



HAL
open science

EFFETS DE COUCHE DANS LA FISSION

Roger Balian

► **To cite this version:**

Roger Balian. EFFETS DE COUCHE DANS LA FISSION. Journal de Physique Colloques, 1972, 33 (C5), pp.C5-17-C5-32. 10.1051/jphyscol:1972503 . jpa-00215105

HAL Id: jpa-00215105

<https://hal.science/jpa-00215105>

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.

EFFETS DE COUCHE DANS LA FISSION

Roger BALIAN

Service de Physique Théorique - CEN-Saclay

Résumé - Après un rapide examen des expériences qui ne peuvent s'expliquer dans le modèle de la goutte liquide, on passe en revue les calculs théoriques de barrières de fission, qui relient ces observations à des effets de couche dans les noyaux très déformés en cours de fission. Afin d'expliquer la généralité des effets de couche, on expose ensuite les grandes lignes d'une nouvelle méthode permettant de les calculer directement sans avoir à résoudre l'équation d'onde de particules indépendantes à 3 dimensions : les corrections de couche à la densité de niveaux sont analysées en une série de termes oscillants, dont chacun est associé à une trajectoire classique fermée (éventuellement complexe). Un test numérique montre l'efficacité de cette méthode, qui s'applique même si le spectre contient un continuum.

Abstract - After a brief review of experiments which cannot be explained by the liquid drop model, theoretical calculations of fission barriers are described, which relate these experiments to shell effects in the highly deformed fissioning nuclei. In order to explain the generality of shell effects, and to calculate them directly, we present the main ideas of a new method, which avoids resolving the 3 dimensional independent-particle wave equation : shell corrections to the level density are analyzed as a sequence of oscillating terms, each associated with a (possibly complex) closed classical path. A numerical test shows the efficiency of this method, which applies even if the spectrum contains a continuum.

Quoique la découverte des effets de couche dans la fission soit récente, leur étude a suscité un si grand nombre de travaux qu'il est hors de question de les passer en revue dans le cadre de cet exposé. Nous nous bornerons à introduire les idées principales, dont beaucoup présentent d'ailleurs l'intérêt de pouvoir s'appliquer dans d'autres domaines, et donnerons quelques exemples à titre d'illustration. Pour plus de détails et pour une bibliographie complète, on se reportera aux articles théoriques classiques^[1,2,3] et aux mises au point les plus récentes^[4,5,6,7].

Nous rappellerons d'abord des faits expérimentaux qui ne peuvent se comprendre dans le cadre du modèle de la goutte liquide, et en donnerons l'interprétation simple reposant sur l'hypothèse d'une double bosse dans la barrière de fission. Nous donnerons ensuite une idée des calculs théoriques de barrières de fission, d'où il ressort que

les effets de couche, bien connus en physique atomique et dans l'étude des structures nucléaires, se retrouvent aussi en fission. Nous terminerons par l'exposé d'une théorie développée en collaboration avec C. Bloch au cours des deux dernières années^[8], qui explique la généralité des effets de couche en les reliant à des idées semi-classiques.

I - OBSERVATIONS EXPERIMENTALES D'EFFETS DE COUCHE

L'ensemble des phénomènes de fission s'expliquait de façon satisfaisante il y a quelques années dans le modèle de la goutte liquide. Cependant, certains des faits expérimentaux passés en revue ailleurs^[4,6,9,10] n'entrent pas dans le cadre de cette théorie :

1 - Distribution en masses des produits de fission.

Pour les noyaux lourds à partir de Ra, la fission à basse énergie se produit préférentiellement de façon très asymétrique (Fig.1). On remarque que la distribution en masses des fragments de fission présente un maximum lorsque le fragment lourd est proche des couches fermées $Z = 50$, $N = 82$, et dépend peu du noyau initial dans cette région.

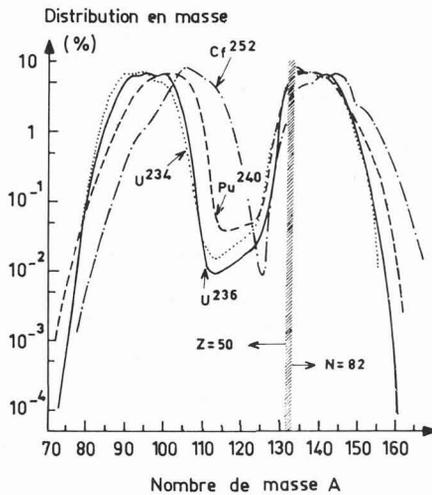


Figure 1 - Distribution en masses des produits de fission [11].

Le modèle de la goutte liquide prédit au contraire qu'un noyau se fissionne de préférence en donnant naissance à deux fragments de tailles voisines. La courbe expérimentale suggère que l'asymétrie entre les deux fragments est liée à un effet de couche : le noyau doit "voir", dès le premier stade de sa fission où il commence à s'étirer, la structure de couche du fragment sphérique lourd auquel il va donner naissance, puisque la production de couches complètes semble favorisée.

2 - Isomères de fission

On connaît maintenant une trentaine d'isomères de noyaux lourds, dont l'énergie d'excitation est de l'ordre de 3 MeV. Leur temps de vie varie de quelques ns. à 10 ms., et ils se desexcitent non vers le fondamental, mais par fission. Leur probabilité de fission est très supérieure à celle de

l'état fondamental.

3 - Résonances intermédiaires

Les réactions (n, f) permettent d'effectuer des mesures avec une très bonne résolution en énergie, et donc d'observer les résonances individuelles du noyau composé formé dans la première étape. Ces résonances sont très faibles, car la probabilité de fission est très petite lorsque la réaction a lieu avec un noyau non fissile au-dessous du seuil. Mais on constate que leur amplitude présente des maxima très aigus (Fig.2), caractéristiques d'une structure intermédiaire. Les résonances intermédiaires sont environ 100 fois plus espacées que les résonances individuelles. On sait qu'une telle structure s'interprète en général par l'existence de certains états isolés, couplés aux résonances individuelles très serrées (c'est ainsi que les résonances géantes sont associées au couplage d'un état à un nucléon avec les résonances du noyau composé).

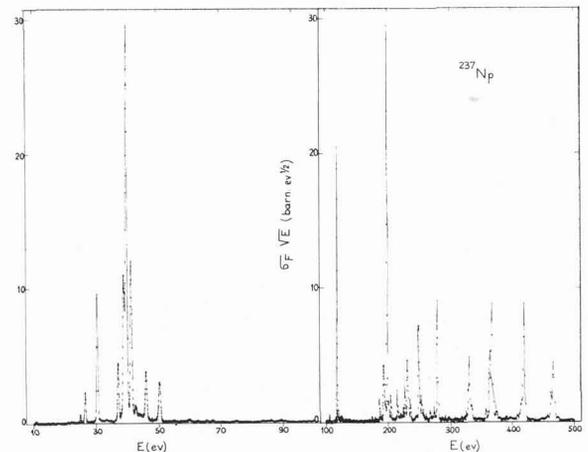


Figure 2 - Structures intermédiaires dans $^{237}\text{Np}(n, f)$. Dans la partie gauche, où la résolution est meilleure, on distingue les résonances individuelles et leur organisation en une résonance intermédiaire. À droite, l'échelle est plus petite, et seules quelques-unes des résonances intermédiaires peuvent être résolues en résonances individuelles [12].

4 - Résonances près du seuil de fission.

Dans certains noyaux, la section efficace de fission présente, un peu au-dessous du seuil, une résonance particulièrement large, qui peut, dans certains cas, être résolue en plusieurs pics (Fig.3).

