



HAL
open science

Description théorique de la dynamique nucléaire lors de collisions d'ions lourds aux énergies de Fermi

Grégoire Besse

► **To cite this version:**

Grégoire Besse. Description théorique de la dynamique nucléaire lors de collisions d'ions lourds aux énergies de Fermi. Physique Nucléaire Théorique [nucl-th]. Université de Nantes Faculté des sciences et des techniques, 2017. Français. NNT : . tel-01634258

HAL Id: tel-01634258

<https://hal.science/tel-01634258>

Submitted on 13 Nov 2017

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.

Thèse de Doctorat

Grégoire BESSE

*Mémoire présenté en vue de l'obtention du
grade de Docteur de l'Université de Nantes
sous le sceau de l'Université Bretagne Loire*

École doctorale : *Matières, Molécules, Matériaux en Pays de la Loire (3MPL)*

Discipline : *Physique*

Spécialité : *Physique Nucléaire*

Unité de recherche : *Laboratoire SUBATECH (UMR 6457)*

Soutenue le *mercredi 27 septembre 2017*

Description théorique de la dynamique nucléaire lors de collisions d'ions lourds aux énergies de Fermi

JURY

Président du jury	Guy ROYER , Professeur des universités, Université de Nantes
Rapporteurs :	Maria COLONNA , Directrice de recherche, INFN - Laboratori Nazionali del Sud Bernard BORDERIE , Directeur de recherche, Institut de Physique Nucléaire d'Orsay
Examineurs :	Dominique DURAND , Directeur de recherche, Laboratoire De Physique Corpusculaire de Caen Paolo NAPOLITANI , Chargé de recherche, Institut de Physique Nucléaire d'Orsay
Directeur de Thèse :	Virginia DE LA MOTA , Maitre de conférences, Université de Nantes
Co-directeur de Thèse :	Philippe EUDES , Professeur des universités, Université de Nantes

À Kadoc!

Remerciements

Mes premiers remerciements vont évidemment à mes directeurs de thèse, Virginia de la Mota et Philippe Eudes, qui m'ont accompagné tout au long de cette thèse. Dans ce grand chantier qu'a été, est et sera DYWAN, ils ont été à l'écoute, patients et très complémentaires afin de me fournir un soutien solide qui m'a permis d'avancer dans cet épais brouillard qui laisse désormais place aux éclaircies.

Ensuite, je tiens à remercier chaleureusement mes deux rapporteurs : Maria Colonna et Bernard Borderie, qui ont accepté d'évaluer mon travail en pleine période estivale. De plus, leur bonne humeur, leur sympathie et leurs travaux font pour moi, un réel plaisir de les avoir eu pour rapporteurs.

J'en profite aussi pour remercier les membres de mon jury. Premièrement, je remercie Dominique Durand d'avoir bien voulu faire parti de mon jury et d'évaluer mon travail. Deuxièmement je remercie Paolo Napolitani pour les mêmes raisons ainsi que nos échanges pendant cette thèse, il s'avère que nos emplois du temps se sont mal intercalés entre la thèse et l'HDR pour des développements approfondis du programme. Et enfin, je remercie Guy Royer d'avoir été présent et à l'écoute pendant toute ma thèse et plus encore. En effet, il s'avère aussi qu'il a été mon premier contact avec l'Université de Nantes pour mon Master et celui aussi qui m'a aidé pour ma recherche de stage en Master 1, qui m'a conduit de fil en aiguille à cette thèse. De fait, je le remercie énormément pour tout cela en plus d'avoir pris part dans mon jury de thèse.

Je voudrais en profiter aussi pour remercier les différents protagonistes qui ont fait de ma thèse une expérience professionnelle très enrichissante et variée. Premièrement, je voudrais remercier Ana Poletto, Bernard Kubica et Pol-Bernard Gossiaux qui m'ont offert des opportunités pour faire de la communication et de la vulgarisation. Et j'encourage quiconque à partager son travail, ses connaissances et ses recherches et, que l'on soit à l'aise ou non, il existe autant de façons de vulgariser qu'il existe de personnes pour le faire. Je n'oublie pas les différents intervenants que j'ai eu au cours de mes formations et notamment Marie-Christine Percevaux et Sylvie Fortun avec qui les échanges ont été introspectifs et enrichissants. Je remercie de même Oliver Ravel qui m'a permis de donner des cours à différents niveaux et ainsi de découvrir l'enseignement.

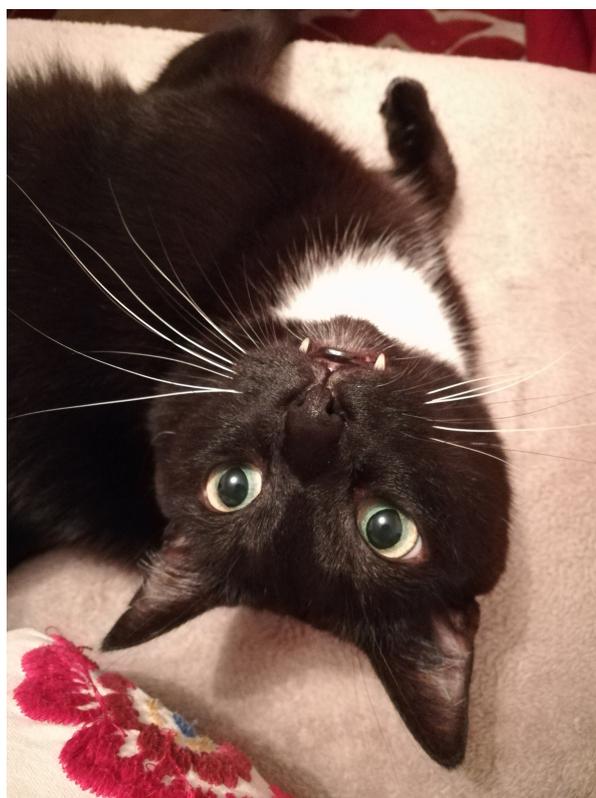
Un remerciement pour Camille Coti (LIPN) et David Monniaux (VERIMAG) qui ont pris le temps de m'aider à me sortir de mes déboires de programmation et de compilation. Je remercie aussi Charlotte Truchet (LINA) qui a été une excellente conseillère tout au long de cette thèse. Et il m'aurait été impossible de rencontrer ces chercheurs sans Twitter, ainsi que les nombreuses personnes avec qui j'ai pu échanger.

