



**HAL**  
open science

# Niveaux d'énergie dans un puits de potentiel déformé à bords abrupts

M. Gaudin, A.M. Sajot

► **To cite this version:**

M. Gaudin, A.M. Sajot. Niveaux d'énergie dans un puits de potentiel déformé à bords abrupts. Journal de Physique, 1969, 30 (11-12), pp.857-875. 10.1051/jphys:019690030011-12085700 . jpa-00206853

**HAL Id: jpa-00206853**

**<https://hal.science/jpa-00206853>**

Submitted on 4 Feb 2008

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

# LE JOURNAL DE PHYSIQUE

## NIVEAUX D'ÉNERGIE DANS UN Puits DE POTENTIEL DÉFORMÉ A BORDS ABRUPTS

Par M. GAUDIN et A. M. SAJOT <sup>(1)</sup>,

Service de Physique Théorique, Centre d'Études Nucléaires de Saclay, B.P. n° 2, 91-Gif-sur-Yvette.

(Reçu le 8 juillet 1969.)

**Résumé.** — On présente un essai de détermination numérique précise des niveaux d'énergie d'une particule dans un puits de potentiel déformé à bords abrupts, selon la méthode déterminantale décrite par Hill et Wheeler en 1953. Cette méthode s'applique à un modèle de noyau extrêmement schématisé où le potentiel moyen est local, indépendant de spin et de charge, constant ou infiniment profond à l'intérieur d'une surface limitant un volume donné. Pratiquement, on s'est restreint à la symétrie axiale et de réflexion, et à une famille de surfaces à deux paramètres  $(\alpha_2, \alpha_4)$ , bien qu'il soit très possible d'introduire une asymétrie  $(\alpha_3)$ . Les résultats préliminaires obtenus permettent, en ce qui concerne le puits infini :

a) De sortir la position des premiers niveaux avec 4 chiffres significatifs exacts dans le domaine  $0 < \alpha_2 < 0,40$ ,  $0 < \alpha_4 < 0,15$  ;

b) De déterminer l'énergie totale d'un système de nucléons indépendants dans son état fondamental, par la méthode directe de « somme sur les niveaux » ; de comparer cette énergie à l'expression donnée par la formule asymptotique pour un gaz de fermions (Hill et Wheeler) et d'en déduire par différence une « correction de couche » (Strutinsky) relative à ce modèle schématisé ;

c) De calculer la proportion relative des niveaux occupés pairs ou impairs (parité par réflexion) en fonction de la déformation (référence aux idées de Kelson et Griffin sur la fission asymétrique) ;

d) En ce qui concerne le puits de potentiel fini, d'obtenir avec une précision moindre (de l'ordre de 2 %) la variation d'ensemble des niveaux avec le paramètre de déformation quadrupolaire  $\alpha_2$  dans le domaine  $0 < \alpha_2 < 0,45$ .

**Abstract.** — We present an attempt of accurate numerical calculation of the single particle energy levels in a deformed box, using the method described by Hill and Wheeler in their 1953 paper. This method is also applied to the finite potential well with sharp edge. The results allow us to calculate the shell correction for the kinetic energy of a system of nucleons in a box, as a function of the deformation parameters  $\alpha_2, \alpha_4$ .

**I. Introduction.** — Les tentatives actuelles en théorie de la fission, pour dépasser les modèles classiques insuffisants même en ce qui concerne la statique du phénomène, font intervenir les effets quantiques les plus simples qui se manifestent dans l'existence des niveaux discrets, dans les fluctuations de la densité de niveau et dans la structure en couche du noyau. Le cadre théorique de cette description est celui du modèle collectif tel qu'il a été formulé par exemple dans l'article de Hill et Wheeler de 1953 [1] en vue de son application à la fission nucléaire. Le noyau y est considéré comme un système de nucléons indépendants en mouvement sous l'action du champ moyen créé par la partie à longue portée du potentiel internucléon. On sait que cette hypothèse d'indépendance est compa-

tible avec l'existence de corrélations à courte portée relativement rigides, ce qui justifie l'hypothèse approximative d'incompressibilité du fluide nucléaire et explique sa propriété de saturation. Dans ce modèle, le potentiel moyen est constant à l'intérieur d'un certain volume dont la grandeur est déterminée par le nombre total de nucléons et la densité d'équilibre de la matière nucléaire. Ce potentiel est donc défini uniquement par la forme de la surface limite, surface diffuse mais dont l'épaisseur est négligée. La condition de cohérence est satisfaite, s'il existe un remplissage des niveaux individuels dans le puits de potentiel cherché, tel que la densité locale soit constante à l'intérieur du noyau et induise le champ moyen correspondant (on néglige ici encore la non-localité due à l'échange).

Toutes ces conditions ne seraient satisfaites que par une application rigoureuse de la méthode de Hartree-Fock (et même Hartree-Bogoliubov dans l'hypothèse

<sup>(1)</sup> Service de Mesure et de Physique Neutronique Fondamentale, C.E.N., Saclay.



**II. Le modèle de la boîte ou du puits infini.** — On considère un système comprenant  $N$  fermions de même espèce dans un volume donné, limité par une surface de révolution ( $S$ ) dont la forme dépend d'un petit nombre de paramètres :  $\alpha_2, \alpha_3, \alpha_4$ . En coordonnées polaires ( $r, \theta, \varphi$ ), l'équation de la méridienne ( $C$ ) de la surface ( $S$ ) s'écrit commodément en fonction des polynômes de Legendre en  $\cos \theta$  :

$$r = F(\cos \theta) = \frac{1}{\lambda} \{ 1 + \alpha_2 P_2(\cos \theta) + \alpha_3 P_3(\cos \theta) + \alpha_4 P_4(\cos \theta) \}. \quad (1)$$

Nous avons choisi le volume limité par ( $S$ ) égal à celui de la sphère de rayon 1; ce qui n'est pas une restriction pour des raisons dimensionnelles.

Dans ces conditions, le nombre  $\lambda$  qui figure dans (1) est défini par la condition de conservation du volume :

$$\lambda^3 = 1 + \frac{3}{5} \alpha_2^2 + \frac{3}{7} \alpha_3^2 + \frac{3}{9} \alpha_4^2 + \frac{2}{35} (\alpha_2^3 + 3\alpha_2^2 \alpha_4 + 2\alpha_2 \alpha_3^2) + \frac{6}{77} \alpha_3^2 \alpha_4 + \frac{20}{231} \alpha_2 \alpha_4^2 + \frac{18}{1001} \alpha_4^3. \quad (2)$$

On a représenté sur la figure 2 une famille de telles courbes ( $C$ ).

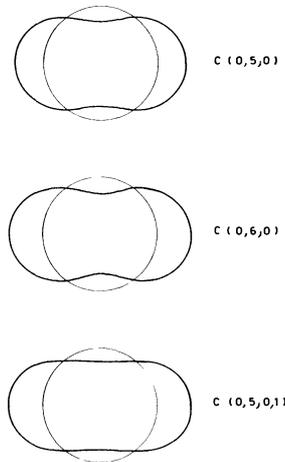


FIG. 2. — Famille de courbes méridiennes  $C(\alpha_2, \alpha_4)$ .

Le programme est le suivant :

a) Calculer numériquement avec une précision suffisante les premiers niveaux de particules dans un certain domaine de déformation.

b) Calculer l'énergie de l'état fondamental à  $N$  particules, pour diverses valeurs du nombre  $N$  correspondant à des cas typiques soit de couches complètes sphériques, soit de couches incomplètes, dans le domaine de déformation choisi.

c) Comparer cette énergie totale à celle du « modèle classique » correspondant, de façon à présenter les résultats sous forme de la différence entre l'énergie totale déterminée numériquement et une estimation

classique de cette énergie donnée par une formule asymptotique. Nous avons utilisé l'expression de Hill et Wheeler (2) pour l'énergie d'un gaz de Fermi. L'oscillation résiduelle manifeste alors clairement les effets de couche, proprement quantiques. Même si la formule de référence H.W. est insuffisamment exacte, c'est une façon commode de présenter les choses, puisque la formule classique absorbe une partie importante de la croissance de l'énergie avec la déformation (fig. 9 a, b, c).

Comme l'ont révélé les travaux précédents, le problème abordé par la méthode brutale de somme sur les niveaux est dominé par la question précision. Si, dans un noyau lourd,  $A = 240$ , on veut apprécier une fluctuation de 10 MeV, sur 2 000 MeV d'énergie totale, il faut une précision relative de l'ordre de  $10^{-3}$ .

Cette énergie étant une somme sur  $\frac{A}{4} = 60$  niveaux, la précision relative sur un niveau doit être environ  $60^{-1/2} 10^{-3} = 0(10^{-4})$ . Il est donc nécessaire de calculer chaque niveau avec 4 chiffres significatifs exacts. C'est cette précision qui, pratiquement, déterminera à la fois le nombre quantique principal maximal que l'on ne pourra dépasser et le domaine de variation des paramètres de déformation.

### III. Détermination des niveaux d'énergie. —

III.1. PUIITS DE POTENTIEL INFINI. — L'équation de Schrödinger et les conditions aux limites pour une particule de masse  $m$  enfermée dans le volume limité par la surface ( $S$ ) définie par l'équation (1), s'écrivent :

$$\begin{aligned} \Delta\psi + k^2\psi &= 0 \quad \text{dans } V \\ \psi &= 0 \quad \text{sur } (S). \end{aligned} \quad (3)$$

Ce système n'a de solution non nulle que pour un ensemble discret de valeurs réelles positives  $k^2$ .

L'énergie du niveau correspondant est :

$$E = \frac{\hbar^2}{2mR^2} k^2 \quad (4)$$

où  $R$  désigne le rayon de la sphère équivalente au « noyau  $A$  ». On pourrait prendre approximativement :

$$R = 1,3 A^{1/3}; \quad A = 4N \quad (5)$$

pour estimer l'ordre de grandeur des énergies en MeV, mais dans la suite on utilisera toujours la quantité sans dimension  $\varepsilon = k^2$ .

Les symétries du système sont la symétrie axiale et la symétrie de réflexion dans le cas  $\alpha_3 = 0$ . Les niveaux seront donc séparés par familles de moment angulaire axial donné  $M = 0, 1, 2, \dots$ , et dans le cas  $\alpha_3 = 0$  en deux classes, paires et impaires dans la réflexion par rapport au plan de symétrie orthogonal à l'axe.

(2) Article cité réf. [1], appendice, fig. 11.