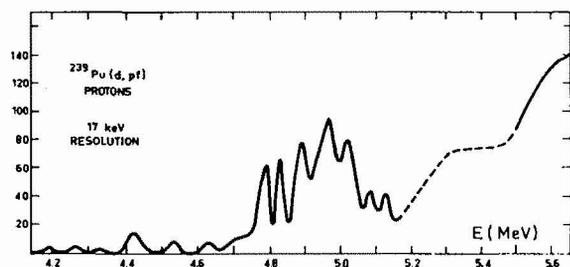


Figure 3 - Résonances près du seuil de fission dans $^{239}\text{Pu}(d, pf)$ [13]. Ces résonances n'apparaissent pas dans $^{239}\text{Pu}(d, p)$.

Il a fallu plusieurs années pour reconnaître que ces divers faits expérimentaux étaient liés à des effets de couche. L'explication qui a été proposée leur est commune : d'après le modèle de la goutte liquide, la barrière de fission présente en fonction de la déformation un maximum (la tension superficielle l'emporte à faible déformation, la répulsion coulombienne à forte déformation). Si on admet que la variation de l'énergie en fonction de la déformation présente en plus des oscillations, il pourra apparaître une double bosse dans la barrière de fission. Cette hypothèse permet de comprendre facilement les faits expérimentaux (Fig.4).

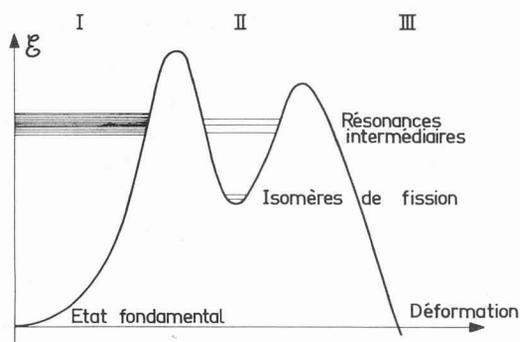


Figure 4 - Barrière de fission à deux bosses.

La barrière de fission se comporte comme un potentiel phénoménologique pour la coordonnée collective associée à la déformation du noyau. Son épaisseur, ainsi que la grande valeur de la variable d'inertie associée à cette déformation, entraînent l'existence d'états quasi-stationnaires du

noyau, localisés respectivement dans les régions I et II, pouvant se fissionner par effet tunnel vers la région III.

Les isomères de fission s'identifient alors aux états les plus bas du type II, ayant une très grande déformation permanente. Ils s'apparentent ainsi aux isomères de forme observés pour les noyaux plus légers : par exemple, dans ^{16}O , l'état 0^+ à 6,05 MeV a aussi une déformation permanente et une fonction d'onde intrinsèque peu excitée. Ici, de plus, la désexcitation de l'isomère se fait par scission, vers la région III, la désexcitation vers la région I avec émission d'un γ étant défavorisée. Enfin, les temps de vie du fondamental et des isomères de fission varient comme l'épaisseur de barrière à traverser.

Les résonances intermédiaires sont associées aux états du type II, dont l'espacement est beaucoup plus grand que celui des états du type I (Fig.4). Les états des deux types sont couplés par effet tunnel, et ce couplage donne lieu à la forme de la Figure 2 pour la section efficace. Cette interprétation est appuyée par le fait que pour tous les noyaux donnant lieu à des structures intermédiaires de fission, sauf Np, on a trouvé également des isomères de fission.

Enfin, les résonances près du seuil du type de la Figure 3 s'expliquent en supposant une double bosse moins marquée (Fig.5).

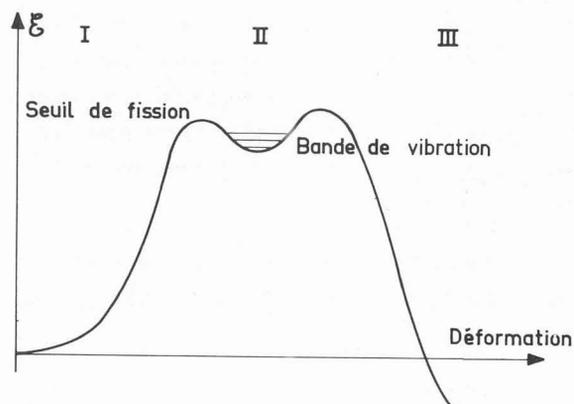


FIG. 5

Figure 5 - Etats de vibration dans la barrière.

Deux cas sont possibles : la résonance près du seuil correspond à l'état fondamental du type II, auquel cas on n'observe ni résonances intermédiaires plus bas, ni isomère de fission ; ou bien cette résonance est associée à un état de vibration du type II (Fig.3), fortement couplé à la fission (ce qui explique la largeur de la résonance) et aux états intrinsèques du type II (ce qui explique sa structure fine).

L'existence d'une double bosse dans la barrière de fission peut ainsi être considérée comme prouvée indirectement^[10]. Des observations plus directes de la forme de la barrière sont souhaitables, telles que mesures de déformation d'isomères de fission, ou mise en évidence de deux seuils associés aux deux maxima de la barrière. Déjà des expériences récentes^[14] ont mis en évidence des transitions entre états de rotation du type II.

II - CALCULS DES BARRIERES DE FISSION

On va passer rapidement en revue les calculs de barrières de fission, et montrer que leur forme en double bosse est reliée à des effets de couche.

1 - Correction de couche dans l'état fondamental.

On sait depuis longtemps que, pour les noyaux sphériques traités dans un modèle de nucléons indépendants, la dégénérescence des états E_n à un proton ou un neutron entraîne l'apparition d'oscillations dans l'énergie \mathcal{E} du fondamental comme fonction de N et Z. En effet, par suite du groupement des niveaux, l'énergie \mathcal{E} est plus basse pour les noyaux à couches complètes que si les niveaux E_n étaient répartis au hasard.

La distribution des niveaux de particules indépendantes est caractérisée par la densité des niveaux

$$\rho(E) = \sum_n \delta(E - E_n) \quad (1)$$

que l'on peut remplacer, pour de gros noyaux dont les niveaux sont assez denses, par une fonction

continue

$$\rho_Y(E) = \sum_n f_Y(E - E_n) \quad (2)$$

en la lissant. La densité de niveaux lissée $\rho_Y(E)$ présente, si la fonction de lissage f_Y a une largeur de l'ordre de la distance moyenne entre niveaux, des minima lorsque E est entre deux couches. L'énergie du noyau dans le modèle de particules indépendantes est

$$\mathcal{E}_{PI} = \sum_{E_n < E_F} E_n = \int_0^{E_F} \rho(E) E dE \quad (3)$$

où l'énergie de Fermi est liée au nombre N de protons ou de neutrons par

$$N = \int_0^{E_F} \rho(E) dE \quad (4)$$

L'existence d'effets de couche signifie donc que l'énergie \mathcal{E}_{PI} du noyau présente des minima et maxima correspondant aux minima et maxima de la densité de niveaux à la surface de Fermi $\rho_Y(E_F)$.

Partant de cette idée, et supposant que les effets de couche disparaissent progressivement quand le noyau se déforme, Myers et Swiatecki ont calculé leur influence sur la barrière de fission (Fig.6). Le sommet de la barrière, donné par une formule de masse basée sur le modèle de la goutte

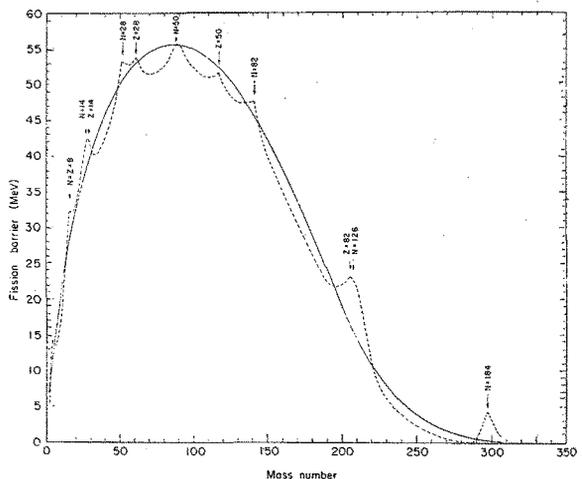


Figure 6 - Hauteur de la barrière de fission en fonction du nombre de masse [1]. La courbe en pointillé inclut la correction de couche de l'état fondamental.

liquide, varie lentement avec Z , et n'est pas affecté par les effets de couche, car il correspond à une grande déformation. Par contre, la correction de couche intervient dans l'état fondamental, peu ou pas déformé, de sorte que la barrière de fission présente, en fonction du nombre de masse, des oscillations avec maxima dans les régions des couches complètes.