Mon arrivé en thèse a sans été motivée aussi par mes enseignants de Licence et Master, je les remercie tous et en particulier Philippe Barkan qui m'a vraiment donné goût à l'Analyse et Laurent Sezac qui m'a initié à la notation de Dirac et voilà le résultat ! J'en profite aussi pour remercier Zoran Basrak pour tous les échanges très constructifs que j'ai pu avoir. De même, je remercie énormément Eric Bonnet pour toutes ses contributions à mon travail de thèse et pour sa sympathie.

Une pensée à mes collègues thésards et plus particulièrement ceux avec qui j'ai partagé pas loin de cinq années, des débuts du Master jusqu'à la fin de la thèse pour Alexandre, Alexandre, Fanny, Kévin et Benjamin sans oublier Pierre (mais toi ça fait presque huit ans ...). Je n'oublie pas tous les autres thésards, des années précédentes, actuelles et suivantes avec qui j'ai passé aussi de très bons moments.

Et enfin et pas des moindres, je veux adresser mes remerciements à ma famille. Tout d'abord à mon épouse, Marine, qui a su m'épauler et me soutenir pendant cette thèse (qui l'a aussi intégralement corrigée ...). Je lui dédie en partie cette thèse car dans tout ce que j'entreprends, je sais qu'elle m'accompagne avec ses mots, son regard, ses conseils et sa bonne humeur. J'adresse ensuite mes remerciements à mes parents, qui d'une part m'ont donné l'opportunité de faire les études que je souhaitais et d'autre part qui m'ont accompagné tout au long de ce parcours sans savoir, en tout cas pas moins que moi, où ça allait me mener. Je remercie aussi mes frères, qui ont su me donner un goût certain aux sciences, à l'imagination, à la débrouillardise et ce sont des ingrédients essentiels au travail de thèse. Et enfin, je remercie aussi mes belles-sœurs et toute ma belle-famille, qui m'a toujours écouté et soutenu pendant cette longue période de thèse.

On m'a souvent demandé si j'étais fier de ma thèse. Je suis fier des conditions et de l'entourage que j'ai eu pour la faire. Ce qui fait naturellement intervenir tout ceux que j'ai cité précédemment.



Mais oui, bien sûr que je pense aussi à toi Timoun.

Avant-propos

Dans la mythologie grecque, on raconte le mythe de Thésée partant d'Athènes pour vaincre le Minotaure. Victorieux à son retour, son bateau fut conservé par les Athéniens. Comme un trophée à conserver, ils remplacèrent les planches usées par des nouvelles et il fut un temps où il ne resta plus une seule planche du bateau d'origine. Suite à ce constat, deux visions se confrontèrent : certains disaient que le bateau était toujours le même et pour les autres c'était un tout autre bateau. La problématique porte sur le fait si l'identité du bateau est conservée par sa forme ou bien par sa matière.

Je souhaitais partir de cette problématique pour introduire le contexte de mon travail de thèse. Au début de celle-ci, j'ai porté mon étude sur la compréhension du code de simulation **DYWAN** (Dynamical Wavelets in Nuclei). Face aux incompréhensions, flous ou désaccords, le code de simulation a évolué à un point où il ne ressemble plus à son allure d'origine, même si l'idée même est toujours présente. Est-ce encore le même code ? S'est posée alors la question de renommer le code de simulation : **NuDyCS** (Nuclear Dynamics with Coherents States). Si la réponse n'est pas encore donnée, nous partirons du fait que le code actuel est une nouvelle version de **DYWAN** (son palimpseste), qui lui constitue alors une première approche. J'invite alors les lecteurs connaisseurs de l'approche et des résultats de **DYWAN** à adopter un regard neuf sur ce travail.

Ensuite, j'aimerais apporter un point de précision sur le style rédactionnel assumé dans ce manuscrit : les explications et calculs sont exagérément détaillés et vulgarisés. J'ai pour objectif de fournir un manuscrit qui soit auto-cohérent, au maximum suffisant à lui-même accompagné d'un grand nombre de références. Le premier chapitre par exemple se veut comme une introduction très générale et vulgarisée pour la modélisation et la physique des collisions d'ions lourds aux énergies de Fermi qui puisse atteindre un large public, qu'il soit amateur ou curieux. Évidemment, les chapitres suivants seront moins accessibles pour le lecteur non-initié. La vulgarisation étant un point important dans ma démarche scientifique, il m'est paru évident d'en faire part dans mon manuscrit de thèse.

De plus, j'ai voulu ce manuscrit complet sur les approches numériques employées, notamment en annexes, comme un mode d'emploi du code de simulation. Cette transparence m'est indispensable pour laisser un travail dans de bonnes conditions, avec les outils et techniques nécessaires à une bonne compréhension du programme.

Enfin, pour mettre une touche d'humour dans ce manuscrit, chaque début de chapitre sera accompagné d'un *tweet* d'un acteur de la Science et de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche (ESR) : journaliste scientifique, chercheur et enseignant-chercheur. Ces *tweets* sont issus d'un mouvement massif d'auto-dérision de l'ESR français sur *Twitter* en février 2016 sous le *hashtag* #Gorafiesr¹²³ dans l'esprit du journal parodique *Le Gorafi*.