Il est commode de développer la fonction d'onde inconnue  $\psi$  sur la base complète des ondes sphériques :

$$\psi^{(M)} = e^{iM\varphi} \sum_{l=M}^{\infty} a_l j_l(kr) P_l^M(\cos \theta). \quad (6)$$

Cette base est bien adaptée aux formes de surfaces ( $S$ ) voisines de la sphère (bien que nous ne nous limitons pas aux très petites valeurs de  $\alpha_2$  ou  $\alpha_4$ ). Son intérêt essentiel est que les fonctions  $P_l^M$  et  $j_l$  sont des fonctions très simples à calculer numériquement par récurrence. La série (6) étant convergente, il existera une approximation suffisante de  $\psi^{(M)}$  à  $L_1$  termes :

$$\psi^{(M)} \sim \sum_{L=1}^{L_1} A_L j_{L+M-1}(kr) P_{L+M-1}^M(x). \quad (7)$$

La borne  $L_1$  reste à déterminer. Si la parité par réflexion est définie, n'interviendront dans le développement (7) que les termes de même parité en  $L$ . La condition aux limites sur ( $S$ ) nous donne, d'après les équations (1) et (3) :

$$\varphi(x) \equiv \sum_{L=1}^{L_1} A_L j_{L+M-1}(kF(x)) P_{L+M-1}^M(x) = 0 \quad -1 < x < 1. \quad (8)$$

La fonction  $\varphi(x)$  sur  $[-1, +1]$  dépend de  $L_1$  coefficients  $A_L$  : elle ne peut être nulle identiquement, mais seulement en général en  $L_1$  points qu'il faut choisir de sorte que la fonction  $\varphi(x)$  soit la plus voisine possible de zéro. Raisonnons d'abord sur le cas  $M = 0$ . La fonction  $\varphi(x)$  naturellement définie sur  $[-1, +1]$  est sans doute développable en série de fonctions de Legendre :

$$\varphi(x) = \sum_{L=1}^{\infty} B_L P_{L-1}(x). \quad (9)$$

Le théorème sur lequel repose la méthode d'intégration de Gauss-Jacobi [8] nous dit que les coefficients  $B_L$  sont nuls jusqu'à l'ordre  $L_1$  inclus, si  $\varphi(x)$  s'annule sur les  $L_1$  zéros de  $P_{L_1+1}$ . Ces zéros sont les nœuds des formules d'intégration. Ils sont donnés dans les tables [9] avec 12 chiffres décimaux par exemple. La fonction  $\varphi(x)$  n'est pas nulle, mais orthogonale aux  $L_1$  premiers polynômes de Legendre. Ceci entraîne que, dans (8), nous tenons compte sûrement du développement de chaque  $j_{L-1}(kF(x))$  en fonction de Legendre jusqu'à l'ordre  $L_1$  au moins. Soit donc «  $x_i$  » la subdivision choisie d'ordre  $L_1$ , nous écrivons les  $L_1$  conditions :

$$\varphi(x_i) = 0; \quad i = 1, L_1$$

qui entraînent :

$$\Delta_{L_1}(k) \equiv \det. |j_{L+M-1}(kF_i) P_{L+M-1}(x_i)| = 0. \quad (10)$$

Nous avons raisonné uniquement sur le cas  $M = 0$ ; dans le cas  $M \neq 0$ , on devrait utiliser les nœuds définis par  $P_{L+M-1}(x_i) = 0$ , nous ne l'avons pas fait pour éviter de changer de subdivision  $x_i$  avec  $M$ . On peut justifier la chose ainsi : la fonction  $\varphi(x)$  contient un facteur sans importance qui peut être singulier en  $\pm 1$ ,  $(1-x^2)^{M/2}$ ; la fonction  $\varphi(x)(1-x^2)^{-M/2}$  est alors développable en fonction de Legendre d'ordre 0. L'expérience justifie ce point de vue.

La méthode force donc la fonction d'onde à s'annuler en des points de la méridienne ( $C$ ) assez régulièrement espacés angulairement : autrement dit, la particule n'est maintenue dans la cavité définie par  $S$  que par une grille dont la maille diminue avec l'ordre de la subdivision. Cette cage n'est efficace que si la « longueur d'onde » de l'état stationnaire correspondant est supérieure à la dimension de la maille, ce qui donne une limitation sur les nombres quantiques, orbital ou principal, donc une borne approchée pour les valeurs de  $k$ .

Le déterminant (10)  $\Delta_{L_1}(k)$  est une fonction réelle de  $k$  aisément calculable dont on obtient systématiquement les premiers zéros par une méthode d'interpolation linéaire classique.

III.2. Puits de potentiel fini. — La méthode précédente s'étend directement au cas du puits de potentiel de profondeur fini, à bords abrupts. Le problème dépend du paramètre supplémentaire :

$$x^2 = \frac{2mV_0 R^2}{\hbar^2}. \quad (11)$$

L'équation de Schrödinger nous donne :

$$\begin{aligned} \Delta\psi + k^2\psi &= 0 \quad \text{dans } V \\ \Delta\psi - q^2\psi &= 0 \quad \text{à l'extérieur de } V. \end{aligned} \quad (12)$$

$$\hbar^2 + q^2 = x^2$$

$$\varepsilon = -q^2; \quad E = \frac{\hbar^2}{2mR^2} \varepsilon. \quad (13)$$

On est alors amené à rechercher les zéros de la fonction  $\tilde{\Delta}_{2L_1}(k)$  qui est le déterminant d'ordre  $2L_1$  suivant, de dimension double du déterminant (10) :

$$\tilde{\Delta}_{2L_1}(k) = \begin{vmatrix} j_{L+M-1}(kF_i) & P_{L+M-1}^M(x_i) & h_{L+M-1}(qF_i) & P_{L+M-1}^M(x_i) \\ \hbar j'_{L+M-1}(kF_i) & P_{L+M-1}^M(x_i) & qh'_{L+M-1}(qF_i) & P_{L+M-1}^M(x_i) \end{vmatrix}. \quad (14)$$

Dans (14), les fonctions de Hankel sont ainsi définies :

$$h_0(z) = \frac{e^{-z}}{z}; \quad h_1(z) = e^{-z} \left( \frac{1}{z} + \frac{1}{z^2} \right), \dots; \quad h_{l+1}(z) = h_{l-1}(z) + \frac{h_l(z)}{z} (2l-1). \quad (15)$$

La condition  $\tilde{\Delta} = 0$  exprime simplement les conditions de raccordements aux différents points «  $x_i$  » de la méridienne ( $C$ ).

**IV. Le calcul numérique. Contrôle.** — Les calculs ont été effectués sur le calculateur CDC 6600. La méthode utilisée a été contrôlée par une série de tests numériques intermédiaires que l'on décrit rapidement ci-dessous.

**IV.1. CALCUL DES FONCTIONS DE BESSEL ET DE LEGENDRE.** — Le tableau I rassemble les niveaux du puits infini sphérique, qui sont donnés par les premiers zéros des fonctions de Bessel sphériques. Pour atteindre  $A = 260$ , il suffit de se limiter à l'intervalle en  $k$  compris entre 3 et 11 et à un moment angulaire  $l \leq 7$ . Si le rapport, grand axe/petit axe, des courbes ( $C$ ) est inférieur à 2, l'argument  $kr \equiv kF$  des fonctions de Bessel varie en gros dans le domaine 1,5 à 20. Dans un tel intervalle, une bonne méthode récurrente de calcul des fonctions de Bessel donne 8 chiffres significatifs exacts dans le domaine  $0 \leq l \leq 20$ .

On a la même précision pour les polynômes de Legendre jusqu'à  $M \leq 7$ . Dans les deux cas, les tables numériques connues permettent la comparaison et confirment la précision.

TABLEAU I

PUITS INFINI SPHÉRIQUE. NIVEAUX ET COUCHES

$k$	$\epsilon = k^2$	NOMBRES QUANTIQUES	$N$	$\llcorner A \llcorner = 4N$	$\frac{\hbar^2}{2mR^2}$
3,1416	09,8696	1s	1	4	4,900
4,4934	20,1907	1p	4	16	1,940
5,7634	33,2175	1d	9	36	1,125
6,2832	39,4784	2s	10	40	1,050
6,9879	48,8311	1f	17	68	0,737
7,7252	59,6795	2p	20	80	0,662
8,1825	66,9543	1g	29	116	0,516
9,0950	82,7192	2d	34	136	0,464
9,3558	87,5312	1h	45	180	0,385
9,4248	88,8264	3s	46	184	
10,4171	108,516	2f	53	212	0,346
10,5128	110,520	1i	66	264	0,299
10,9041	118,900	3p	69	276	
11,6570	135,886	1j			
11,7049	137,005	2g			

**IV.2. CALCUL DE DÉTERMINANTS.** — Les éléments de matrice du déterminant (10) sont d'un ordre de grandeur analogue à l'intérieur d'une même ligne ( $L + M$  fixé), et l'expérience montre que de tels déterminants n'ont rien de pathologique (un exemple de déterminant pathologique est celui de Hilbert :

$|a_{pq}| = \left| \frac{1}{p+q} \right|$ ;  $p; q = [1, N]$ . Sa valeur est extrêmement petite, de l'ordre de  $\exp(-N^2)$ , alors qu'on s'attendrait à l'unité pour des éléments aléatoires du même ordre de grandeur). Le sous-programme de calcul des déterminants (en double précision 6600) a été testé pour des déterminants de valeurs connues *a priori*. Le tableau II donne pour les différentes

valeurs de l'ordre  $N$  du déterminant les résultats numériques du calcul et la valeur exacte du déterminant :

$$D_N = \left| \sin \left( \frac{\pi pq}{N+1} \right) \right|_N = \left( \frac{N+1}{2} \right)^{N/2}. \quad (16)$$

On obtient une précision relative d'au moins  $10^{-8}$  jusqu'à  $N = 90$ .