La possibilité d'existence de noyaux superlourds, stables par rapport à la fission, résulte ainsi d'effets de couche dans les noyaux peu déformés.

2 - Le problème de la double bosse.

Ce genre d'effet ne peut cependant expliquer une double bosse de la barrière de fission. Pour cela, il faut que des effets de couche importants subsistent, contrairement aux idées de Myers et Swiatecki, pour de grandes déformations des noyaux. Si c'est le cas, la densité de niveaux $\rho(E)$ présentera des oscillations, non seulement en fonction de E , mais aussi en fonction de la déformation, et il en sera de même pour \mathcal{E}_{PI} . Ces oscillations de \mathcal{E}_{PI} en fonction de la déformation, s'ajoutant à la barrière simple prédite par le modèle de la goutte liquide, pourront alors donner lieu à plusieurs bosses.

Le schéma de la Figure 7 permet de concevoir la persistance d'effets de couche pour de grandes déformations. De grandes dégénérescences des énergies E_n , dues à l'invariance par rotation, existent pour les noyaux sphériques. La densité de niveaux a tendance à devenir plus uniforme quand le noyau se déforme. Mais il se peut qu'il réapparaisse des quasi-dégénérescences, et donc des oscillations importantes dans la densité de niveaux $\rho(E)$, dépendant de la déformation. De nombreux calculs numériques, que nous allons maintenant résumer, montrent que c'est justement ce qui se passe.

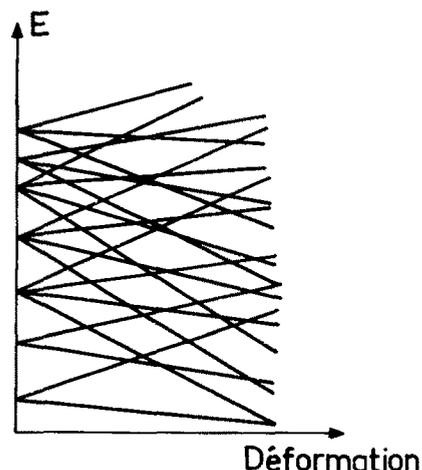


Figure 7 - Possibilité d'effets de couche pour de grandes déformations.

3 - Le modèle théorique.

Ces calculs ont été effectués dans le modèle de Strutinsky^[2], déjà décrit dans cette conférence^[9], et que nous rappelons ici. En l'absence d'une théorie microscopique praticable, on doit se borner à une approche semi-phénoménologique relativement grossière, alliant le modèle des couches à celui de la goutte liquide. Comme on ne s'intéresse qu'au premier stade de la fission, laissant de côté les stades de scission et de désexcitation, on suppose que le noyau se déforme de façon adiabatique, assez lentement pour que la dynamique soit négligée.

On traite alors à chaque instant le noyau déformé comme un système de nucléons indépendants dans un puits de potentiel. En principe, ce puits devrait être déterminé de façon self-consistante ; en pratique, on se contente de lui imposer une forme a priori^[15]. Par résolution numérique de l'équation de Schroedinger

$$H \psi_n(r) = E_n \psi_n(r) \quad , \quad (5)$$

où H est l'hamiltonien à un corps

$$H \equiv \frac{p^2}{2m} + V(r) \quad , \quad (6)$$

on détermine les niveaux d'énergie E_n de nucléons indépendants dans le puits de potentiel déformé

$V(r)$. On en déduit (Eqs.(3),(4)) l'énergie \mathcal{E}_{PI} du noyau comme fonction de Z , N et de la déformation.

De même que pour les noyaux sphériques, le comportement moyen de \mathcal{E}_{PI} ainsi obtenu n'est pas satisfaisant : il dépend beaucoup des paramètres ajustables du puits, car celui-ci n'est pas self-consistant. De plus, il faut inclure la répulsion coulombienne ; mais celle-ci est du même ordre que l'attraction nucléaire, de sorte que la barrière de fission, différence de deux grands effets, semble difficilement calculable par une théorie microscopique. Cependant, on dispose du modèle phénoménologique de la goutte liquide, suffisant pour décrire les gros noyaux en moyenne, mais ne tenant pas compte de propriétés spécifiques telles qu'effets de couche (ou appariement).

On est ainsi amené à remplacer le comportement moyen $\tilde{\mathcal{E}}$ de \mathcal{E}_{PI} par l'énergie \mathcal{E}_{GL} dans le modèle de la goutte liquide. Afin d'extraire de \mathcal{E}_{PI} ce comportement moyen, Strutinsky a proposé la prescription suivante. En lissant la densité de niveaux selon (2), mais avec une largeur γ grande non seulement devant la distance entre niveaux, mais aussi devant celle entre couches, les oscillations de $\rho_Y(E)$ associées aux effets de couche disparaissent, et $\rho_Y(E)$ peut tendre vers une fonction $\tilde{\rho}(E)$ variant lentement. On sépare alors $\tilde{\rho}(E)$ en :

$$\rho(E) = \tilde{\rho}(E) + \delta\rho(E) \quad , \quad (7)$$

et par suite \mathcal{E}_{PI} (donné par (3)) en :

$$\mathcal{E}_{PI} = \tilde{\mathcal{E}} + \delta\mathcal{E} \quad . \quad (8)$$

Remplaçant $\tilde{\mathcal{E}}$ par \mathcal{E}_{GL} , on calcule en définitive l'énergie du noyau selon

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_{GL} + \delta\mathcal{E} \quad , \quad (9)$$

dont le premier terme est donné par une formule de masse phénoménologique, et le second par les effets de couche contenus dans la densité de niveaux de particules indépendantes.

On obtient ainsi l'énergie \mathcal{E} en fonction de la déformation. Le terme \mathcal{E}_{GL} donne le comportement général de la barrière de fission ; les oscillations éventuelles de $\delta\mathcal{E}$ peuvent donner lieu à une double bosse. Il reste enfin, pour calculer des

sections efficaces, à étudier la traversée de la barrière. Pour cela, on calcule le paramètre d'inertie correspondant à la déformation, puis on évalue le coefficient de transmission par exemple par une méthode BKW^[3,4,5].

4 - Résultats.

De nombreux calculs de barrières de fission ont été effectués suivant la méthode ci-dessus (voir pour une revue les Réfs.[4] et [7]). Nous examinons les rôles respectifs des trois paramètres essentiels qui servent à caractériser la déformation du noyau : allongement, striction et asymétrie.

a) Allongement. La diagonalisation d'hamiltoniens à un corps, décrivant des puits de potentiel de plus en plus allongés, conduit à des spectres d'énergie E_n en fonction de la déformation (Fig.8) qui rappellent le schéma de la Figure 7.

