim01] C. Simenel, Ph. Chomaz and G. de France, Phys. Rev. Lett. **86**, 2971 (2001).
- [Sim03] C. Simenel and Ph. Chomaz, Phys. Rev. C **68**, 024302 (2003).
- [Sim04] C. Simenel, Ph. Chomaz and G. de France, Phys. Rev. Lett. **93**, 102701 (2004).
- [Sim07a] C. Simenel, Ph. Chomaz and G. de France, Phys. Rev. C **76**, 024609 (2007).
- [Sim07b] C. Simenel and B. Avez, Contribution to XIV Nuclear Physics Workshop at Kazimierz Dolny, Poland, Sept. 26-29 (2007); to appear in Int. J. Phys. E17; nucl-th/0711.0934.
- [Siw05] K. Siwek-Wilczyńska, I. Skwira and J. Wilczyński, Phys. Rev. C **72**, 034605 (2005).
- [Sky56] T. Skyrme, Phil. Mag. **1**, 1043 (1956).
- [Sto07] J.R. Stone and P.-G. Reinhard, Prog. in Part. and Nucl. Phys. **58**, 587 (2007).
- [Sur95] E. Suraud, cours de l'école Joliot-Curie (1995).
- [Tho61] D.J. Thouless, Nucl. Phys. **21**, 225 (1961).
- [Tho62] D.J. Thouless and J.G. Valatin, Nucl. Phys. **31**, 211 (1962).
- [Toh01] M. Tohyama and A.S. Umar, Phys. Lett. B **516**, 415 (2001).
- [Toh02a] M. Tohyama and A.S. Umar, Phys. Lett. B **549**, 72 (2002).
- [Toh02b] M. Tohyama and A.S. Umar, Phys. Rev. C **65**, 037601 (2002).
- [Toh04] M. Tohyama and S. Takahara, Prog. Theor. Phys. **112**, 499 (2004).
- [Tor87] M. Di Toro and V.M. Kolomietz, Z. Phys. A **328**, 285 (1987).
- [Uma06a] A.S. Umar and V.E. Oberacker, Phys. Rev. C **73**, 054607 (2006).
- [Uma06b] A.S. Umar and V.E. Oberacker, Phys. Rev. C **74**, 021601 (2006).
- [Vau72] D. Vautherin and D.M. Brink, Phys. Rev. C **5**, 626 (1972).
- [Vul86] E. Vulgaris *et al.*, Phys. Rev. C **33**, 2017 (1986).

- [Wei81] H.A. Weidenmuller *et al.* , Ann. Phys. **139**, 190 (1981).
- [Won73] C.Y. Wong, Phys. Rev. Lett. **31**, 766 (1973).
- [Won78] C.Y. Wong and H.H.K. Tang, Phys. Rev. Lett. **40**, 1070 (1978).
- [Won79] C.Y. Wong and H.H.K. Tang, Phys. Rev. C **20**, 1419 (1979).
- [Zum62] B. Zumino, J. Math. Phys. **3**, 1055 (1962).