TABLEAU II

CALCUL NUMÉRIQUE DU DÉTERMINANT

$N$	$\left( \frac{N+1}{2} \right)^{N/2}$	$ D_N $
10	$0,50328437 \times 10^4$	$+ 0,50328437 \times 10^4$
20	$0,59316416 \times 10^7$	$0,59316416 \times 10^7$
30	$0,71610297 \times 10^{18}$	$0,71610297 \times 10^{18}$
40	$0,17182139 \times 10^{27}$	$0,17182139 \times 10^{27}$
50	$0,14571508 \times 10^{36}$	$0,14571508 \times 10^{36}$
60	$0,33806108 \times 10^{45}$	$0,33806108 \times 10^{45}$
90	$0,40786163 \times 10^{75}$	$0,40786163 \times 10^{75}$

TABLEAU III

CALCUL D'UN ZÉRO DE  $D_N(x)$  PAR INTERPOLATION LINÉAIRE ITÉRÉE

$N$	ORDRE DE L'ITÉRATION	$D_N(x)$	$x$
$N = 40$	0		5,98750000
	1	$- 4,53014742 \times 10^{38}$	6,01250000
	2	$4,32703497 \times 10^{38}$	6,00028665
	3	$1,01500533 \times 10^{37}$	5,99999328
	4	$- 2,3824078 \times 10^{35}$	6,00000000
$N = 60$	5	$1,25368248 \times 10^{32}$	6,00000000
	0		5,98750000
	1	$- 3,56 \times 10^{71}$	6,01250000
	2	$3,36 \times 10^{71}$	6,00035804
	3	$9,91 \times 10^{69}$	5,99998950
	4	$- 2,9 \times 10^{68}$	6,00000001
	5	$2,39 \times 10^{65}$	6,00000000

IV.3. RECHERCHE DES ZÉROS PAR LA MÉTHODE D'INTERPOLATION LINÉAIRE. — On a pris l'exemple suivant :

La matrice  $O(p, q) = \sqrt{\frac{2}{N+1}} \sin\left(\frac{\pi pq}{N+1}\right)$  est orthogonale. La matrice :

$$A(I, J) = \sum_{K=1}^N KO(I, K) O(J, K) \quad (18)$$

a donc pour valeurs propres les nombres  $1, 2, \dots, N$ .

On a calculé que les zéros de la fonction numérique :

$$D_N(x) = |A(I, J) - x \delta(I, J)|_N. \quad (19)$$

Le tableau III donne les résultats de l'interpolation linéaire convergente vers  $x = 6$ , pour  $N = 40, 60$ .

IV.4. TEST DE LA SPHÈRE EXCENTRÉE. — Les fonctions d'entrée et les éléments de la méthode étant testés, il restait à l'appliquer à un cas dont les résultats fussent connus et servent de point de comparaison. On a choisi la courbe méridienne ( $C_0$ ) d'équation polaire :  $r = F_0(x) \equiv cx + \sqrt{1 - c^2(1 - x^2)}$ ,  $0 < c < 1$  ( $x = \cos \theta$ ).

C'est un cercle de rayon 1 et de centre ( $\theta = 0, r = c$ ). On doit donc obtenir les niveaux du puits infini sphérique (rassemblés dans le tableau I). Nous donnons dans le tableau IV les premiers zéros de  $\Delta_{L_1}(k)$  (numérotés par le nombre quantique radial  $n$ ), pour une subdivision à 15 nœuds, « l'excentricité »  $c$  variant de 0,2 à 0,9. On a séparé les niveaux selon les divers  $M$ . L'examen de ces résultats appelle les remarques suivantes :

a) La précision décroît avec le rang du niveau au-dessus du fondamental à  $M$  donné. Elle croît donc avec  $M$ , pour une région d'énergie donnée.

b) Dans la région  $c \leq 0,7$ ,  $k < 11$ ,  $M \leq 7$ , on a 5 chiffres exacts pour 40 niveaux et 4 chiffres seulement pour trois d'entre eux. Dans le voisinage des fondamentaux, la précision peut atteindre 7 ou 8 chiffres.

c) Jusqu'à  $c = 0,8$ , on peut encore compter partout sur une précision relative de  $10^{-3}$ , l'abaissement de précision étant dû à quelques niveaux  $M = 0, 1, 2$ , des plus élevés.

d) Pour l'excentricité  $c = 0,9$ , la précision tombe brutalement à  $2 \times 10^{-2}$  pour certains niveaux.

e) Pour  $c = 0,7$ , les deux niveaux voisins  $2f$  et  $1i$  ne sont plus obtenus pour  $M = 0$ , alors qu'ils le sont très bien pour  $M \geq 1$ . Ce phénomène est constant dès que l'ordre du déterminant  $L_1$  est insuffisant pour le rang des niveaux considérés. La fonction d'onde ne peut plus être développée avec la précision suffisante sur seulement  $L_1$  fonctions de base. Ce point est étudié dans le paragraphe suivant.

IV.5. TEST DE CONVERGENCE. — On a examiné, dans le cas de la sphère excentrée, le problème de la représentation d'une fonction d'onde sur la base des  $j_l P_l$ . Si l'on pose  $R = (r^2 + c^2 - 2rcx)^{1/2}$ , les

fonctions d'onde  $s$  dans la sphère excentrée ont toutes la même dépendance fonctionnelle en  $(\sin kR)/kR$ , qui admet le développement connu :

$$\frac{\sin kR}{kR} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) j_l(kc) j_l(kr) P_l(x). \quad (20)$$

On a étudié la convergence de cette série en la tronquant à l'ordre  $L_1$  et en se plaçant sur le cercle de rayon 1 pour les valeurs propres  $k = N\pi$ . On a donc examiné la convergence vers zéro de la somme suivante :

$$S_{L_1}(N, e, x_i) = \sum_{L=1}^{L_{\max}} (2L-1) j_{L-1}(e) j_{L-1}(\rho_i) P_{L-1}(x_i) \quad (21)$$

avec :

$$e = kc; \quad \rho_i = kr = ex_i + \sqrt{N^2\pi^2 - (1 - x_i^2) e^2} \quad (22)$$

les points  $x_i$  étant les nœuds de la subdivision choisie. Les résultats sont les suivants, pour une subdivision de 11 nœuds :

$N = 1$ , état fondamental :

$$e = 1; \quad c \sim 0,32$$

convergence de  $S_{L_{\max}}$  vers  $10^{-4}$  à  $10^{-22}$  près pour  $L_{\max} \geq 13$ , dans toutes les directions (tous les  $x_i$ ).

$$e = 3; \quad c \sim 0,96$$

convergence vers  $10^{-14}$  en 6 termes vers l'arrière ( $x_i$  voisins de  $-1$ ) et en 12 termes vers l'avant ( $x_i$  voisins de  $+1$ ).

$N = 2$ , deuxième état  $s$  :

$$e = 2; \quad c \sim 0,32$$

$S$  converge vers  $10^{-14}$  en 12 termes dans toutes les directions.

$$e = 4; \quad c \sim 0,64$$

$S$  converge vers  $10^{-14}$  en 12 termes vers l'arrière en 17 termes vers l'avant.

$$e = 6; \quad c \sim 0,96$$

$S$  converge vers  $10^{-14}$  en 9 termes vers l'arrière en 20 termes vers l'avant.

$N = 3$ , troisième état  $s$  :

$$e = 4; \quad c \sim 0,42$$

$S$  converge vers  $10^{-14}$  en 14 termes vers l'arrière en 18 termes vers l'avant.

$$e = 8; \quad c \sim 0,84$$

$S$  converge vers  $10^{-14}$  en 13 termes vers l'arrière vers  $10^{-9}$  en 20 termes vers l'avant.

$N = 4$  (état non atteint pour  $A < 300$ ) :

$$e = 4; \quad c \sim 0,32$$

$S$  converge vers  $10^{-14}$  en 18 termes dans toutes les directions.

$$e = 12; \quad c \sim 0,96$$

$S$  converge vers  $10^{-14}$  en 20 termes vers l'arrière vers  $10^{-5}$  en 20 termes vers l'avant.

TABLEAU IV

PUITS INFINI : TEST DE LA SPHÈRE EXCENTRÉE

 $L_1 = 15$ ;  $0 \leq M \leq 5$ ;  $c$ , excentricité;  $n$ , nombre quantique du niveau

$M = 0$						
$n$						
$c$	1s	1p	1d	2s	1f	2p
0	3,14159265					
0,2	3,14159265	4,493409	5,763459	6,283185	6,987932	7,725252
0,4	3,14159265	4,493409	5,763459	6,283185	6,987932	7,725252
0,5	3,14159265	4,493409	5,763459	6,283185	6,987932	7,725252
0,6	3,14159265	4,493409	5,763459	6,283185	6,987932	7,725252
0,7	3,14159265	4,493409	5,763459	6,283185	6,987932	7,725252
0,8	3,14159261	4,493409	5,763459	6,283185	6,987933	7,725252
0,9	3,60	4,487448	5,778834	6,282926	6,963789	7,726094

$M = 0$						
$n$						
$c$	1g	2d	1h	3s	2f	1i
0						
0,2	8,182561	9,095011	9,355812	9,424778	10,417118	10,512835
0,4	8,182561	9,095011	9,355812	9,424778	10,417118	10,512802
0,5	8,182561	9,095011	9,355803	9,424778	10,417118	10,512323
0,6	8,182560	9,095011	9,355689	9,424778	10,417118	10,508871
0,7	8,182547	9,095011	9,354856	9,424778		
0,8	8,182449	9,095010	9,351011	9,424778		
0,9	8,206308	9,093959	9,320629	9,424859		

$M = 1$						
$n$						
$c$		1p	1d		1f	2p
0						
0,2		4,493409	5,763459		6,987932	7,725252
0,4		4,493409	5,763459		6,987932	7,725252
0,5		4,493409	5,763459		6,987932	7,725252
0,6		4,493409	5,763459		6,987932	7,725252
0,7		4,493409	5,763459		6,987932	7,725252
0,8		4,493410	5,763459		6,987937	7,725252
0,9		4,48	5,79		6,93	7,7252

$M = 1$							
$n$							
$c$	1g	2d	1h		2f	1i	3p
0							
0,2	8,182561	9,095011	9,355812		10,417118	10,512835	10,904121
0,4	8,182561	9,095011	9,355812		10,417118	10,512839	10,904121
0,5	8,182561	9,095011	9,355813		10,417118	10,512878	10,904122
0,6	8,182561	9,095011	9,355823		10,417117	10,512900	10,904122
0,7	8,182563	9,095011	9,355863		10,417093	10,510303	10,904121
0,8	8,182564	9,095009	9,355733		?	?	10,904112
0,9	8,21	9,0952	9,352		10,35	10,42	10,904105

TABLEAU IV (suite)

 $M = 2$ 

$n$		
$c$	$1d$	$1f$
—	—	—
0		
0,2	5,763459	6,987932
0,4	5,763459	6,987932
0,5	5,763459	6,987932
0,6	5,763459	6,987932
0,7	5,763459	6,987932
0,8	5,763459	6,987932
0,9	5,7663	6,9962

$n$						
$c$	$1g$	$2d$	$1h$	$2f$	$1i$	$1j$
—	—	—	—	—	—	—
0						
0,2	8,182561	9,095011	9,355812	10,417118	10,512835	11,657032
0,4	8,182561	9,095011	9,355812	10,417118	10,512835	11,657054
0,5	8,182561	9,095011	9,355812	10,417118	10,512842	11,657577
0,6	8,182561	9,095011	9,355813	10,417118	10,512977	11,662105
0,7	8,182561	9,095011	9,355830	10,417121	10,511417	11,6792
0,8	8,182562	9,095011	9,355988	10,417142	10,519971	11,6624
0,9	8,12	9,0961	9,45	?	?	?