1. www.letudiant.fr/educpros/actualite/gorafiesr-le-hashtag-qui-tourne-en-derision-le-quotidien-des-universitaires.html

2. etudiant.lefigaro.fr/les-news/actu/detail/article/le-hashtag-gorafiesr-tourne-en-derision-le-monde-de-l-enseignement-superieur-18879/

3. jactiv.ouest-france.fr/campus/gorafiesr-quand-twitter-se-moque-lenseignement-superieur-59099

Table des matières

Remerciements	iii
Avant-propos	v
Introduction	1
1 Physique nucléaire et contexte	5
1.1 Introduction	5
1.2 L'équation d'état de la matière nucléaire	6
1.2.1 Diagramme de phases nucléaires	6
1.2.2 Contraindre l'équation d'état	7
1.2.3 Exemple de la matière infinie	8
1.3 Physique des collisions d'ions lourds	13
1.3.1 Cadre cinématique	14
1.3.2 Les différents types de collisions	14
1.4 État de l'art de la modélisation nucléaire	19
1.4.1 Statique des noyaux	20
1.4.2 Dynamique nucléaire	24
1.5 Conclusion	32
2 Description des noyaux à l'état fondamental	35
2.1 Introduction	35
2.2 Approximation en champ-moyen	36
2.3 Application à la description de l'état fondamental	38
2.3.1 Force effective	39
2.3.2 Potentiel nucléaire, champ-moyen	40
2.3.3 Condition initiale	45
2.4 Résolution de l'équation de Hartree-Fock	46
2.4.1 Les états cohérents	46
2.4.2 Espace de travail	47
2.4.3 L'oscillateur harmonique quantique	49
2.4.4 Décomposition en états-cohérents	54
2.5 Applications à différents noyaux	67
2.5.1 Modélisation de l'étain-120	67
2.5.2 Résultats sur un ensemble de noyaux	74
2.6 Conclusion	80
3 Description de la dynamique nucléaire	83
3.1 Introduction	83
3.2 Equations de Hartree-Fock dépendantes du temps	83
3.2.1 Principe variationnel	84
3.2.2 Équations d'évolution	85
3.2.3 Étude sur les équations d'évolution	88
3.2.4 Exemple sur un noyau d'étain-120	89

3.3	Au delà du champ-moyen	93
3.3.1	Équation maîtresse	93
3.3.2	Modélisation	95
3.4	Applications à l'astrophysique	98
3.5	Conclusion	100
4	Extension du modèle et fluctuations	103
4.1	Introduction	103
4.2	Une première approche des fluctuations	104
4.3	Application au modèle	104
4.4	Conséquences des fluctuations	106
4.5	Conclusion	109
5	Production de fragments	111
5.1	Introduction	111
5.2	Fragments et noyaux chauds	112
5.2.1	Énergie d'excitation	112
5.2.2	Pouvoir d'arrêt	113
5.3	Recherche de fragments au sein du modèle	114
5.3.1	Échantillonnage en déterminants de Slater	114
5.3.2	Reconnaissance de fragments	116
5.4	Application à un système	118
5.5	Conclusion	120
6	Études autour du pouvoir d'arrêt en réactions centrales pour le système $^{129}\text{Xe}+^{119}\text{Sn}$ aux énergies intermédiaires.	123
6.1	Introduction	123
6.2	Formalisme	123
6.3	Blocage de Pauli	125
6.3.1	Comportement moyen et seuil de Pauli	125
6.3.2	Efficacité de Pauli	126
6.4	Contexte	127
6.4.1	Condition de la simulation	127
6.4.2	Échantillonnages et fragments	127
6.4.3	Sélection des événements	129
6.5	Comparaison simulations-expérience	132
6.5.1	Comportement du pouvoir d'arrêt en fonction de l'énergie incidente	133
6.5.2	Comportement du pouvoir d'arrêt en fonction du seuil de Pauli . .	135
6.5.3	Valeurs de seuils déduites	138
6.5.4	Effets de milieu	139
6.6	Conclusion	141
	Conclusion	145
A	Explications sur le code "STATIQUE"	149
A.1	Introduction	149
A.2	Description du code	149
A.2.1	Calcul des niveaux accessibles	149
A.2.2	Condition initiale du processus itératif	150

A.2.3	Processus itératif	150
A.2.4	Convergence du code	159
A.2.5	Calcul des observables	159
B	Explications sur le code "DYNAMIQUE"	163
B.1	Introduction	163
B.2	Condition initiale	163
B.2.1	Prolongation	163
B.2.2	Structure cristalline	164
B.2.3	En collision	164
B.3	Évolution temporelle	165
B.3.1	Champ-moyen	165
B.3.2	Collisions	169
C	Explications sur l'échantillonnage en déterminants de SLATER	173
D	Liste des méthodes d'agrégation	175
D.1	Percolation	175
D.2	Classification Ascendante Hiérarchique	175
E	Produit scalaire	179
E.1	Première approche	179
E.2	Formule analytique	181
	Bibliographie	185

Constantes Physiques

Vitesse de la lumière (dans le vide)	$c = 2.997\,924\,58 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}$ (exact)
Constante de conversion	$\hbar = \hbar c = 197.326\,971\,8(44) \text{ MeV fm}$
Constante de conversion	$(\hbar c)^2 = 0.389\,379\,338(17) \text{ GeV}^2 \text{ mbarn}$
Unité de masse atomique	$m = mc^2 = 931.494\,061(21) \text{ MeV}$
Constante de conversion (Cinétique)	$\frac{(\hbar c)^2}{2m_p^2} = 20.900\,795\,52 \text{ MeV fm}^2$
Constante de conversion (Coulomb)	$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} = 1.439\,964\,485 \text{ MeV fm}$

Introduction

Le travail de cette thèse porte sur la description théorique de la matière nucléaire lors des collisions d'ions lourds aux énergies de Fermi. Il convient de définir la multitude des idées, concepts et contextes dans lequel ce sujet s'inscrit. Tout d'abord, notre objet d'étude est la matière nucléaire. Sous cette appellation, nous regroupons l'ensemble des phénomènes et processus à l'échelle nucléaire et sub-nucléaire. Ceux-ci se distinguent par les densités de matière atteintes et les températures pour lesquels ils peuvent exister. Pour les densités "normales" (proche de la densité des noyaux) et des basses températures, nous retrouvons les noyaux (ou ions), qui sont constitués de protons et de neutrons. Les constituants élémentaires qui composent les nucléons (quarks et gluons) ne sont atteignables que pour des énergies colossales (dans la centaine de GeV par nucléon) qui sont bien au-delà de notre contexte d'étude qui se porte justement sur les énergies de Fermi (quelques dizaines de MeV par nucléon).