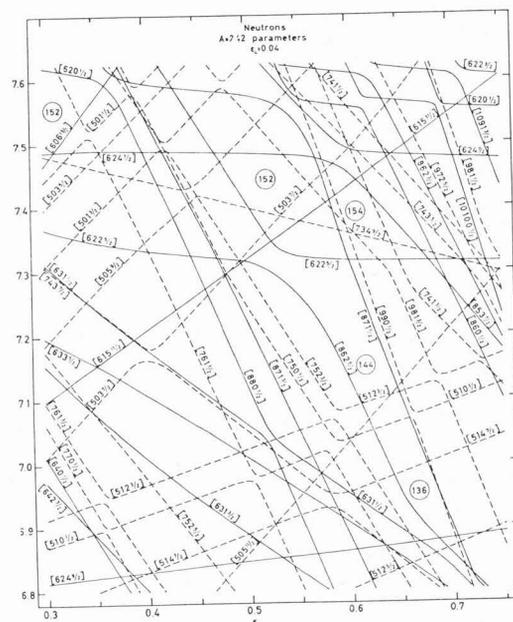


Figure 8 - Niveaux à un corps en fonction de la déformation [3].

Il est visible qu'à certains endroits les niveaux se groupent, laissant entre ces couches des régions où le nombre de niveaux est très faible.

Le même résultat est apparent sur la Figure 9, qui représente, sous forme de carte, la correction de couche $\delta\rho(E_F)$ à la densité de niveaux,

en fonction de l'allongement de noyau (en ordonnées) et du nombre de protons ou neutrons (lié à l'énergie E_F par (4)).

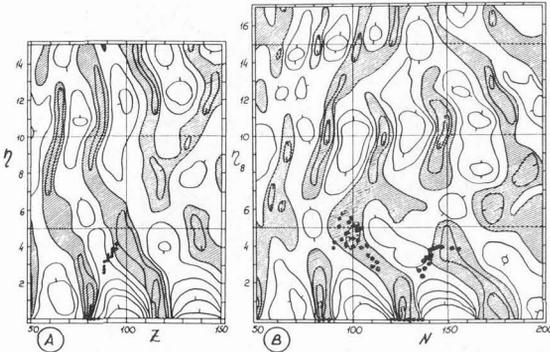


Figure 9 - Carte des corrections de couche $\delta\rho$ dans la densité de niveaux de protons et de neutrons en fonction de la déformation η [2] (les niveaux sont plus espacés dans les régions hachurées où $\delta\rho < 0$).

Pour de faibles déformations à partir des noyaux sphériques, l'amplitude de $\delta\rho$ diminue. Les couches, correspondant aux maxima de $\delta\rho$, se déplacent. L'état fondamental d'un noyau doit avoir une déformation telle que son énergie \mathcal{E} soit minimum, c'est-à-dire que ses couches soient complètes, donc que $\delta\rho$ soit minimum. C'est ce qu'on vérifie sur la Figure 9, où les noyaux dans leur fondamental sont représentés par des points.

Pour les plus grandes déformations apparaissant au cours de la fission (haut de la figure) il est remarquable que les effets de couche ne tendent pas à disparaître, et que $\delta\rho$ reste important. La figure confirme enfin l'existence, pour un noyau donné, d'oscillations de $\delta\rho$ (et donc de \mathcal{E}) en fonction de la déformation.

b) **Striction.** Même dans la première étape de la fission, on doit tenir compte, dans la déformation du noyau, d'une striction de celui-ci, première étape vers la scission en deux parties. Pour cela, on peut par exemple rajouter à la déformation dipolaire représentant un allongement une composante quadrupolaire ; de façon plus élaborée, on peut introduire des formes dont le rétrécissement est plus net (Fig.10).

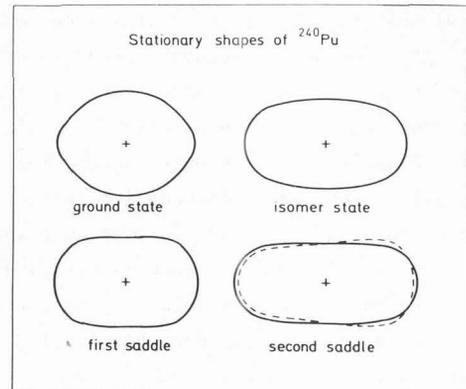


Figure 10 - Formes du noyau correspondant aux Figures 11 et 13 [4].

La barrière de fission dépendant de deux paramètres de déformation (allongement et striction), il est commode de la représenter par une carte (Fig.11).

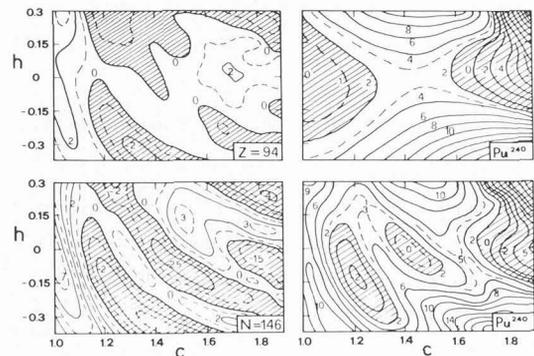


Figure 11 - Carte de la barrière de fission de ^{240}Pu en fonction des paramètres d'élongation C et de striction h (les zones hachurées représentent les vallées) [4].

Les corrections de couche $\delta\mathcal{E}$ (représentées à gauche pour les états de protons et de neutrons) présentent des oscillations régulières se traduisant par un relief ondulé. La barrière \mathcal{E}_{GL} (à droite en haut) a un col, entre le fondamental (sphérique) et la vallée menant à la scission. Pour la barrière totale \mathcal{E} (à droite en bas), le fondamental est déformé ; un second minimum s'est creusé, dont le fond représente l'isomère de fission ; le chemin du fondamental à la vallée de scission passe par deux cols.

Une telle barrière à deux dimensions a en général des propriétés comparables à celles des Figures 4 et 5. On peut cependant concevoir des barrières à deux dimensions donnant lieu à des effets particuliers. Ainsi, la barrière à 3 cols de la Figure 12 équivaut, en ce qui concerne les isomères de fission et les résonances intermédiaires, à une barrière à double bosse, le long du trajet passant par les cols B et C ; mais il existe un raccourci ne franchissant qu'un col A, de sorte que la fission spontanée est beaucoup plus facile que s'il avait fallu traverser la double bosse.

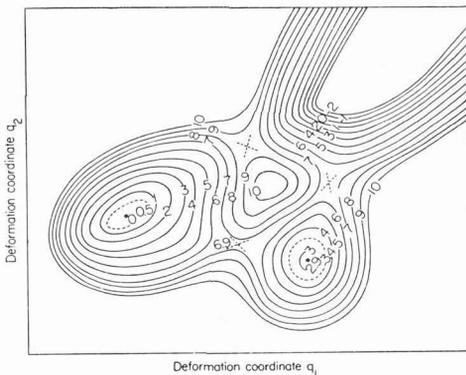


Figure 12 - Barrière de fission hypothétique de ^{242}Am [16].

Cette barrière a été imaginée [16] pour expliquer la fission de ^{242}Am , qui semble présenter une telle anomalie ; mais la situation expérimentale n'est pas encore claire.

c) Asymétrie. Afin d'expliquer la distribution asymétrique des produits de fission, il faut introduire un troisième paramètre pour décrire la déformation du noyau, caractérisant son asymétrie. On constate alors (Fig.13) que la barrière de fission s'abaisse considérablement dans la région du second col lorsqu'on admet des valeurs non nulles du paramètre d'asymétrie (au contraire de la barrière \mathcal{E}_{GL} sans effet de couche). C'est donc à ce stade de la fission que se déterminent les valeurs relatives des masses des fragments.