 $M = 3$ 

$n$	
$c$	$1f$
—	—
0	
0,2	6,987932
0,4	6,987932
0,5	6,987932
0,6	6,987932
0,7	6,987932
0,8	6,987932
0,9	6,9865

$n$					
$c$	$1g$	$1h$	$2f$	$1i$	$1j$
—	—	—	—	—	—
0,2	8,182561	9,355812	10,417118	10,512835	11,657032
0,4	8,182561	9,355812	10,417118	10,512835	11,657030
0,5	8,182561	9,355812	10,417118	10,512834	11,657027
0,6	8,182561	9,355812	10,417118	10,512832	11,657499
0,7	8,182561	9,355811	10,417118	10,512886	11,6641
0,8	8,182562	9,355809	10,417121	10,513818	?
0,9	8,16	9,34999	10,4176	?	?

TABLEAU IV (suite)

$M = 4$

$n$

$c$	$1g$	$1h$	$1i$	$1j$
0				
0,2	8,182561	9,355812	10,512835	11,657032
0,4	8,182561	9,355812	10,512835	11,657032
0,5	8,182561	9,355812	10,512835	11,657027
0,6	8,182561	9,355812	10,512834	11,656962
0,7	8,182561	9,355812	10,512824	11,656765
0,8	8,182561	9,355813	10,512765	11,659413
0,9				

$M = 5$

$n$

$c$	$1h$	$1i$	$1j$
0			
0,2	9,355812	10,512835	11,657032
0,4	9,355812	10,512835	11,657032
0,5	9,355812	10,512835	11,657032
0,6	9,355812	10,512835	11,657027
0,7	9,355812	10,512835	11,656942
0,8	9,355812	10,512831	11,656252
0,9			

Ce test de convergence montre comment la précision tombe dans la direction en avant, pour des excentricités aussi fortes que 0,9. Pour obtenir 5 chiffres sur tous les niveaux du domaine exploré dans l'exemple traité section IV.4, il aurait fallu choisir  $L_1 = 20$ . On s'est limité à  $L_1 = 15$ , ce qui nous a permis d'atteindre l'excentricité  $c = 0,8$ .

**V. Calcul numérique. Résultats.** — V.1. Puits INFINI. — Nous appuyant sur les résultats précédents, nous pensons que la précision atteinte dans le cas de courbes méridiennes quelconques pas trop irrégulières leur est comparable. Puisque le test de la sphère excentrée nous donne 4 chiffres significatifs exacts pour des excentricités inférieures à 0,7, on se limitera à des courbes méridiennes ayant une « excentricité » du même ordre, ce qui correspondra à un rapport grand axe/petit axe inférieur à 2. Ceci définit un domaine en  $\alpha_2, \alpha_4$ , contenu dans :

$$0 < \alpha_2 < 0,50 \text{ et } 0 < \alpha_4 < 0,15$$

(pour les petites déformations, le paramètre  $\beta$  usuel vaut environ  $\frac{3}{2} \alpha_2$ ).

Nous nous sommes donc limités aux formes allongées et en haltère (fig. 2). Ce domaine ne contient donc pas les formes d'équilibre instable des noyaux au seuil de fission, mais n'en est pas loin. Cohen et Swiatecki [10] donnent en effet les valeurs suivantes des paramètres  $\alpha_2$  et  $\alpha_4$  (les autres sont négligeables) correspondant au seuil de fission d'une goutte liquide chargée avec les constantes du noyau  $^{236}\text{U}$  :

$$\xi = (Z^2/A) : (Z^2/A)_c = 0,74$$

$$\alpha_2 = 0,72; \quad \alpha_4 = 0,20$$

$$\text{Rayon maximum} : 1,71$$

$$\text{Rayon minimum} : 0,64.$$

Une élongation  $\alpha_2 = 0,50$  correspondrait en gros à un  $\xi$  égal à 0,80.

Dans le domaine des déformations  $\alpha_2, \alpha_4$  défini précédemment, on a choisi un pas de 0,03 en  $\alpha_2$  et 0,05 en  $\alpha_4$ . Tous les niveaux ont été sortis jusqu'à une valeur maximale  $k_{\text{max}}^2$  égale à 160, c'est-à-dire jusqu'au niveau  $4s$  inclus. La symétrie de réflexion permet de séparer le calcul des pairs et des impairs, donc de conserver une dimension raisonnable pour les déterminants du type (10), tout en doublant l'ordre du

développement des fonctions d'onde. Le choix de la dimension, donc de la subdivision «  $x_i$  », résulte d'un compromis entre la nécessité d'une représentation correcte des fonctions d'onde déformées et la nécessité de maintenir une précision suffisante dans le calcul du déterminant. On s'est fixé à la subdivision à 10 nœuds (zéros de  $P_{21}$ ), ce qui donne des déterminants d'ordre 11 ou 10 selon la parité + ou -. Au-delà de 10, l'ordre des fonctions de Bessel dépasse 21, elles sont calculées avec une précision insuffisante dans la zone de transition qui précède le point tournant, et la précision sur les niveaux passe de  $10^{-4}$  à  $10^{-3}$  : le tableau VI permet d'en juger. Les niveaux impairs y ont été calculés pour  $\alpha_2 = 0,42$ ,  $\alpha_4 = 0$ , avec trois subdivisions différentes : 9, 11 et 13 nœuds. La stabilité est remarquable de 9 à 11 : la différence des énergies calculées des niveaux impairs est 0,04 sur un total égal à 2 500 environ. La variation est de 1 quand on passe à 15 nœuds.

Comme dans le cas du puits infini sphérique excentré (voir tableau IV), on a sûrement dépassé la limite acceptable de précision lorsque des couples trop voisins de niveaux disparaissent (par paire) (voir *fig. 3*). Ceci

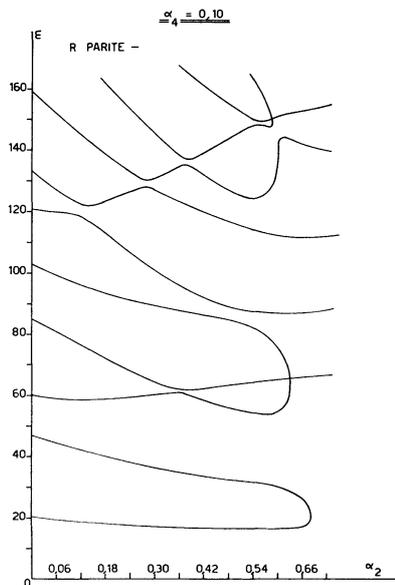


FIG. 3. — Figure montrant la disparition par paires de certains couples de niveaux dans une région de trop grande déformation ou pour des énergies trop élevées. Phénomène dû à la dimension insuffisante du déterminant ou du développement de la fonction d'onde.

a trait à la propriété générale des niveaux de mêmes nombres quantiques que l'on observe ici, à savoir que les niveaux ne se croisent pas, mais s'échangent. Tout se passe comme si le spectre avait, à toute déformation, une approximation d'ordre 0 donnée par un hamiltonien séparable, la dégénérescence aux croisements étant levée par un potentiel résiduel perturbatif. On constate que la distance d'approche des niveaux peut

être assez petite, par exemple pour  $\alpha_4 = 0,10$ ,  $\alpha_2 = 0,36$   $M = 0$ , on a le couple séparé 116,3 et 117,3. La détermination détaillée des courbes (*fig. 3*) sur lesquelles le déterminant s'annule dans le voisinage d'un groupe de deux ou trois « niveaux » proches montre que la disparition de certains niveaux par paires pour les grandes déformations n'est pas due à une mauvaise précision du calcul du déterminant ou de ses zéros. Ceci vient de la limitation des moments orbitaux admis : la fonction d'onde dans un puits trop déformé ne peut être représentée correctement par le nombre choisi de termes. Celle-ci est forcée de s'annuler en certains points fixés de la méridienne ( $C$ ) : ces conditions aux limites ne sont pas hermitiques et les énergies peuvent devenir complexes. C'est probablement ce qui se passe (nous n'en avons pas une preuve directe) lorsque les points «  $x_i$  » de ( $C$ ) ne peuvent être reliés continûment par une ligne ( $C'$ ) de zéros de  $\Delta$  ayant la même connexité que ( $C$ ). On a, en tout cas, vérifié que la disparition des niveaux était repoussée à une valeur plus grande de la déformation en augmentant seulement un peu le nombre de nœuds. On est alors limité du côté de la précision du calcul des fonctions de Bessel, mais celle-ci pourrait sans doute être améliorée.

On a représenté sur les figures 4 et 5 la variation d'ensemble du spectre pair et impair en fonction de  $\alpha_2$ ,

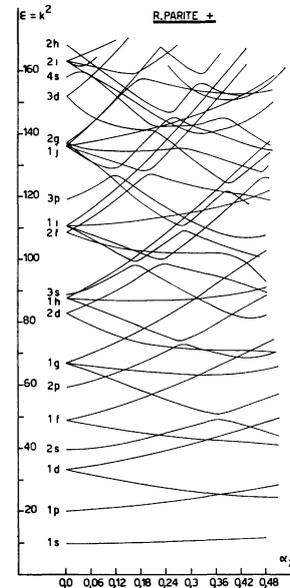


FIG. 4. — Niveaux d'énergie de R-parité positive en fonction de  $\alpha_2$ , dans le puits de potentiel infini.

pour  $\alpha_4 = 0$ , dans la région où nous sommes sûrs d'avoir tous les niveaux. On y distingue les zones de fortes densités et les zones lacunaires qui sont la cause immédiate des oscillations de l'énergie totale en fonction de la déformation.