Travailler dans un domaine d'énergie donné, cela peut vouloir dire deux choses : qu'on étudie à une certaine échelle, ici les nucléons comme on l'a dit plus tôt, mais aussi travailler sur des systèmes auxquels on va transmettre une énergie aux noyaux pour les étudier, on réalise ainsi des collisions. Les collisions d'ions lourds sont un des moyens d'étudier les propriétés de la matière nucléaire. Elles permettent d'étudier le comportement dynamique de celle-ci et d'en déduire des propriétés qui la caractérisent. Ces propriétés sont assimilées à l'aide d'outils thermodynamiques et statistiques et construisent peu à peu notre connaissance de l'équation d'état de la matière nucléaire. Celle-ci est une formulation qui permet de retranscrire les propriétés de la matière nucléaire pour des paramètres physiques : densité, température, énergie, masse, etc. Elle est un outil qui réunit aussi les approches théoriques et expérimentales.

Les collisions d'ions lourds sont un procédé qui permet d'étudier la matière nucléaire à des densités élevées (par interpénétration des noyaux) mais aussi d'étudier des phénomènes dynamiques qui caractérisent celle-ci. Les détecteurs 4π (qui couvrent quasiment tout l'angle solide) ont permis de nouvelles méthodes de détection pour les systèmes très excités et leurs différents modes de désexcitation (quasi-fusion, fission, fragmentation, vaporisation, ...). De fait, pour accompagner ces mesures, les physiciens s'aident de modèles afin de comprendre le comportement dynamique des noyaux. Dans ce contexte, les moyens informatiques actuels permettent le développement de codes de simulation très complexes qui permettent de décrire la dynamique nucléaire lors des collisions d'ions lourds.

Une collision fait intervenir un nombre fini de constituants qui sont de nature quantique. Donc notre problème se place dans le contexte de la résolution du problème à N-Corps Quantiques. De part la très grande difficulté (voire l'impossibilité) de la résolution exacte d'un tel problème (même pour quelques corps), différentes théories, formalismes et approches de modélisations ont vu le jour : comme l'équation de Boltzmann quantique ou les approches types Hartree-Fock. Dans cette thèse, nous allons développer et expliquer notre approche de la description des collisions d'ions lourds avec les équations de Hartree-Fock étendues dépendantes du temps. Dans notre domaine des énergies de

Fermi, nos collisions font intervenir deux processus principaux. D'une part les effets prédominants du champ-moyen, d'une autre part les quelques collisions nucléon-nucléon permises qui ne sont pas bloquées par le principe de Pauli.

Dans un premier temps, nous ferons une introduction très générale de notre sujet d'étude. Cette partie se veut *intentionnellement très vulgarisée* afin de poser les bases et les concepts. Premièrement sur l'équation d'état de la matière nucléaire, quelques notions et les différents outils thermodynamiques associés utilisés, pour cela nous utiliserons le modèle de la matière infinie symétrique et asymétrique. Secondement, nous introduirons le cadre des collisions d'ions lourds et quelques scénarii typiques de réaction. Et dernièrement, nous ferons une liste non exhaustive des différentes théories, formalismes et approches pour la modélisation de la description de l'état fondamental des noyaux mais aussi de la dynamique nucléaire.

Ensuite dans un second temps, nous aborderons la description des noyaux dans leur état fondamental. Et notamment, cela passera par l'explication de l'approximation en champ-moyen, principe élémentaire dans la théorie de Hartree-Fock dont nous chercherons à résoudre l'équation pour modéliser des noyaux dans leur état fondamental. Ceci constitue la première étape de ce travail de thèse, car la modélisation de ces noyaux est nécessaire pour la collision d'ions lourds. Notre approche utilise la théorie des ondelettes et la décomposition des fonctions d'ondes en états-cohérents, précisément expliquée dans la référence [JOU96]. Cette description permet une parfaite continuité entre la description statique des noyaux et leur utilisation dans une approche dynamique. Ainsi, nous décrirons la mise en place de la résolution de Hartree-Fock et notamment le recours à l'approximation harmonique. S'en suivront quelques exemples de résultats sur différentes noyaux pour illustrer les performances du modèle.

Dans un troisième temps, nous entrerons dans le corps de la problématique : la description de la dynamique nucléaire. Tout d'abord, nous reprendrons les équations de Hartree-Fock évoquées lors du chapitre précédent pour en déduire les dépendances dynamiques. Ainsi nous y appliquerons le principe variationnel pour en déduire les équations d'évolution de nos ondelettes. Le comportement de ces équations seront étudiées premièrement avec un modèle simplifié, puis secondement au sein de notre modèle. Nous pourrons en observer la stabilité temporelle offerte par la description sur le cas d'un noyau seul et isolé. Puis ensuite, nous aborderons le second volet de la problématique de la dynamique nucléaire aux énergies de Fermi : les effets dissipatifs. Pour cela, nous irons au delà de la description à un-corps en champ-moyen de Hartree-Fock et nous introduirons ces effets dissipatifs issus des corrélations d'ordres supérieurs par un terme dît de *collisions*. Nous illustrerons l'introduction de ce terme avec une comparaison entre une modélisation champ-moyen uniquement et une avec ce terme de collisions. Nous aborderons succinctement la description de la matière nucléaire infinie au sein de la modélisation de celle-ci dans les croûtes d'étoiles à neutrons accessible avec notre formalisme. Celle-ci a déjà fait l'objet d'études avec la version précédente du modèle dans la référence [FIG10].

Puis, dans un quatrième temps, nous aborderons succinctement un travail réalisé pendant cette thèse qui porte sur l'ajout de fluctuations au sein du modèle. Ces fluctuations tirent leurs origines des corrélations non prises en compte dans les modèles du

type champ-moyen étendu. En effet, pour ce type d'approche dans le domaine des énergies de Fermi, la dispersion de quelques observables collectives sont sous-estimées, ainsi la description de certains phénomènes comme la multifragmentation et les multiples voies de décroissance observées expérimentalement ne sont pas ou peu reproduites. Cet ajout constituera, à notre connaissance, la première approche quantique qui prendra en compte ces effets. Nous expliquerons alors notre approche pour l'implémentation de ces fluctuations et les effets engendrés sur la description.