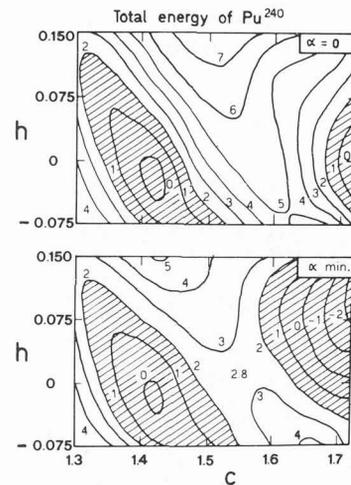


Figure 13 - Asymétrie de la fission : en haut, la barrière de fission symétrique de la Fig.11, près du deuxième col ; en bas, la barrière obtenue en minimisant \mathcal{E} par rapport au paramètre d'asymétrie α [4].

5 - Difficultés

Les calculs de barrières de fission utilisent un modèle relativement grossier, de sorte que malgré leurs succès, ils demeurent plutôt qualitatifs. En particulier, l'évaluation de l'énergie \mathcal{E}_{GL} dans le modèle de la goutte liquide fait intervenir trop de paramètres ajustables et pas toujours bien déterminés.

D'autre part, le choix des formes de noyaux (ellipsoïdes plus ou moins déformés, ovales de Cassini, formes à deux centres,...), aussi bien que celui des variations du potentiel $V(r)$ (puits harmoniques, à bords francs, de Saxon,...), reste arbitraire, et varie d'une école à l'autre [7]. La condition de conservation du volume nucléaire au cours de la déformation présente en particulier une certaine ambiguïté. Un calcul de correction de couche satisfaisant devrait mettre en jeu une détermination self-consistante de $V(r)$, minimisant l'énergie \mathcal{E} . La complexité de la résolution de l'équation de Schroedinger à trois dimensions (5) rend un tel programme difficilement accessible pour l'instant [15].

Enfin, la prescription de Stutinsky pour définir la correction de couche $\delta\mathcal{E}$ pose un problème. En effet, lorsque γ augmente, ρ_γ ne peut tendre vers une constante en γ que si la forme de la fonction f_γ est choisie convenablement. Nous verrons ci-dessous qu'on peut se débarrasser de ce problème du choix de f_γ , en s'affranchissant du lissage pour définir $\tilde{\rho}$.

III - THEORIE SEMI-CLASSIQUE DES EFFETS DE COUCHE

La section précédente a mis en évidence la généralité des effets de couche. Même dans des puits de potentiel très déformés, le calcul montre, contre toute attente, que les niveaux E_n ne sont pas répartis au hasard, mais se groupent en paquets.

Nous allons exposer les grandes lignes d'une théorie [8] qui permet d'expliquer simplement ce phénomène, et de déterminer la distribution des niveaux E_n , avec ses oscillations dues à des quasi-dégénérescences, sans avoir à résoudre l'équation de Schroedinger (5). Celle-ci présente l'inconvénient de faire intervenir les fonctions d'onde ψ_n des états individuels qui contiennent trop d'information. D'autre part, si des niveaux E_n sont très voisins, les fonctions d'onde correspondantes sont instables car presque dégénérées : alors que la densité de niveaux est peu sensible à une petite variation du potentiel, il n'y a pas continuité des $\psi_n(r)$ qui peuvent s'échanger entre eux d'une façon complexe, dépendant du point r .

Afin de traiter le problème de façon plus globale, introduisons la fonction de Green $G(r,r';z)$ associée à l'équation (5)

$$G(r,r';z) \equiv \sum_n \psi_n(r) \frac{1}{E_n - z} \psi_n^*(r') \quad (10)$$

qui est solution de l'équation inhomogène

$$(H-z)G \equiv \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_r + V(r) - z\right) G(r,r';z) = \delta^3(r-r') \quad (11)$$

La densité de niveaux $\rho(E)$ (Eq. (1)) s'en déduit selon :

$$\rho(E) = \frac{1}{\pi} \int d^3r \operatorname{Im} G(r,r';z=E+i0) \quad (12)$$

De même, la densité de niveaux lissée $\rho_\gamma(E)$ (Eq. (2)), s'exprime directement en fonction de G . Par exemple pour un lissage avec une courbe f_γ de Breit et Wigner, on a :

$$\rho_\gamma(E) = \frac{1}{\pi} \int d^3r \operatorname{Im} G(r,r';z=E+i\gamma) \quad (13)$$

Pour déterminer la densité de niveaux lissée avec une largeur γ , il suffit donc de connaître la fonction de Green à une distance γ de l'axe réel.

1 - Comportement moyen de la densité de niveaux

La fonction de Green décrit la propagation de r' vers r d'une particule, et la partie imaginaire de z joue dans (11) le rôle d'un amortissement. Pour γ assez grand, la propagation ne peut donc se produire que sur des distances $r-r'$ courtes. Dans ces conditions, on peut négliger la variation de V entre r et r' et il existe une trajectoire classique directe allant de r' à r , correspondant au minimum de l'intégrale d'action

$$S = \min \int_{r'}^r \sqrt{2m[z - V(r)]} ds \quad (14)$$

Cette action classique satisfait l'équation de Hamilton Jacobi (complexe)

$$(\nabla S)^2 + V(r) - z = 0 \quad (15)$$

et s'annule pour $r=r'$. L'approximation BKW correspondante pour la fonction de Green s'écrit

$$G_0 = A e^{iS/\hbar} \quad (16)$$

où A , solution de l'équation

$$\operatorname{div}(A^2 \nabla S) = 0 \quad (17)$$

s'exprime explicitement en fonction de S , par exemple sous la forme

$$\frac{\partial S}{\partial z} \frac{\partial S}{\partial z'} A^2 = - \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2 \left[\frac{\partial^2 S}{\partial x \partial x'} \frac{\partial^2 S}{\partial y \partial y'} - \frac{\partial^2 S}{\partial x \partial y'} \frac{\partial^2 S}{\partial y \partial x'} \right] \quad (18)$$

Lorsque $r \rightarrow r'$

$$G_0 \sim \frac{m}{2\pi\hbar^2 |r-r'|} e^{i\sqrt{2m(z-V(r))} |r-r'|/\hbar} \quad (19)$$

de sorte que l'approximation BKW pour G conduit, d'après (12), à l'approximation de Thomas Fermi

$$\rho(E) \simeq \frac{m^{3/2}}{\pi^2 \sqrt{2} \hbar^3} \int \sqrt{E - V(r)} d^3r \quad (20)$$

pour la densité de niveaux.

Partant de G_0 comme première approximation, on va bâtir une méthode de calcul de G par itération. On note que (11) équivaut à l'équation intégrale

$$G(r, r') = G_0(r, r') + \int G(r, r_1) \Gamma(r_1, r') d^3 r_1, \quad (21)$$

dont le noyau

$$\Gamma(r, r') \equiv \delta^3(r-r') - (H-z)G_0(r, r') \quad (22)$$

s'écrit en utilisant (15) (16) (17)

$$\Gamma(r, r') = \frac{\hbar^2}{2m} \Delta A \cdot e^{iS/\hbar} \quad (23)$$

On calculera G par itération de l'équation (21), ce qui donne

$$G(r, r') = G_0(r, r') + \int G_0(r, r_1) \Gamma(r_1, r') + \int G_0(r, r_2) \Gamma(r_2, r_1) \Gamma(r_1, r') + \dots, \quad (24)$$

développement qui s'interprète comme une succession de diffusions en les points r_1, r_2, \dots de l'onde BKW G_0 ou Γ (Fig.14).