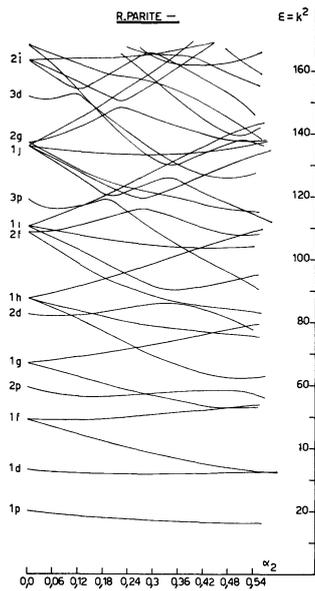


FIG. 5. — Niveaux d'énergie de R-parité négative en fonction de  $\alpha_2$  ( $\alpha_4 = 0$ ), dans le puits de potentiel infini.

V.2. Puits fini. — Nous avons obtenu quelques résultats préliminaires concernant les niveaux du puits de potentiel de profondeur finie, en appliquant les méthodes décrites ci-dessus et la théorie de la section III.2. Pour les mêmes raisons que précédemment, on se limite à  $L_1 = 10, 12, 15$  au maximum, ce qui amène à chercher les zéros d'un déterminant  $\tilde{\Delta}$  d'ordre 20 à 30. Les résultats du test de la sphère excentrée sont résumés dans le tableau V. Les niveaux d'énergie dans le puits sphérique sont aisément calculés à toute profondeur (nous avons choisi la valeur :

$$x = \left( \frac{2mV_0R^2}{\hbar^2} \right)^{1/2} = 9,814$$

pour laquelle Feenberg [11] les avait déterminés), les conditions de validité sont plus sévères que dans le cas infini. On obtient encore 4 chiffres significatifs exacts sur l'ensemble des niveaux jusqu'à des « excentricités »  $c = 0,4$ , en se limitant à  $L_1 = 17$  (ici on n'a pas la symétrie par réflexion, le développement de la fonction d'onde va jusqu'à  $P_{16}$  et l'on a des déterminants  $34 \times 34$ ). En augmentant la dimension jusqu'à  $L_1 = 19$ , on peut aller jusqu'à  $c = 0,5$ , en conservant 4 chiffres significatifs (voir tableau V (suite)).

Pour des excentricités plus grandes, on perd un ou deux chiffres, mais si la précision ne permet plus d'effectuer valablement une « somme sur les niveaux », elle est tout de même suffisante pour représenter à 2 % près l'allure correcte du spectre.

Revenant à la famille de courbe  $C(\alpha_2)$ , on a choisi  $L_1 = 12$ , ce qui fait intervenir jusqu'à  $P_{22}$  à cause de la symétrie. On a obtenu la variation du spectre

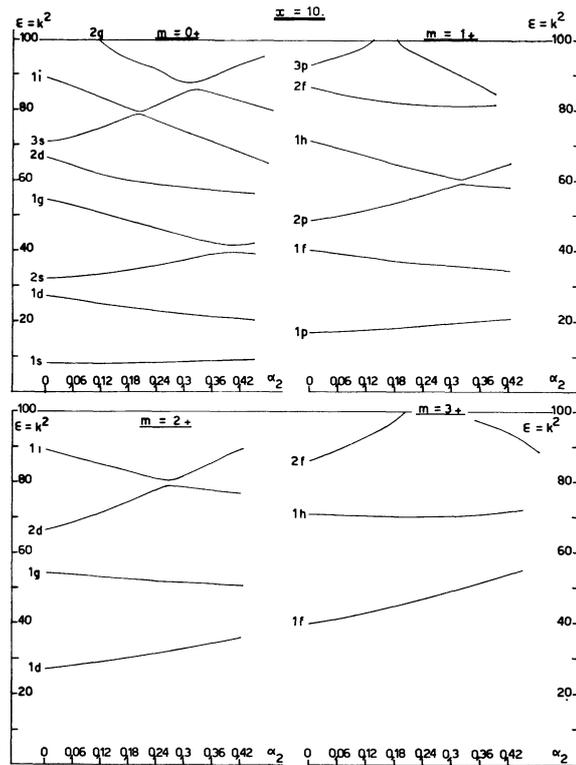


FIG. 6. — Niveaux d'énergie dans le puits de potentiel fini à bords abrupts en fonction de la déformation  $\alpha_2$  ( $x = 10$ ), R-parité positive.

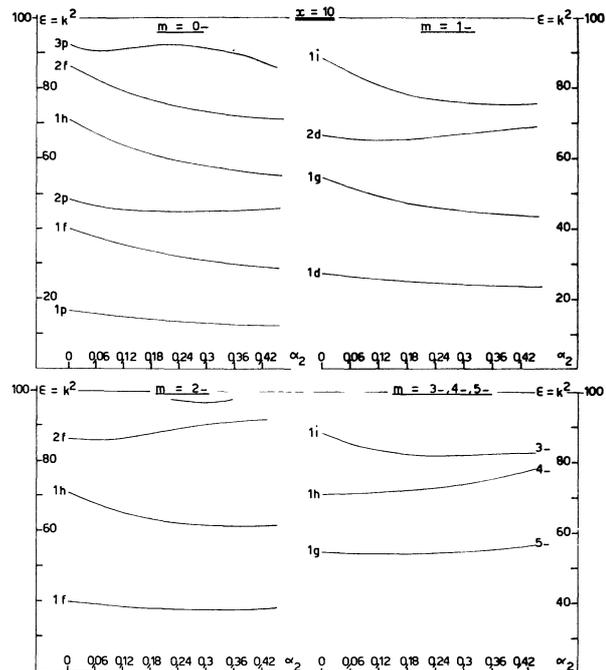


FIG. 7. — Niveaux d'énergie dans le puits de potentiel fini à bords abrupts en fonction de la déformation  $\alpha_2$  ( $x = 10$ ), R-parité négative.



TABLEAU VI

INFLUENCE DU CHOIX DE LA SUBDIVISION SUR LA PRÉCISION

NIVEAUX IMPAIRS DU PUIITS INFINI :  $\alpha_2 = 0,42$ ,  $\alpha_4 = 0$   
SUBDIVISION A 9, 11 ET 14 NŒUDS

NOMBRES QUANTIQUES	NOMBRE DE NŒUDS		
	9	11	14
$M = 0$	16,5085 35,431 58,5591 64,040 85,327 100,34 121,31 133,86 143,81 163,279	16,5084 35,432 58,5592 64,035 85,324 100,38 121,32 133,87 143,65 163,28	16,5094 35,423 58,558 64,095 85,362 100,04 121,20 133,84 145,0 163,23
$M = 1$	32,230 54,250 84,101 91,584 117,649 126,565 157,508	32,230 54,251 84,098 91,584 117,649 126,550 157,510	32,226 54,28 83,95 91,55 117,77 127,14 157,43
$M = 2$	52,168 77,120 110,077 126,936 149,897 161,91	52,169 77,116 110,078 126,935 149,947 161,94	52,174 77,07 110,26 126,94 149,52 161,76
$M = 3$	76,198 103,803 139,75 166,98	76,198 103,794 139,81 166,98	76,197 103,81 139,78 166,98
$M = 4$	104,210 134,296	104,209 134,304	104,208 134,315
$M = 5$	136,131 168,583	136,130 168,599	136,130 168,596

VI. L'énergie totale. — L'énergie totale des  $N$  fermions identiques enclos par ( $S$ ) est donc entièrement cinétique : l'énergie du fondamental s'écrit donc en unités réduites :

$$\epsilon_T = \sum_{i=1}^N k_i^2 \left( E_T = \frac{\hbar^2}{2mR^2} \epsilon_T \right) \quad (23)$$

où la somme porte sur les  $N$  premiers niveaux occupés, compte tenu de leur dégénérescence (1 pour  $M = 0$ , 2 pour  $M > 0$ ). La fonction  $\epsilon_T = \epsilon_T(N, \alpha)$  a été calculée pour diverses valeurs de  $N$  correspondant à des couches complètes ou non. Dans le premier cas,  $\epsilon_T(N, \alpha)$  présente un minimum absolu pour  $\alpha = 0$ ,

dans le second cas pour  $\alpha \neq 0$ . Les figures 8 et 9 illustrent l'un et l'autre cas en montrant la croissance assez rapide de  $\epsilon_T$  avec les paramètres de déformation. Cette quantité  $\epsilon_T$ , qui est l'énergie totale du système

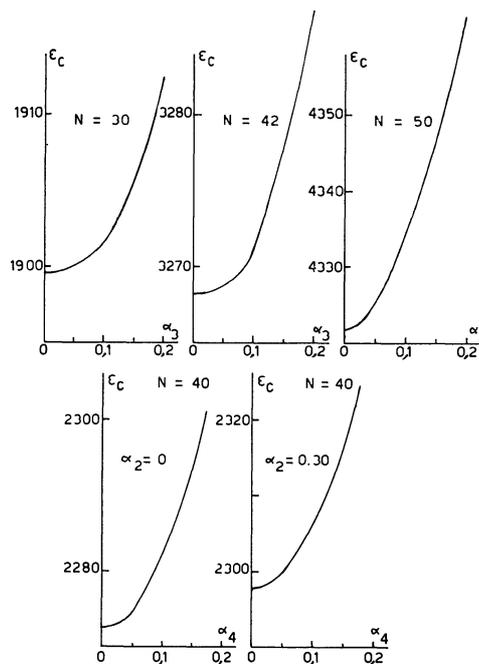


FIG. 8. — Formule asymptotique de Wheeler. Allure de  $\epsilon_{CL}$  en fonction de la déformation (énergie totale de  $N$  nucléons en fonction des paramètres de déformation  $\alpha_3$  et  $\alpha_4$ ).

dans un modèle beaucoup trop idéalisé, n'est pas directement intéressante. On a donc comparé  $\epsilon_T$  à l'expression  $\epsilon_{CL}(N, \alpha)$  de l'énergie du système « classique » correspondant (classique signifie seulement :  $N$  grand). Cette comparaison a été faite par H.W. pour un système de fermions dans une boîte [1] et reprise par Myers et Swiatecki [12]. La quantité  $\epsilon_{CL}$  est un développement en puissances descendantes du paramètre :

$$k = \left( \frac{9\pi}{2} N \right)^{1/3} \quad (24)$$

$$\epsilon_{CL} = \frac{2}{15\pi} k^5 + \frac{S}{8} k^4 + \left( \frac{3\pi}{32} S^2 - \frac{L}{3\pi} \right) k^3 + 0(k^2). \quad (25)$$