Suite à cela, dans un cinquième temps, nous aborderons la question de la recherche de fragments au sein de notre description. En effet, notre approche décrit la dynamique durant la collision et de fait la formation de fragments et de noyaux chauds lors de cette phase. Cette étape est cruciale pour une éventuelle comparaison avec des données expérimentales. Nous listerons alors quelques observables atteignables autant avec une description en ondelettes qu'avec une description en fragments. En suite, nous expliciterons la spécificité des approches type Hartree-Fock pour la reconstruction de l'information à N-Corps avec les déterminants de Slater. En effet, contrairement aux modèles semi-classiques où les particules-test sont des empreintes semi-classiques des nucléons, nos ondelettes sont des fonctions d'ondes comme description quantique des nucléons et la reconstruction des positions de ceux-ci n'est pas directe. Ensuite, nous expliquerons notre méthode de formation de fragments une fois notre information à N-Corps des nucléons reconstruite. Enfin nous illustrerons les effets de la reconstruction de l'information à N-Corps en réalisant une comparaison sur une observable entre des distributions en ondelettes, en nucléons et en fragments.

Et enfin, dans un dernier chapitre, nous procéderons à une étude autour du pouvoir d'arrêt dans les collisions centrales pour le système Xénon-Étain. Les différents aspects précédemment énoncés seront utilisés et un accent sera donné sur le terme de collision et sa sensibilité. Cette étude se basera directement sur des comparaisons avec des données expérimentales, donc la reconstruction à N-Corps, la recherche de fragments et des méthodes de sélections seront mises en places.

En toute fin de ce manuscrit, des annexes sont disponibles et comportent des aspects techniques et numériques, ainsi que des détails sur la mise en place des différents code de simulation. L'ordre de ces annexes reprend la structure principale du corps du manuscrit : description de la statique des noyaux, description de la dynamique des collisions, explications sur les déterminants de Slater et enfin les différentes méthodes d'agrégation envisagées.

Physique nucléaire et contexte

Il décide d'arrêter de chercher et
trouve #GorafiesR

@DevilleSy 06 :40 - 1 févr. 2016

1.1 Introduction

La matière nucléaire reste objectivement l'objet d'étude le plus universel de part son omniprésence à toutes les échelles de la physique. En effet, si son étude peut se faire à l'échelle astrophysique, au sein des supernovæ ou des étoiles à neutrons, sa nature reste la même au sein des collisions que l'on réalise dans des accélérateurs ou même dans les noyaux qui composent cette page de papier. Et justement, quels sont les moyens qui permettent d'accéder aux propriétés qui régissent le fonctionnement des noyaux et de la matière nucléaire ?

Expérimentalement, il y a deux approches qui se distinguent. On pourrait qualifier la première de "passive" et la seconde "d'active". La méthode passive est celle qui consiste à observer le noyau proche du repos par exemple. On pourrait comparer cela à étudier le "tic-tac" d'une montre pour en comprendre le fonctionnement. Dans le deuxième cas, la méthode active, celui qui nous intéresse plus particulièrement, ce sont les phénomènes de transport qui seront étudiés à l'aide de collisions. Pour filer la métaphore, il s'agit de lancer deux montres l'une contre l'autre et mesurer ce qu'il reste à la fin. Et c'est là que le cadre de cette thèse intervient. Dans les expériences, le système initial est presque connu et les détecteurs mesurent des "restes". De fait, le physicien n'a pas de possibilité de connaître directement le processus dynamique qui régit la collision. Il doit faire intervenir des modèles.

Ces modèles théoriques s'appuient sur des équations de transport et certains ingrédients physiques. Néanmoins il faut calibrer ces modèles à l'aide de données expérimentales. Et le lien le plus fort qui unit toutes les approches de physique nucléaire reste **l'équation d'état de la matière nucléaire**. Celle-ci peut être calibrée à l'aide de données astrophysiques : observation d'étoiles à neutrons, de supernovæ et aussi à l'aide de données expérimentales dans les laboratoires terrestres.

Dans un premier temps, nous expliciterons l'équation d'état de la matière nucléaire, comment l'exploiter et notamment comment la physique des collisions d'ions lourds y apporte des réponses. Ensuite, nous établirons un bilan sur les différentes approches de la modélisation nucléaire et plus précisément sur les différentes approches des codes de transport, ce qui constitue l'intérêt principal de cette thèse.

1.2 L'équation d'état de la matière nucléaire

L'équation d'état est une formulation, une approche qui nous vient de la thermodynamique, qui permet de définir la matière nucléaire (dans son état nucléonique) quel que soit le contexte. C'est justement cette universalité qui fait la richesse de cette équation mais qui pose aussi le Problème. En effet, l'équation d'état se définit sur une large gamme de densité, ou sur un large intervalle de rapport à la densité de saturation $\rho_\infty = 0.16 \text{ fm}^{-3}$ [Swi51], elle-même définie par l'équation d'état. C'est d'ailleurs le point initial, car c'est la seule information que les données expérimentales donnent directement, grâce aux mesures de masse des noyaux.

1.2.1 Diagramme de phases nucléaires

On peut dire que la matière nucléaire a plusieurs phases, de façon semblable aux phases gazeuse, liquide et solide de la matière macroscopique. Néanmoins, il faut prendre les précautions avec quelles quantités physiques nous allons définir la matière nucléaire. Vu que c'est notre intérêt, nous allons regarder la densité, autour de la densité de saturation, comme nous l'avons précisé précédemment. Secondement, nous pourrions prendre la pression, de la même façon que pour de la matière ordinaire. Nous allons plutôt nous intéresser à l'énergie, qui peut être prise sous forme de densité d'énergie, ou bien la température [DLL02]. Le problème de la température, c'est que l'image classique conditionne cette notion. De plus, la durée d'une collision d'ions lourds est au plus 10^{-21} secondes, la notion de température reste assez floue avec des durées aussi courtes.