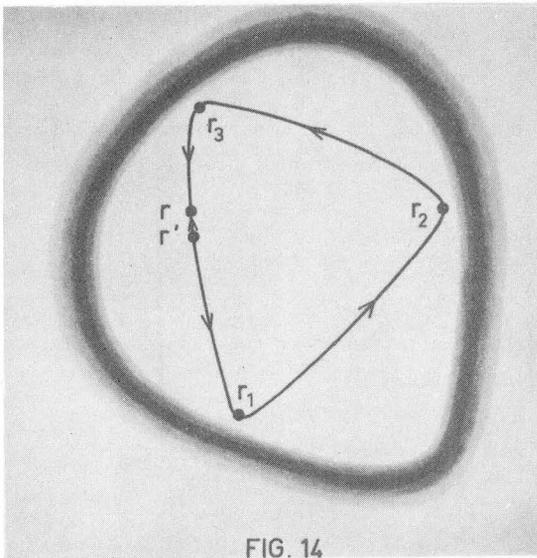


FIG. 14

Figure 14 - Représentation du développement de la fonction de Green $G(r, r')$: le trajet court contribue à $\tilde{\rho}(E)$, le trajet long à $\delta\rho$.

Le noyau $\Gamma(r, r')$ a les propriétés

suivantes :

a) le point r est localisé dans la région où le potentiel $V(r)$ varie rapidement, c'est-à-dire près de la surface du noyau (en effet, $\Delta A = 0$ si V est constant, d'après (19)) ;

b) Γ décroît exponentiellement en $r-r'$ quand γ est assez grand (car la partie imaginaire de S croît avec γ) ;

c) Γ oscille rapidement sur des distances grandes devant la longueur d'onde $\hbar/\sqrt{2m(E-V)}$, quand γ est petit.

Si on s'intéresse à la densité de niveaux $\rho_\gamma(E)$ lissée avec une grande largeur γ , il résulte des propriétés a) et b) que les corrections à (21) ne sont importantes que si r est près de la surface du noyau. On construit ainsi un développement pour $\rho_\gamma(E)$ qui, outre le terme (20) proportionnel au volume nucléaire, comprend des termes successifs proportionnels à l'aire de la surface nucléaire, à sa courbure et à son épaisseur, etc... Ce développement ne fait intervenir que des points r, r', r_1, \dots proches les uns des autres : il est associé à la partie localisée de la fonction de Green. On est ainsi amené à identifier $\tilde{\rho}(E)$ à l'approximation de Thomas Fermi et à ses corrections locales successives.

2 - Corrections de couche à la densité de niveaux

Si maintenant on n'effectue plus le lissage ci-dessus avec une grande largeur γ , la propriété c) subsiste pour un noyau assez grand, de sorte que chaque terme du développement (12) (24) de $\rho(E)$ contient dans son intégrant un facteur oscillant rapidement, de phase

$$\frac{1}{\hbar} [S(r, r_n) + \dots + S(r_2, r_1) + S(r_1, r)] \quad (25)$$

De plus, d'après la propriété a), les points de diffusion successifs r_1, r_2, \dots, r_n doivent se trouver près de la surface nucléaire. Dans l'intégration sur r, r_1, \dots, r_n , la contribution dominante vient des

voisinages des trajets rendant cette phase stationnaire, c'est-à-dire des trajectoires classiques fermées (Fig.14). On effectue alors cette intégration selon la méthode des phases stationnaires, développant (25) autour de la valeur S_j de l'action classique le long de la trajectoire fermée j , ainsi que le reste de l'intégrant. Chaque trajectoire fermée j (de longueur non nulle) donne ainsi à la densité de niveaux $\rho(E)$ une contribution de la forme

$$\text{Im } B_j e^{i S_j / \hbar} \quad (26)$$

Cette contribution est oscillante, car S_j varie de façon continue avec E ; ses maxima correspondent aux valeurs de l'énergie telles que l'action S_j soit un multiple entier de h .

On retrouve ainsi à 3 dimensions une extension de la règle de quantification de Bohr. Cependant, contrairement à ce qui se passe à 1 dimension, ces maxima de $\rho(E)$ ne sont pas associés à des niveaux individuels, mais à des groupes de niveaux en nombre quelconque dépendant de l'amplitude B_j dans (26). De plus, les contributions des diverses trajectoires fermées s'ajoutent de façon cohérente. Les oscillations provenant de la variation de S_j s'interprètent comme dans l'ancienne théorie de Bohr en fonction du mouvement longitudinal sur la trajectoire j , alors que l'amplitude B_j correspond aux trajectoires voisines.

Si le potentiel $V(r)$ est une fonction analytique des coordonnées (ou analytique par morceaux), on peut donner une forme plus précise au résultat précédent, et construire pour $\rho(E)$ (ou pour $\rho_V(E)$) un développement

$$\rho(E) = \text{Im} \sum_j B_j' e^{i S_j / \hbar}, \quad (27)$$

dont chaque terme est associé à une trajectoire classique fermée (B_j' est égal à B_j plus des corrections d'ordre supérieur calculées par développement comme à la fin du paragraphe 1). L'un des termes de (27) correspond aux trajectoires de longueur nulle ($S_j = 0$); ce terme local a été évalué au paragraphe 1 ci-dessus, c'est le seul qui ne disparaît pas par lissage, et c'est lui qu'on identifie à la moyenne $\tilde{\rho}(E)$ de $\rho(E)$. Parmi les autres trajectoires, il faut inclure celles qui se réfléchissent sur les singu-

larités du potentiel, ainsi que les trajectoires fermées complexes, obtenues en résolvant les équations du mouvement classiques pour des valeurs complexes des coordonnées. Le grand nombre des trajectoires possibles reflète la complexité de la distribution $\rho(E)$. Cependant, si on ne s'intéresse pas aux détails, on peut ne conserver dans (27) que les termes sans décroissance exponentielle ($\text{Im } S_j$ petit) et n'oscillant pas trop rapidement ($\text{Re } S_j$ assez petit). Les contributions dominantes à la correction de couche $\delta\rho(E)$ proviennent donc des trajectoires les plus courtes, réelles ou presque réelles.

3 - Vérification : la sphère

Les résultats précédents ont été testés sur un puits de potentiel sphérique à bords francs, dont les niveaux d'énergie E_n , zéros des fonctions de Bessel sphériques, sont faciles à calculer exactement (on choisit des unités telles que $R=1$, $\hbar=1$, $2m=1$).

La validité d'un développement du type (27) pour $\rho(E)$ est mise en évidence par une analyse harmonique de la densité de niveaux. Plus précisément, on effectue une transformation de Fourier non sur E , mais sur \sqrt{E} , car l'action S_j le long d'une trajectoire de longueur L_j est égale à $\sqrt{E} L_j$. La courbe résultante doit présenter des pics en chacune des valeurs $L=L_j$, égales aux longueurs des trajectoires classiques. Celles-ci sont des polygones réguliers (n,p) , à n côtés, et étoilés p fois.

La Figure 15 confirme ces prédictions. On y a porté la transformée de la densité de niveaux et les longueurs de ces polygones, et l'accord est remarquable. La singularité à l'origine est associée à la transformée de $\tilde{\rho}(E)$ (les petites oscillations proviennent du fait qu'on n'a pris en compte que les niveaux E_n dont l'énergie est inférieure à un certain cut-off).

Un autre test est fourni par comparaison directe entre la densité de niveaux exacte $\rho_V(E)$ et l'approximation consistant à ne retenir dans (27) que les termes dominants, associés aux trajectoires les plus courtes (Fig.16). Les courbes fines représentent la densité exacte, les pointillés la moyenne $\tilde{\rho}(E)$. Sur la courbe du haut associée à un lissage

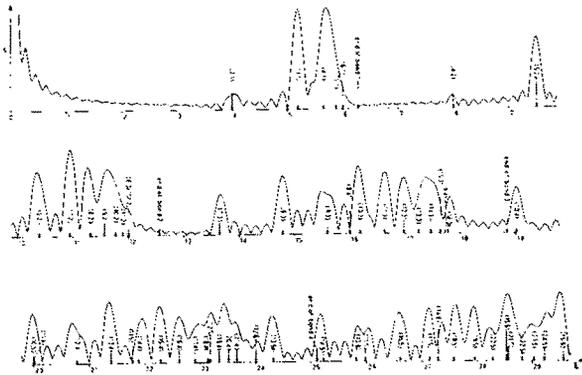


Figure 15 - Analyse harmonique de la densité de niveaux dans une sphère.