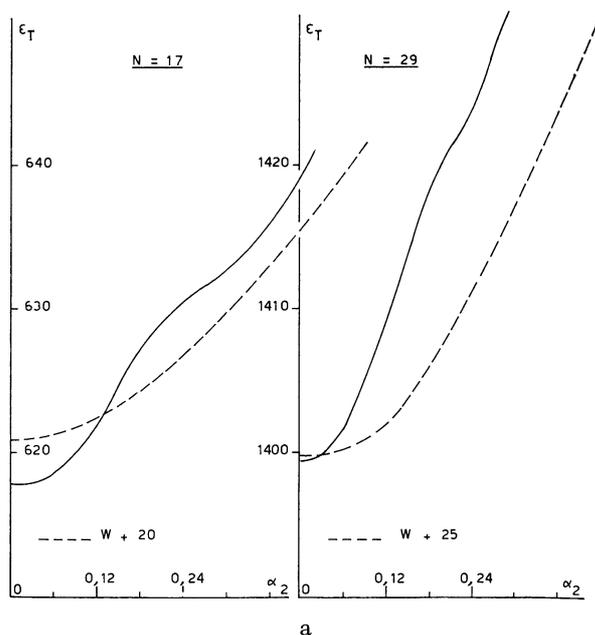
La dépendance dans la déformation intervient dans ces premiers termes par l'intermédiaire des quantités :

$$S = \frac{\text{surface de } (S)}{4\pi}$$

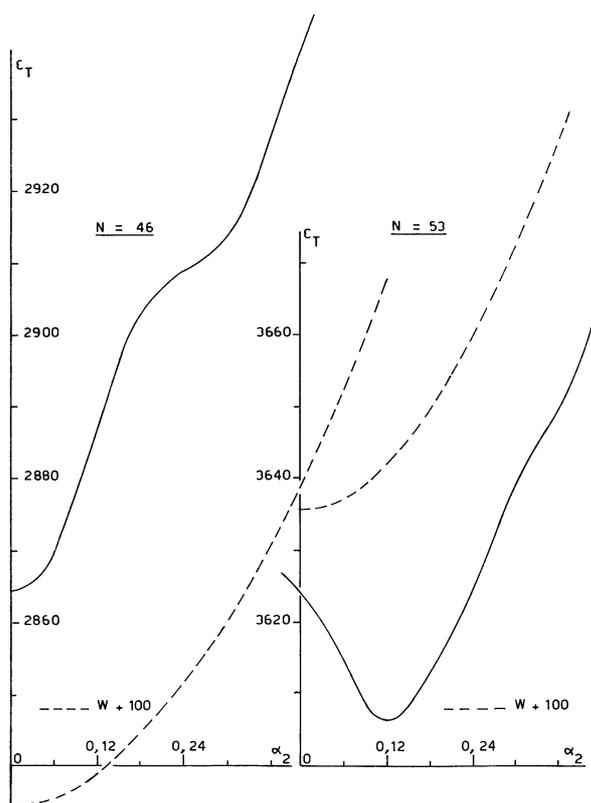
et :

$$L = \frac{1}{2\pi} \int x \, d\sigma = \frac{\text{courbure moyenne}}{2\pi}.$$

Pour la sphère, on a  $S = 1$  et  $L = 2$ .



a



b

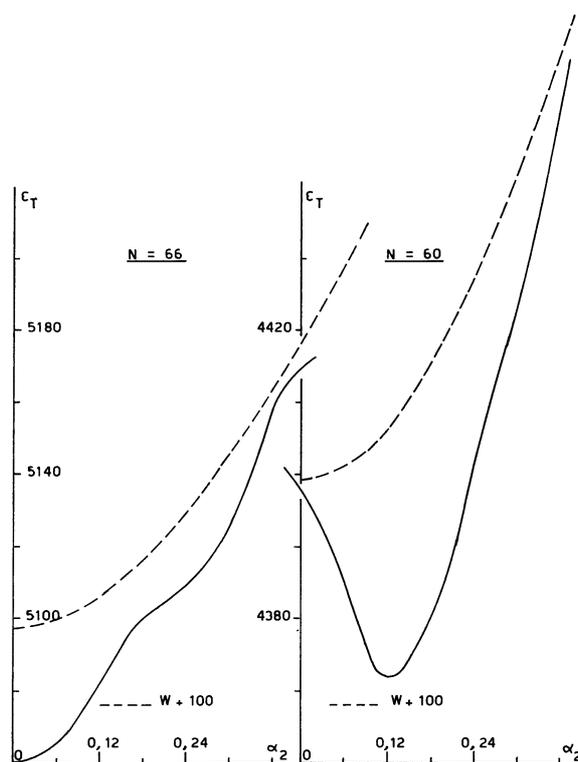
Les figures 9 montrent la variation de  $\varepsilon_{CL}$  (calculée avec les trois termes de (25)) avec le paramètre  $\alpha_2$  : la croissance des courbes  $\varepsilon_{CL}$  et  $\varepsilon_T$  est semblable. On verra en effet que la différence  $\delta$  :

$$\delta(N, \alpha) = \varepsilon_T(N, \alpha) - \varepsilon_{CL}(N, \alpha) \quad (26)$$

a une amplitude de variation beaucoup plus faible. Il serait intéressant de connaître le développement de  $\varepsilon_{CL}$  jusqu'au terme constant inclus (termes en  $k^2, k, k^0$ ) de façon à absorber au maximum la dépendance de  $\varepsilon_T$  dans la déformation et à réduire l'écart  $\delta$  à sa partie purement oscillante. Dans tous les cas, l'expression à trois termes de  $\varepsilon_{CL}$  donne une approximation de  $\varepsilon_T$  de l'ordre de 1,5 % ; l'oscillation résiduelle est de l'ordre de 0,5 %, il semble donc qu'un terme à variation lente en  $k^2, k, \dots$ , dans  $\varepsilon_{CL}$  pourrait encore diminuer l'écart.

**VII. L'oscillation résiduelle de l'énergie.** — A l'observation des familles de courbes  $\delta(\alpha_2, \alpha_4, N)$ , on peut faire les remarques suivantes :

a) Ces courbes  $\delta$  ne représentent que la différence  $\varepsilon_T - \varepsilon_{CL}$ , ou si l'on veut la « correction de couche » dans le modèle considéré. Dans un modèle plus réaliste, c'est la quantité dont on pourrait corriger une formule



c

FIG. 9. — Croissance comparée de l'énergie totale  $\varepsilon_T$  et de l'approximation classique  $\varepsilon_{CL}$  :

9 a)  $N = 17, 29$ .

9 b)  $N = 46, 53$ .

9 c)  $N = 60, 66$ .

de masse basée sur le modèle de la goutte liquide par exemple, tenant compte correctement des énergies de surface, de symétrie, coulombiennes, etc. Du fait de la compensation approximative des deux termes d'énergie superficielle et coulombienne, au voisinage de la forme sphérique, l'énergie de la goutte varie beaucoup moins vite avec la déformation que la quantité  $\epsilon_{CL}$  de notre modèle. Les fluctuations de la quantité  $\delta$  se surimposent donc à la variation régulière de l'énergie de la goutte sans que soient trop perturbées les positions des minima, tout au moins jusqu'aux environs de la déformation correspondant au seuil de fission <sup>(3)</sup>. Étant donné le caractère trop schématique du modèle traité ici, nous n'avons pas cherché à reconstruire une « surface d'énergie » approximative.

b) Avec des fluctuations locales, les courbes  $\delta(\alpha_2)$  manifestent le même comportement oscillatoire, et aussi une sorte de stabilité des valeurs de  $\alpha_2$  correspondant aux maxima et minima, lorsque  $N$  varie sur quelques unités (fig. 10). Le faisceau des courbes pour diverses valeurs de  $N$  paraît aussi parfois avoir quelques « points fixes », par exemple :

$$\begin{aligned}
 40 \leq N \leq 44; & \quad \alpha_2 \sim 0,12; \quad \alpha_2 \gtrsim 0,30 \\
 50 \leq N \leq 55; & \quad \alpha_2 \sim 0,12; \quad \alpha_2 \sim 0,22; \quad \alpha_2 \approx 0,38 \\
 62 \leq N \leq 67; & \quad \alpha_2 \sim 0,10; \quad \alpha_2 \sim 0,27; \quad \alpha_2 \approx 0,44.
 \end{aligned}$$

Les oscillations d'amplitude appréciable n'existent qu'au-dessus de  $N \approx 34$ . Cette amplitude varie beaucoup avec le remplissage. Dans ce modèle, elle n'est atténuée par aucun effet d'interaction résiduelle (appariement) ni aucune sorte de compensations dues à l'existence de plusieurs types de particules. C'est pourquoi cette amplitude maximale est nettement plus forte que celle qui a été déterminée par Strutinsky de façon réaliste. Par exemple, pour  $N = 57$ , l'oscillation entre

<sup>(3)</sup> Voir réf. [7], fig. 14.

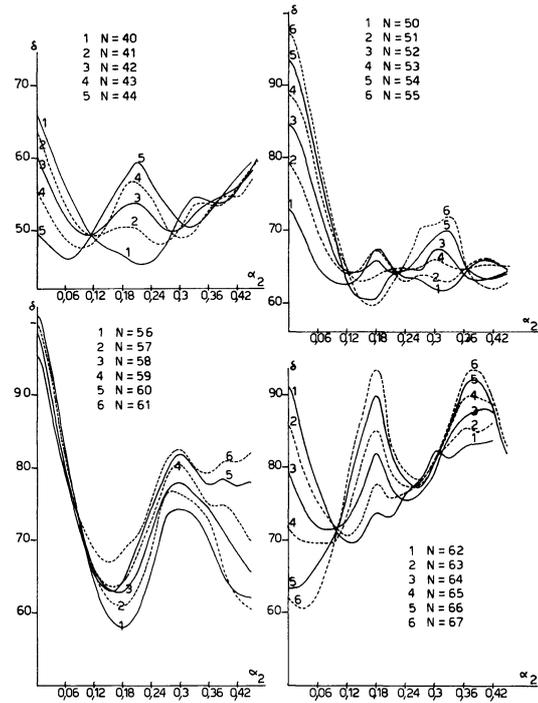


FIG. 10. — (a, b, c, d) Oscillation résiduelle  $\delta = \epsilon_T - \epsilon_{CL}$  en fonction de  $\alpha_2$  et de  $N$  ( $\alpha_4 = 0$ ).

le deuxième maximum et le deuxième minimum est d'environ 15 unités, ce qui donne :

$$(15 \times (\hbar^2)/(2mR^2)) \sim 15 \times 0,32 = 4,8 \text{ MeV}$$

soit le double, 9,6 MeV pour une seule espèce de nucléon.

c) Dans le domaine des paramètres où l'on a pu obtenir des résultats valables  $0 < \alpha_2 < 0,45$ ,  $0 < \alpha_4 < 0,15$ , nous n'atteignons que rarement la remontée au-delà du deuxième minimum (sans compter le minimum à déformation nulle dans le cas des couches

TABLEAU VII

VALEURS APPROXIMATIVES DES PARAMÈTRES AUX MINIMA DE  $\delta$

N	$\alpha_4$			
	$\alpha_4 = 0$	$\alpha_4 = 0,05$	$\alpha_4 = 0,10$	$\alpha_4 = 0,15$
45	0,33	0	0,33	0,28
46	0	0	0,36	0
50	0,10	0,12	0,12	0,12
54	0,15	0,16	0,15	0,15
57	0,18	0,16	0,20	0,20
60	0,15	0,15	0,26	0,06
63		0,27	0,04	0,04
66	0	0,26	0	0
69	0	0,27	0	0

complètes). C'est justement la région intéressante correspondant au seuil de fission, pour laquelle il serait nécessaire de perfectionner la méthode numérique utilisée, si l'on veut garder une précision comparable à celle obtenue dans le domaine déjà exploré.