Nous parcourons ce diagramme, en figure 1.1 pour les faibles densités d'énergie (ou températures), car c'est notre sujet d'étude : les énergies basses et intermédiaires (avec des collisions aux énergies de bombardement de quelques dizaines de MeV par nucléon). En partant des densités les plus basses aux plus hautes. Pour les plus basses densités, la matière est très diluée et c'est le régime de la spinodale [PR87]. Cette région est très instable, les fluctuations qui y règnent sont amplifiées plutôt qu'être amorties, ce qui est le cas pour les densités "normales", c'est à dire à partir de la densité de saturation. Si l'on monte en densité, on passe d'une phase dite gazeuse à liquide. Les noyaux, les grumeaux de matière nucléaire existent dans la zone inférieure pour les plus faibles densités jusqu'à celles excédant légèrement la densité de saturation ; tout cela pour les plus basses densités d'énergie (ou de faibles températures < 10 MeV). On trouve les plus hautes densités, par exemple dans les effondrements de supernovæ ou dans le manteau des étoiles à neutrons, les noyaux n'existent plus sous leur forme "classique", la matière nucléaire va former des structures : plaques, filaments, éponges [MSE13]. Au delà une limite, pas précisément déterminée, définie par une densité critique ρ_C , la matière nucléaire adopte des phases très exotiques, comme la supraconductivité de couleur, on a recours donc à la chromodynamique quantique, ce qui nous sort du cadre de cette thèse.

Ce diagramme des phases, comme l'indique le nom, décrit les différentes phases de la matière. Par conséquent, il se produit des transitions de phases. Ces phénomènes dynamiques, qui vont occuper différentes régions du diagramme des phases ne peuvent être observés en laboratoire, ils sont donc déduits de par des mesures et des observables qui dépendent souvent de modèles. C'est en cela qu'un code de simulation dynamique est pertinent. En reproduisant des données expérimentales, on est en droit de supposer que

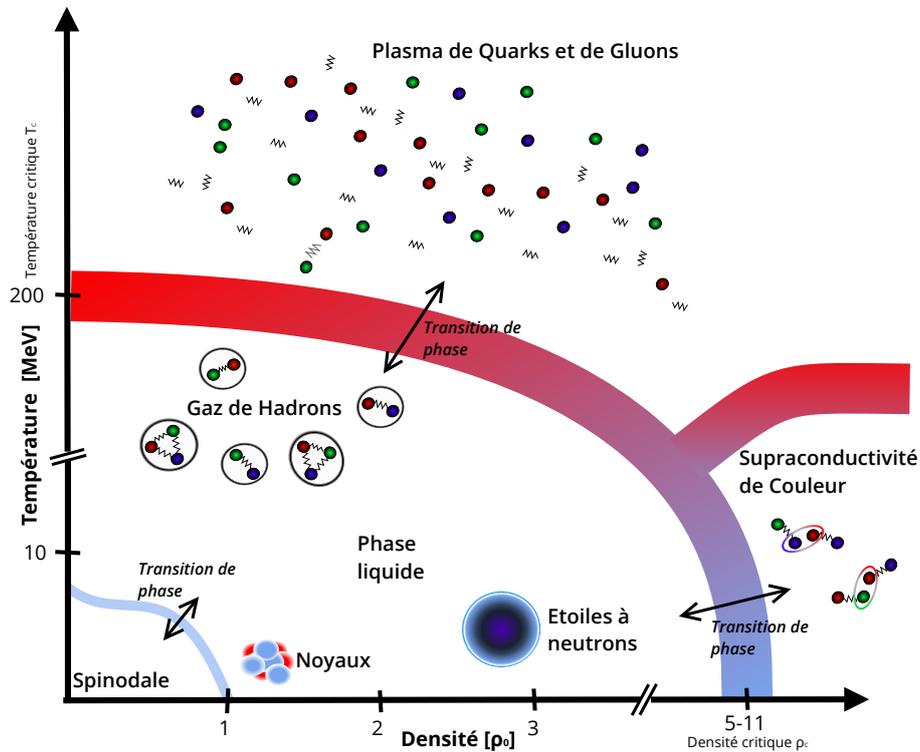


FIGURE 1.1 – Diagramme des phases de la matière nucléaire.

le code reproduit le comportement dynamique de la matière nucléaire. De fait, on peut faire des hypothèses et des observations sur les transitions de phases et les phénomènes de transport de la matière nucléaire.

Dans notre cas, nous allons réaliser des collisions d'ions lourds, de fait, la densité atteinte n'excédera pas deux fois la densité de saturation, nous pouvons donc explorer, avec cette approche, des plus basses densités jusqu'à légèrement au dessus la densité de saturation. Néanmoins, le formalisme qui sera décrit lors de cette thèse est adaptable pour d'autres contextes. En effet, nous pouvons aussi étudier la matière nucléaire au sein des croûtes d'étoiles à neutrons, mais aussi la matière nucléaire infinie, pour des densités beaucoup plus faible. De fait, avec un même formalisme mais plusieurs contextes, nous pouvons explorer les plus basses densités jusqu'à plusieurs fois la densité de saturation, la densité critique étant une limite du formalisme. Car en effet, nous décrivons de la matière nucléaire nucléonique, où le nucléon reste l'objet fondamental.

1.2.2 Contraindre l'équation d'état

L'équation d'état autour de la densité de saturation est définie comme une relation entre l'énergie de liaison nucléonique (ou densité d'énergie, ou énergie par nucléon) et la densité : $\frac{E}{A}(\rho)$. Expérimentalement, on mesure les quantités qui contraignent l'équation d'état autour de la densité de saturation. Ainsi, l'énergie de liaison $\frac{E_0}{A}$ à la densité

de saturation ρ_∞ est bien connu par des mesures d'énergies de liaison et de rayons des noyaux. Les expériences autour des résonances géantes des noyaux permettent d'approfondir cette connaissance en explorant des régions de densité au voisinage de la densité de saturation [Mil+62]. Les oscillations de densité provoquées par ces résonances nous donnent des informations sur les dérivés première et seconde de l'équation d'état autour de la densité de saturation. Ainsi, on va définir des quantités physiques qui traduiront les courbures (ou dérivés) de l'équation d'état de la matière nucléaire.