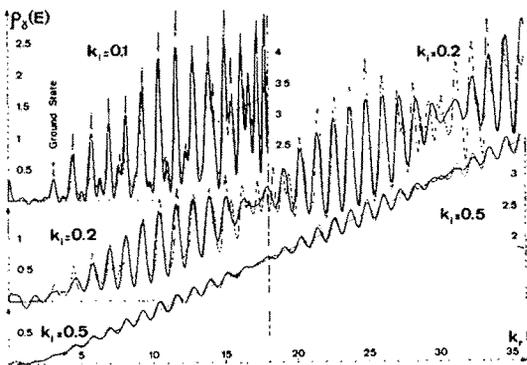


Figure 16 - Densité de niveaux (avec 3 lissages différents) dans une sphère, en fonction de $k_r = \sqrt{E}$.

de largeur faible ($E+i\gamma \equiv (k_r + ik_i)^2$), on a évalué $\delta\rho(E)$ approximativement en conservant dans (27) les termes associés à 12 polygones (courbe épaisse). Sur les courbes du bas, le lissage est de plus en plus large, et on obtient un bon accord en ne conservant dans l'évaluation de $\delta\rho$ que les deux trajectoires dominantes, le triangle et le carré inscrits dans la sphère. Les corrections de couche présentent d'ailleurs dans ce cas la forme caractéristique d'une interférence entre deux sinusoides de fréquences voisines.

Il est à noter que l'analyse semi-classique en termes de trajectoires n'utilise pas la séparation des variables et la décomposition en moments angulaires. Il a suffi de deux trajectoires pour

reproduire les oscillations de $\delta\rho$, dont le calcul exact fait intervenir un grand nombre de valeurs de ℓ . Inversement (courbe du haut), on arrive à rendre compte de l'état fondamental $\ell=0$ en incluant d'assez nombreuses trajectoires.

4 - Conclusions

L'analyse de la densité de niveaux $\rho(E)$ en contributions associées à des trajectoires classiques fermées permet une séparation indépendante du lissage, non ambiguë, entre $\tilde{\rho}(E)$ moyen correspondant aux trajectoires de longueur nulle et corrections de couche $\delta\rho$ correspondant aux autres trajectoires. On peut ainsi se passer de la prescription de Strutinsky pour effectuer la séparation (7)(8), ce qui permet d'esquiver la difficulté signalée à la fin de la section II.

De plus, la méthode de lissage pour séparer les corrections de couche est d'application délicate lorsque le puits de potentiel $V(r)$ est fini, car la densité de niveaux $\rho(E)$ est infinie pour les états du continu. La prescription proposée ici (associer les corrections de couche aux trajectoires classiques finies, réelles ou complexes) ne pose aucun problème dans ce cas. Elle permet d'évaluer directement les corrections de couche $\delta\rho(E)$, sans avoir à effectuer de lissage, et ceci même lorsque l'énergie E est dans le continu.

On notera qu'il n'y a pas correspondance entre trajectoires classiques et états quantiques, mais entre trajectoires classiques et oscillations de la densité de niveaux. D'autre part, il est clair que les groupements des niveaux en paquets résultent non de fluctuations statistiques, mais d'oscillations régulières. Enfin, la relation entre trajectoires classiques et corrections de couche montre que celles-ci ont un caractère non local (contrairement à la densité moyenne), car elles résultent de résonances le long de la trajectoire.

Nous n'avons pas donné ici l'expression de l'amplitude B_j^i des oscillations de $\delta\rho$. Il est cependant intuitif que celle-ci est grande s'il y a beaucoup de trajectoires fermées correspondant à la même valeur de l'intégrale d'action. Par exemple,

pour la sphère (Fig.17a), les effets de couches sont importants car les trajectoires forment un continuum à 3 paramètres (2 pour l'orientation du plan de la trajectoire, et 1 pour celle de la trajectoire dans son plan). La même dégénérescence existe pour des noyaux déformés dont l'une des parties aurait une surface sphérique (Fig.17b).

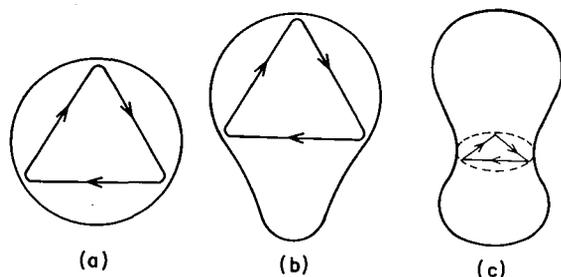


Figure 17 - Exemples de trajectoires contribuant à des effets de couche dans des noyaux très déformés.

Si donc $\delta\rho(E_F)$ présente un minimum pour le noyau sphérique a qui est ainsi magique, il en est de même pour le noyau fissile déformé selon b . A ce stade de la déformation, l'effet de couche rabaisse donc la barrière de fission, ce qui explique qualitativement le maximum de la distribution des produits de fission pour un fragment lourd à couches complètes (Fig.1). La Figure 17c montre l'apparition de nouvelles trajectoires courtes donnant d'autres effets de couche lorsque la striction commence à se produire.

Bien que la validité de l'analyse de la densité de niveaux en termes de trajectoires classiques semble limitée aux noyaux assez grands pour que les états à un corps forment pratiquement un continuum, l'exemple de la Figure 16 montre qu'on obtient une bonne extrapolation jusque dans la région où ces états ne sont pas denses, et qu'on peut

même atteindre les niveaux discrets jusqu'à l'état fondamental. Cette méthode de calcul des corrections de couche $\delta\rho$ est certes approchée; mais elle est plus simple à mettre en oeuvre que les méthodes habituelles consistant à résoudre l'équation de Schroedinger à 3 dimensions (5). Chercher les trajectoires classiques (même complexes) revient en effet à résoudre les équations différentielles du mouvement, et non des équations aux dérivées partielles. On peut donc espérer aborder ainsi le problème évoqué à la fin de la section II, de la détermination self-consistante des formes des potentiels à un nucléon décrivant les déformations des noyaux.

Notons pour terminer que la méthode ci-dessus, permettant le calcul d'effets quantiques à partir de techniques semi-classiques, est très générale. Elle s'adapte simplement au calcul des densités nucléaires [17]. Elle s'applique également à d'autres phénomènes ondulatoires, à condition que le système étudié soit relativement grand devant les longueurs d'onde mises en jeu. C'est ainsi que la distribution des modes électromagnétiques ou acoustiques à l'intérieur d'une cavité de forme quelconque, que les densités de niveaux d'électrons ou de phonons dans de petits grains métalliques, doivent présenter des effets de couche, c'est-à-dire des oscillations, du même type que ceux qui apparaissent dans les noyaux. L'analogie est plus directe encore entre la physique nucléaire et la physique atomique ou moléculaire : on sait que les effets de couche jouent un rôle essentiel dans les réactions chimiques (qui ressemblent à la fission) ; la présente méthode les associe aux trajectoires fermées des électrons.