Le tableau VII rassemble les valeurs des élongations observées aux maxima, entre  $N = 45$  et  $N = 69$ .

On constate en particulier que la valeur d'équilibre de  $\alpha_2$  augmente avec  $\alpha_4$  et que la hauteur de la barrière à franchir pour passer du premier minimum au second diminue avec  $\alpha_4$  (exemple *fig. 11* :  $N = 37$ ,  $N = 57$ ,  $N = 66$ ).

Nous n'avons pas établi de cartes en  $\alpha_2, \alpha_4, \dots$ , pour la quantité  $\delta$ , pour la raison déjà signalée que  $\delta$  n'est

pas l'énergie totale. L'établissement de la carte en  $\alpha_2, \alpha_4$  est indispensable pour confirmer l'existence d'états métastables, qui doivent correspondre à des cuvettes dans la topographie de l'énergie potentielle totale.

d) On vérifie évidemment la remarque de Strutinsky sur la corrélation des minima et maxima avec les zones de faible ou forte densité de niveaux. Par exemple,  $N = 69$  (couche  $3p$  complète : il y a un minimum à  $\alpha_2 = 0$ ), le premier minimum non trivial (avec  $\alpha_4 = 0$ ) intervient pour  $\alpha_2 \sim 0,27$ , avec la proportion suivante d'états pairs et impairs :

$$R = \frac{\text{Niveaux pairs}}{\text{Niveaux impairs}} = \frac{38}{31}$$

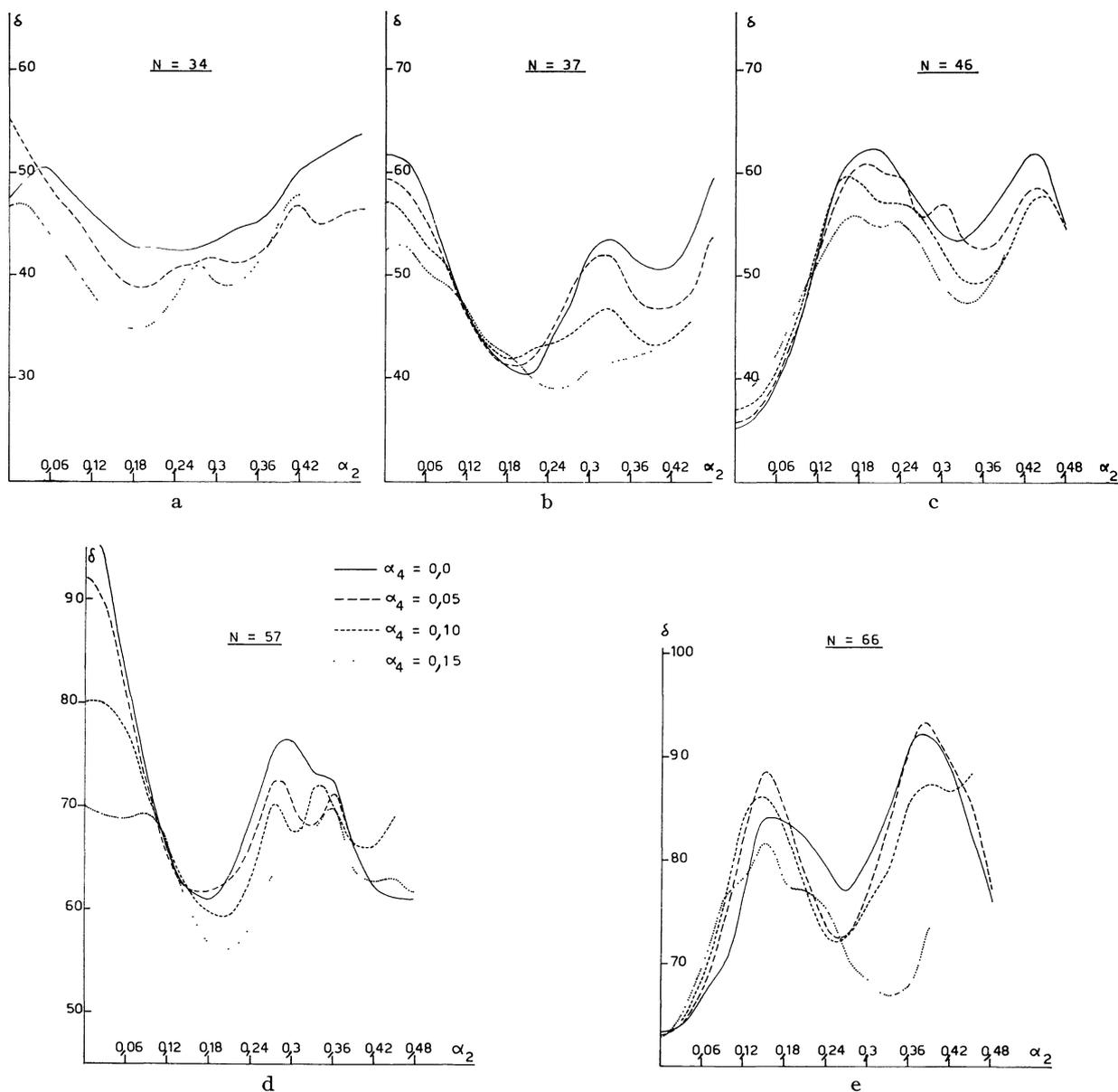


FIG. 11. — (a, b, c, d, e) Variation de  $\delta$  en  $\alpha_2$  et  $\alpha_4$ .

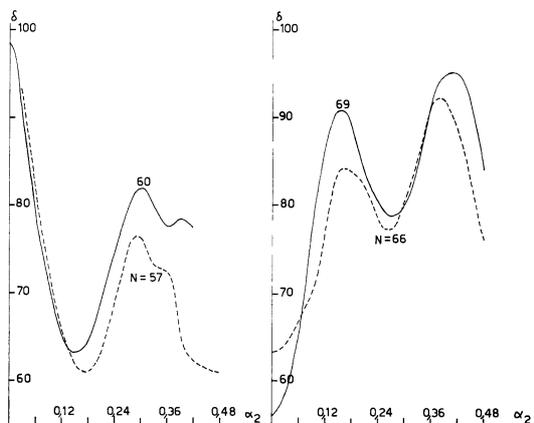
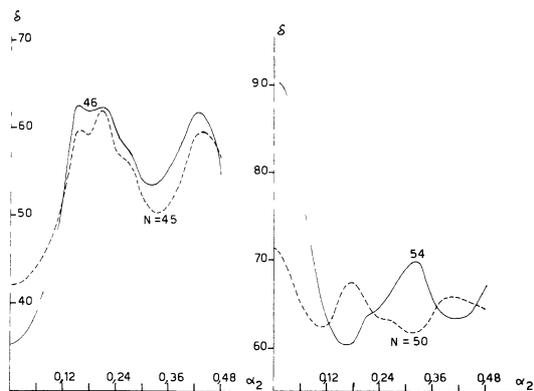


FIG. 12. — Variation de  $\delta$  en  $\alpha_2$  :  $\alpha_4 = 0$ .

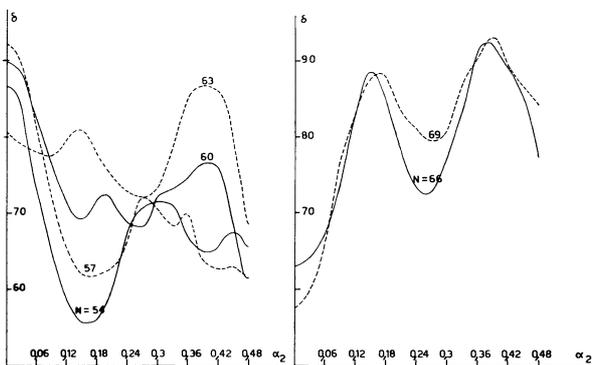
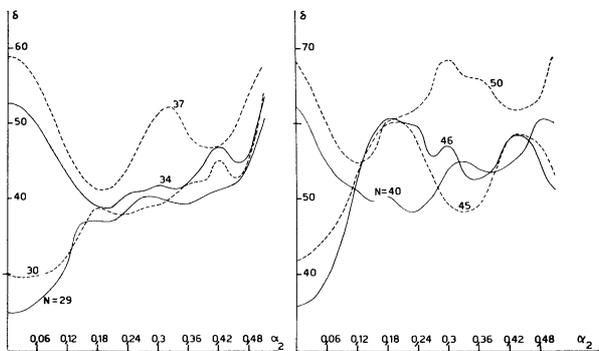


FIG. 13. — Variation de  $\delta$  en  $\alpha_2$  :  $\alpha_4 = 0,05$ .

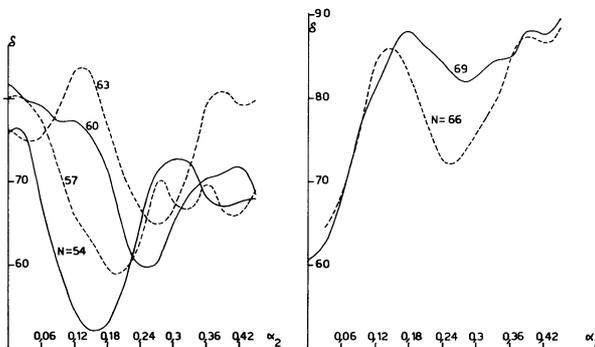
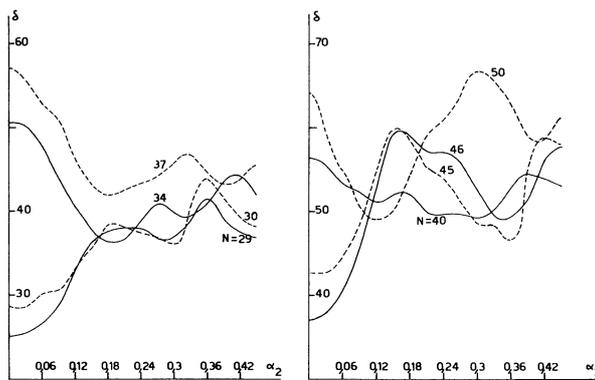


FIG. 14. — Variation de  $\delta$  en  $\alpha_2$  :  $\alpha_4 = 0,10$ .