L'idée reste de calibrer assez précisément les courbures autour de la densité de saturation à l'aide des expériences. Ces courbures permettront de définir une plus large gamme en densité. De fait, ces propositions d'équations d'état bien calibrées pourront être utilisées dans des modèles théoriques à plus hautes densités, comme pour décrire le manteau des étoiles à neutrons ou des expériences à plus hautes densités.

Autre point à préciser, l'équation d'état de la matière nucléaire dépend de ρ , ceci correspond à la densité totale (ou densité isoscalaire). En effet, la matière nucléaire est en fait un mélange de deux fluides : protons et neutrons, donc on a $\rho = \rho_n + \rho_p$, avec ρ_n et ρ_p la densité de neutrons et de protons respectivement. Ce mélange, souvent en quantités inégales va induire des effets sur le comportement de la matière. De fait, il va falloir prendre en compte ces effets d'asymétrie entre protons et neutrons. On introduira la densité d'asymétrie (ou densité isovectorielle) : $\xi = \rho_n - \rho_p$. Pour la suite, on fera en sorte de séparer en deux contributions distinctes les termes qui représentent la matière symétrique (avec $\xi = 0$) et la contribution asymétrique. De fait, on pourra définir des quantités qui correspondent à la matière symétrique et asymétrique séparément.

1.2.3 Exemple de la matière infinie

Dans cette partie, nous allons utiliser un modèle relativement simple pour illustrer l'utilisation de l'équation d'état. C'est une approche macroscopique qui emprunte des outils à la thermodynamique classique. Ce modèle est aussi lié au modèle dit de la "Goutte Liquide" [BW39] dont on détaillera le formalisme plus tard.

Contexte

Nous allons considérer que notre noyau est un gaz de A particules, constitué de N neutrons et Z protons, qui sont tous deux des fermions. Nous allons confiner ce gaz dans une boule de volume $V = \frac{4}{3}\pi r_0^3$ avec r_0 le rayon classique estimé à l'aide d'un ajustement des rayons des noyaux, tels que : $R = r_0 A^{\frac{1}{3}}$ le rayon des noyaux et A son nombre de nucléon.

Énergie cinétique

Ce noyau est considéré à l'état fondamental, de fait, tous les nucléons sont distribués sur les niveaux d'énergies les plus bas possibles tout en garantissant le principe d'exclusion de Pauli qui empêche la superposition de deux nucléons (de même spin et isospin) dans le même état. Le niveau d'occupation, pour chaque type de fermion, le plus haut en

1.2. L'équation d'état de la matière nucléaire

énergie est le niveau de Fermi, avec son énergie E_F et impulsion p_F associées.

$$N = \int_0^{p_F(n)} dn_n(\vec{p}) = \frac{V}{3\pi^2} \left(\frac{p_{F,n}}{\hbar} \right)^3 = \frac{V}{3\pi^2} k_{F,n}^3 \quad (1.1)$$

$$dn_n(\vec{p}) = \frac{2V d^3p}{h^3} = \frac{2V \times 4\pi p^2 dp}{h^3} \quad (1.2)$$

L'élément d'intégration dn (équation 1.2) représente le nombre d'état quantiques (pour les neutrons n) d'impulsion comprise entre \vec{p} et $\vec{p} + d\vec{p}$ dans un volume V . Le chiffre 2 correspond aux deux orientations du spin de neutron. Et h^3 représente l'espace élémentaire d'occupation d'un état dans l'espace des impulsions. De fait, en intégrant jusqu'à l'impulsion de Fermi, on va sommer tous les espaces élémentaires occupés et accessibles et retrouver le nombre de particule. Cette intégration a pour but d'exprimer l'impulsion de Fermi en fonction des autres paramètres. Ainsi, on a pour les neutrons et pour le noyau (si $Z = N$) :

$$N = \frac{V}{3\pi^2} k_{F,n}^3 \quad \text{et} \quad A = \frac{2V}{3\pi^2} k_{F(Z=N)}^3 \quad (1.3)$$

$$\text{donc} \quad k_F(n) = \left(\frac{2N}{A} \right)^{\frac{1}{3}} k_{F(Z=N)} \quad (1.4)$$

$$\text{et} \quad k_{F(Z=N)} = \left(\frac{3\pi^2 A}{2} \right)^{\frac{1}{3}} = \left(\frac{3\pi^2}{2} \right)^{\frac{1}{3}} \rho^{\frac{1}{3}} \quad (1.5)$$

Le vecteur d'onde de Fermi $k_{F(Z=N)}$ découle du calcul de l'énergie pour le cas de la matière symétrique (tel que $N = Z$). Donc on a :

$$E_{cin}(n) = \int_0^{p_F(n)} \frac{p^2}{2m} dn_n(\vec{p}) \quad (1.6)$$

$$= \frac{2V \times 4\pi}{2m \times h^3} \times \frac{p_F(n)^5}{5} \quad (1.7)$$

$$= \frac{2V \times 4\pi}{2m \times h^3} \times \left(\frac{2N}{A} \right)^{\frac{5}{3}} \frac{p_{F(Z=N)}^5}{5} \quad (1.8)$$

$$= \frac{3}{2 \times 5} \times \frac{2V}{3\pi^2} \frac{8\pi^3 p_{F(Z=N)}^3}{h^3} \left(\frac{2N}{A} \right)^{\frac{5}{3}} E_{F(Z=N)} \quad (1.9)$$

$$= \frac{3}{10} A \left(\frac{2N}{A} \right)^{\frac{5}{3}} E_{F(Z=N)} \quad (1.10)$$

$$(1.11)$$

La constante $E_{F(Z=N)} = \epsilon_F$ qu'on nomme énergie de Fermi en matière symétrique dépend de r_0 et peut être estimée à environ 37 MeV . Ensuite, on procède de la même façon pour les protons et on somme les contributions cinétiques des deux fermions ce qui nous

donne :

$$E_{cin} = E_{cin}(n) + E_{cin}(p) \quad (1.12)$$

$$= \frac{3}{10} A \epsilon_F \left[\left(\frac{2N}{A} \right)^{\frac{5}{3}} + \left(\frac{2Z}{A} \right)^{\frac{5}{3}} \right] \quad (1.13)$$

$$= \frac{3}{10} A \epsilon_F \left[(1+I)^{\frac{5}{3}} + (1-I)^{\frac{5}{3}} \right] \quad \text{avec } I = \frac{N-Z}{N+Z} \quad (1.14)$$

$$= \frac{3}{10} A \epsilon_F \left[2 + \frac{10}{9} I^2 + \frac{10}{243} I^4 + \dots \right] \quad (1.15)$$

$$= \frac{3}{5} A \epsilon_F + \frac{1}{3} A \epsilon_F I^2 + \frac{1}{3^2} A \epsilon_F I^4 + \dots \quad (1.16)$$

Le premier terme correspond à l'énergie cinétique de la matière symétrique, les suivants à la matière asymétrique. Pour la suite, on ne conservera que les deux premiers termes du développement.