REFERENCES

- [1] - W.D. MYERS and W.J. SWIATECKI - Nucl. Phys. 81 (1966) 1
 [2] - V.M. STRUTINSKY - Nucl. Phys. A95 (1967) 420
A122 (1968) 1

- [3] - S.G. NILSSON, C.F. TSANG, A. SOBICZEWSKI, Z. SZYMÁNSKI, S. WYCECH, C. GUSTAFSSON, I.L. LAMM, P. MÖLLER and B. NILSSON - Nucl. Phys. A131 (1969) 1

- [4] - M. BRACK, J. DAMGAARD, A.S. JENSEN, H.C. PAULI, V.M. STRUTINSKY and C.Y. WONG - Rev. Mod. Phys. 44 (1972) 320
- [5] - K. DIETRICH - Trieste lectures 1971, à paraître
- [6] - A. MICHAUDON - Advances in Nucl. Phys. (Plenum Press) Vol.6, à paraître
- [7] - J.R. NIX - Ann. Rev. of Nucl. Sc. vol.22, à paraître
- [8] - R. BALIAN and C. BLOCH - Ann.Phys. 60 (1970)401
63(1971)592
64(1971)271
69(1972)76
- [9] - K. DIETRICH - Ce volume
- [10] - S. BJØRNHOLM - Ce volume
- [11] - A.C. WAHL - Phys. and Chem. of Fission (IAEA Vienne 1965) vol.I, p.317
- [12] - A. FUBINI, J. BLONS, A. MICHAUDON and D. PAYA Phys. Rev. Letters 20 (1968) 1373
- [13] - H.J. SPECHT, J.S. FRASER, J.C.D. MILTON and W.G. DAVIES - Phys. and Chem. of Fission (IAEA Vienne 1969) p.363
- [14] - H.J. SPECHT, E. KONECNY, D. HEUNEMANN and J. WEBER - Communication I.6 à cette conférence, Vol.2, p.8
- [15] - Les communications de H. FLOCARD, P. QUENTIN et D. VAUTHERIN à cette conférence (I.1 et 2 vol.2, p.3,4) constituent cependant une détermination self-consistante des formes de noyaux en déformation à partir des interactions entre nucléons
- [16] - J.R. NIX and G.E. WALKER - Nucl. Phys. A132 (1969) 60
- [17] - P. BONCHE - Nucl. Phys. A , to be published

DISCUSSIONS

M. BARANGER (M.I.T.)

I am struck by the similarity between your work and Feynman's path integration. Can you comment on the connection ?

R. BALIAN (Saclay)

Feynman's path integral has the defect of involving integration over an infinite number of intermediate steps. Even in the case of free waves ($V(r)=0$), such an integration is necessary in order to derive the well-known form (19) of the Green's function. On the other hand, the stationary phase method for calculating Feynman's integral, mathematically not justified at all, yields for G its WKB approximation (16), and the corrections are not easy to derive. Our method, which takes precisely this WKB expression of G_0 as a zeroth approximation to G , and then iterates (21), may be viewed as the result of a partial summation on Feynman's expansion : in the expansion

(24) for G , we have replaced the infinite number of short intermediate steps from r' to r by a finite (but arbitrary) number of long steps, along which the propagation is G_0 (or Γ).

NEWSTEAD (Karlsruhe)

I would like to comment that recently we have obtained what may be additional evidence for the resonances near threshold mentioned in the first part of your talk as one of the consequences of the double humped fission barrier. Using the Karlsruhe cyclotron we have measured with high resolution, the neutron induced fission cross-section of ^{238}U . I must caution you that this result is preliminary since the run was only completed last week and the data is literally hot off the computer. What we have at this time is the ratio of $^{238}\text{U}(n,f)/^{235}\text{U}(n,f)$. The separate cross-sections will be available as soon as we have completed an analysis of the energy distribution of the incident neutron

flux. Assuming that the $^{238}\text{U}(n,f)$ cross section is well behaved in the region of interest, we appear to have evidence for a pure vibrational state at about 600 keV similar to the one found by James and Lynn at 720 keV in $^{230}\text{Th}(n,f)$. We also see additional resonances near 2 MeV. In fact we have data up to 30 MeV which would appear to show a number of broad bumps or undulations of several MeV in width. At such high excitation energy one would expect the vibrational states to be highly damped into the second class levels and thus the second class levels should be strongly overlapping. One is tempted to speculate that this is what we are seeing in this measurement. However this is only tentative and requires further analysis. The $(n,2n)$ and so on processes must also be taken into account.

M. LEFORT (Orsay)

- 1) There is a new evidence for shell effect in fission. This is the symmetric fission of ^{256}Fm induced by neutrons, where the half mass corresponds to fragments close to $Z = 50$ and $N = 82$.
- 2) Could you comment on the paper of G.G. Bunatian, V.M. Kolomietz and V.M. Strutinsky in the last issue of Nucl. Phys. A188(1972) 225, in which the authors justify the "shell correction" method in a rather different approach from yours ?

R. BALIAN (Saclay)

The real problem in defining shell corrections is : how can one separate in \mathcal{E} a "smooth part" $\tilde{\mathcal{E}}$, which is to be identified with \mathcal{E}_{LD} ? There cannot be any clear cut answer to this question, since the liquid drop energy \mathcal{E}_{LD} is purely phenomenological, whereas \mathcal{E} should be calculated from a microscopic model. As in all previous work, and as explained in section III above, the authors of the paper you quote assimilate the smooth part $\tilde{\mathcal{E}}$ of \mathcal{E} with the Thomas-Fermi approximation and its corrections. Their contribution does not differ essentially from the standard approach recalled in section II, but rather is a discussion of its foundations. In particular, they extend the identification

of the Hartree-Fock shell correction δE with the independent particle one^[2,5], to other microscopic theories (Fermi liquid, Bethe-Brueckner).

The only difference between treatments lies in the practical method to get rid of the smooth (but large) part $\tilde{\mathcal{E}}$. Bunatian et al. retain Strutinsky's smearing procedure. In order to obtain a good limit $\tilde{\rho}$ to ρ_γ for large γ , they are led to discuss in detail this procedure, and to choose a special shape for the smoothing function f_γ . If the shell corrections $\delta\mathcal{E}$ are not extracted from the solution of the single particle Schrodinger equation, but calculated directly by use of our semi classical treatment, this problem of separating \mathcal{E}_{TP} into $\tilde{\mathcal{E}} + \delta\mathcal{E}$ does not appear, since $\tilde{\mathcal{E}}$ (associated with trajectories of zero length) need not be calculated ; smoothing is not necessary, even if the potential well is finite and if there is a continuum of states. Another procedure for extracting shell effects from \mathcal{E} without use of smoothing has been proposed (R.K. Bhaduri and C.K. Ross, Phys. Rev. Letters 27 (1971) 606) ; it consists in relating the smooth part $\tilde{\rho}(E)$ of $\rho(E)$ to the singularity at the origin of the Fourier transform of $\rho(E)$. The analysis of Figure 15 (and Eq.(27)) shows that this procedure is related to ours, which gives to the harmonic analysis a meaning in terms of trajectories.

M. VENERONI (Orsay)

I would like to point out that, contrary to what has been stated, self-consistent calculations of fission barriers are becoming feasible. In fact the results of such calculations for ^{240}Pu by Flocard, Quentin and Vautherin have been presented yesterday. Does there exist more than a double barrier between Saclay and Orsay ?

R. BALIAN (Saclay)

To my knowledge, there exist two barriers, one around each center, but they are quite ineffective, since many people (including you and I) tunnel through them. Concerning Flocard, Quentin and Vautherin's communication^[15],

I arrived unfortunately at Aix too late (one hour ago!) to listen to it, and I regret much I was not aware of the very important progress they realized in the last few weeks, which made their work relevant to my subject. It is certain that the development of such self-consistent calculations determining deformed nuclear shapes, will constitute an essential advance in fission theory. As a conclusion to this talk, I may suggest that the analysis of single-particle level densities in terms of classical trajectories seems a simple-minded

but powerful tool ; it might help to avoid solving the wave equation at each stage of the self-consistent calculation, needed to determine nuclear shapes.

M. VENERONI (Orsay)

I completely agree. What we need is a good approximation to Hartree-Fock which would permit to avoid the computation of single particle wave functions at each iteration.