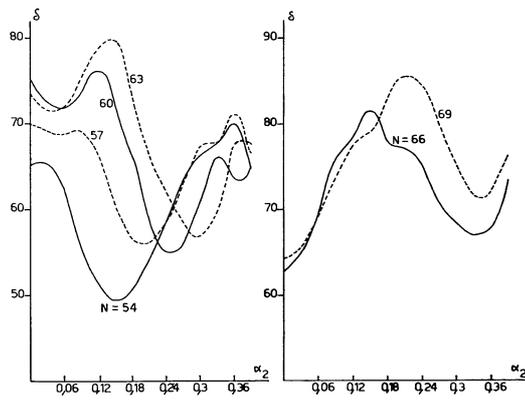
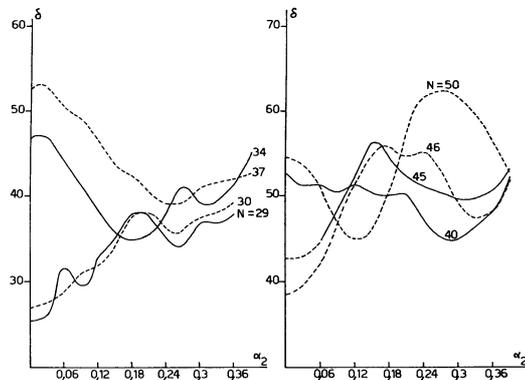


FIG. 15. — Variation de  $\delta$  en  $\alpha_2$  :  $\alpha_4 = 0,15$ .

TABLEAU VIII  
 RAPPORT  $R = N_+/N_-$  ( $N = N_+ + N_-$ ) EN FONCTION DE  $\alpha_2$  ET DE  $N$

$N$	$\alpha_2$							
	0,06	0,12	0,18	0,24	0,30	0,36	0,42	0,48
20	13/7 1,86	12/8 1,50	12/8 1,50	11/9 1,22	11/9 1,22	11/9 1,22	11/9 1,22	10/10 1,00
34	20/14 1,43	21/13 1,62	21/13 1,62	20/14 1,43	19/15 1,27	20/14 1,43	18/16 1,13	18/16 1,13
45	27/18 1,50	27/18 1,50	26/19 1,37	24/21 1,14	26/19 1,37	26/19 1,37	26/19 1,37	26/19 1,37
46	28/18 1,55	28/18 1,55	26/20 1,30	25/21 1,19	26/20 1,30	26/20 1,30	27/19 1,42	26/20 1,30
54	33/21 1,58	33/21 1,58	33/21 1,58	31/23 1,48	31/23 1,48	30/24 1,25	30/24 1,25	30/24 1,25
57	33/24 1,38	33/24 1,38	34/23 1,48	34/23 1,48	33/24 1,38	31/26 1,19	31/26 1,19	32/25 1,28
66	38/28 1,36	38/28 1,36	37/29 1,28	38/28 1,36	38/28 1,36	38/28 1,36	38/28 1,36	36/30 1,20
69	41/28 1,46	40/29 1,38	38/31 1,22	38/31 1,22	39/30 1,30	40/29 1,38	39/30 1,30	38/31 1,22

On observe dans le spectre pair une lacune à 38 particules et dans le spectre impair une lacune à 33 particules pour cette déformation.

Le minimum suivant se situe pour  $\alpha_2 \gtrsim 0,48$  ( $\alpha_4 = 0$ ),  $R = 38/31$ . On observe une lacune dans les parités négatives à 29 particules.

Le second maximum, pour  $\alpha_2 \sim 0,39$ , correspond à la région de haute densité en niveaux pairs entre 31 et 41 particules (*fig. 5*).

e) Enfin, on a noté sur quelques-unes des courbes (*fig. 10*,  $\alpha_4 = 0$ ) la variation du rapport  $R = N_+/N_-$  en fonction de l'élongation  $\alpha_2$ . Ce rapport fluctue entre 1,20 et 1,57, plus ou moins selon les valeurs de  $N$  avec une tendance à décroître lorsque l'élongation augmente.

Par exemple :

$N = 66$ . —  $R$  est presque constant et égal à 1,36 jusqu'à  $\alpha_2 = 0,40$  ( $\beta \sim 0,60$ ), puis descend à 1,20 pour  $\alpha_2 = 0,48$ .

$N = 54$ . —  $R = 1,57$  jusqu'au premier minimum inclus, puis  $R = 1,25$  au-delà du premier minimum.

Ce rapport  $R$  a été considéré par I. Kelson [13] et J. J. Griffin [14] dans des travaux récents sur la fission

asymétrique. La valeur de ce rapport, dans l'état fondamental d'un noyau fissile selon Kelson, ou bien au seuil de fission selon Griffin, serait une limite supérieure du rapport d'asymétrie. Le tableau VIII donne quelques valeurs de ce rapport  $N_+/N_-$  calculé dans le modèle de la boîte, pour diverses valeurs de  $N$  et de  $\alpha_2$ . Il est difficile d'en extraire un comportement général, sinon une certaine décroissance avec l'élongation. Il y a une dispersion due aux effets de couche qui rend sans doute assez grossière une estimation basée sur la formule asymptotique de Wheeler pour  $N_+$  et  $N_-$ .

Par exemple, pour  $N = 66$ , on trouve une valeur presque constante de  $R$  égale à 1,36 environ dans l'intervalle  $0 < \alpha_2 < 0,40$ , qui tombe ensuite à 1,20 au-delà.

**VIII. Conclusion.** — Les résultats obtenus concernant les niveaux du puits de potentiel fini ou infini sont une contribution au problème de l'extrapolation des niveaux de particule au domaine des grandes déformations. Le caractère schématique et rigide du modèle interdit de s'attacher à la position détaillée des niveaux, mais permet sans doute de constater leur comportement d'ensemble avec la déformation (croi-

sement, échange, courbure, etc.). Nous n'avons pas entrepris de faire une comparaison de ce comportement avec par exemple celui des niveaux de Nilsson, ou même simplement de comparer entre eux les spectres du puits fini et infini : tout ceci reste à faire. Enfin, pour raffiner le modèle, on pourrait aisément introduire l'interaction spin-orbite exacte induite par la surface limite abrupte :

$$H_{s,o} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \wedge \nabla V = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \wedge \mathbf{n} \delta_s(\mathbf{r})$$

( $\mathbf{n}$ , normale à la surface;  $\delta_s(\mathbf{r})$ , fonction  $\delta$  de la surface), ce qui doublerait la dimension des déterminants à annuler.

Avant de poursuivre une telle étude, on aimerait améliorer la précision du calcul des fonctions de Bessel, et surtout avoir un meilleur test de comparaison que

celui de la sphère excentrée : il faudrait calculer les niveaux de la boîte ellipsoïdale, soit par résolution numérique de l'équation différentielle qui définit les fonctions sphéroïdales, soit en utilisant les tables de Stratton [17] qui permettent de les obtenir. Nous ne savons pas non plus comment cette méthode déterminantale se compare aux méthodes de diagonalisation [15, 16] de la matrice d'énergie  $E_n \delta_{nm} + V_{nm}$  dans une base discrète, à la fois en temps et en précision.

**Remerciements.** — Nous remercions MM. R. Joly, C. Signarbieux, Ph. Quentin, H. Nifenecker et D. Paya qui nous ont intéressés aux problèmes de la fission et auprès desquels une partie de ce travail a été effectuée, ainsi que M. Matuszek pour son aide dans l'exécution des figures.

#### BIBLIOGRAPHIE

- [1] HILL (D. L.) et WHEELER (J. A.), *Phys. Rev.*, 1953, **89**, 1102.
- [2] WILETS (L.), *Theories of Nuclear Fission*, Oxford, 1964.
- [3] SZYMANSKI (Z.), *Equilibrium deformations of the ground and excited states in nuclei*, Dubna Symposium, 1968, IAEA, Vienne. Voir la liste des références.
- [4] MOSZKOWSKI (S. A.), *Handbuch der Physik*, 1957, **39**, 501.
- [5] MOTTELSON (B. R.) et NILSSON (S. G.), *Dan. Vid. Selsk. Mat. Fys. Skr.*, 1959, **1**, 8.
- [6] NILSSON (S. G.), *Dan. Vid. Selsk. Mat. Fys. Medd.*, 1955, **29**, 16.
- [7] STRUTINSKY (V. M.), *Nucl. Phys.*, 1967, A **95**, 420 ; *Nucl. Phys.*, 1968, A **122**, 1-33.
- [8] SZEGO, *Orthogonal Polynomials*, *Am. Phys. Soc.*, 1939, Théorème 3.4.1, p. 47.
- [9] KRONROD (A. S.), *Nodes and weights of quadrature formulas*, New York, 1965.
- [10] COHEN (S.) et SWIATECKI (W. J.), *Annals of Physics*, 1963, **22**, 406.
- [11] FEENBERG (E.), *Shell theory of the nucleus*, Princeton University Press, 1955.
- [12] MYERS (W. D.) et SWIATECKI (W. J.), *Nuclear masses and deformations*, UCRL 11980, et *Nuclear Physics*, 1966, **81**, 1.
- [13] KELSON (I.), *Phys. Rev. Letters*, 1968, **20**, 867.
- [14] GRIFFIN (J. J.), *Reflection symmetry and fission mass ratios*, Technical Report n° 810, avril 1968, Maryland (U.S.A.).
- [15] MOSZKOWSKI (S. A.), *Particles states in spheroidal nuclei*, *Phys. Rev.*, 1955, **99**, 803.
- [16] LEMMER (R. H.), *Single particle motion in a deformed non local potential well*, *Phys. Rev.*, 1960, **117**, 1551 ; *Phys. Rev.*, 1960, **119**, 1043.
- [17] STRATTON (J. A.), *Spheroidal wave functions*, M.I.T. Wiley, New York.