Cas de la matière symétrique

On va désormais s'intéresser à l'énergie par nucléon dans notre système. On va prendre en compte l'énergie cinétique calculée précédemment mais aussi l'énergie potentielle. Mais nous allons d'abord nous intéresser à la matière symétrique. Néanmoins, nous ne considérerons ni la contribution coulombienne, ni la surface car elle n'intervient pas dans le cas de la matière infinie.

On va donc considérer de la matière symétrique. En ce qui concerne l'énergie cinétique, on se contentera du premier terme qu'on a calculé précédemment. Pour l'énergie potentielle, on va utiliser une formulation de type Skyrme [Sky58] que l'on détaillera plus tard dans la thèse, on utilisera pour cela, la densité d'énergie potentielle $H_{pot}(\rho)$. Sur cette formulation, on va se concentrer uniquement sur les termes qui font intervenir la densité isoscalaire ρ et pas la densité isovectorielle ξ qui implique une asymétrie dans le noyau. Ce qui importe ici, c'est de voir comment on va extraire des informations, des observables sur l'équation d'état avec des outils de thermodynamique. Donc on a :

$$\frac{E}{A}(\rho) = \frac{E_{cin}}{A}(\rho) + \frac{H_{pot}(\rho) \times V}{A} \quad (1.17)$$

$$= \frac{3}{5} \epsilon_F + \frac{H_{pot}(\rho)}{\rho} \quad (1.18)$$

$$= \frac{3}{5} \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} + \frac{1}{\rho} \left(\frac{3}{8} t_0 \rho^2 + \frac{1}{16} t_3 \rho^{\sigma+2} \right) \quad (1.19)$$

$$= \frac{3\hbar^2}{10m} \left(\frac{3\pi^2}{2} \right)^{\frac{2}{3}} \rho^{\frac{2}{3}} + \frac{3}{8} t_0 \rho + \frac{1}{16} t_3 \rho^{\sigma+1} \quad (1.20)$$

Dans un premier temps, on peut tirer de cette formule un premier coefficient, c'est l'**énergie de volume**. Il s'agit de l'énergie par nucléon à la densité de saturation. C'est le point de départ pour calibrer l'équation d'état.

$$\frac{E}{A}(\rho_0) = a_v \quad (1.21)$$

1.2. L'équation d'état de la matière nucléaire

Toujours dans le cadre de thermodynamique, on peut calculer, par exemple, la pression du fluide de matière nucléaire :

$$P = - \left. \frac{\partial E}{\partial V} \right|_A = - \left. \frac{\partial E}{\partial \rho} \right|_A \left. \frac{\partial \rho}{\partial V} \right|_A = \frac{A}{V^2} \left. \frac{\partial E}{\partial \rho} \right|_A = \rho^2 \left. \frac{\partial E/A}{\partial \rho} \right|_A \quad (1.22)$$

$$P = \rho \left(\frac{3\hbar^2}{5m} \left(\frac{3\pi^2}{2} \right)^{\frac{2}{3}} \rho^{\frac{2}{3}} + \frac{3}{8} t_0 \rho + \frac{1}{16} t_3 (\sigma + 1) \rho^{\sigma+1} \right) \quad (1.23)$$

On considère que la pression d'un fluide nucléaire est nulle si la densité de celui-ci est à la densité de saturation $P(\rho_0) = 0$. Ceci permet d'établir une équation afin de déterminer théoriquement la densité de saturation à partir des paramètres (t_0 et t_3 ici) qu'on utilise dans la force nucléaire, néanmoins, ceci nécessite une force plus sophistiquée que celle utilisée ici. Inversement, la connaissance expérimentale de la densité de saturation apporte une contrainte aux paramètres de la force utilisée.

De la même façon que la pression, nous allons calculer le module de compressibilité du fluide, toujours à l'aide de la thermodynamique :

$$\chi = - \frac{1}{V} \left. \frac{\partial V}{\partial P} \right|_A = - A \rho \left. \frac{\partial V}{\partial \rho} \right|_A \left. \frac{\partial \rho}{\partial P} \right|_A = \frac{1}{\rho} \left(\left. \frac{\partial P}{\partial \rho} \right|_A \right)^{-1} \quad (1.24)$$

Cependant, quand il s'agit de la matière nucléaire, il est plus couramment utilisé le module d'incompressibilité plutôt que celui de compressibilité.

$$K = \frac{9}{\chi \rho} = 9 \left(\left. \frac{\partial P}{\partial \rho} \right|_A \right) = 9 \rho^2 \left. \frac{\partial E/A}{\partial \rho} \right|_A = \frac{18P}{\rho} + 9 \rho^2 \frac{\partial^2 E/A}{\partial \rho^2} \quad (1.25)$$

De la même façon que pour le coefficient d'énergie de volume et la pression, on va calculer le module d'incompressibilité à la densité de saturation :

$$K_{\rho=\rho_0} = K = \frac{18P(\rho_0)}{\rho_0} + 9 \rho_0^2 \left(\left. \frac{\partial^2 E/A}{\partial \rho^2} \right)_{\rho=\rho_0} \right) = 9 \rho_0^2 \left(\left. \frac{\partial^2 E/A}{\partial \rho^2} \right)_{\rho=\rho_0} \right) \quad (1.26)$$

$$= - \frac{3}{5} \frac{(\hbar c)^2}{m c^2} \left(\frac{3\pi^2}{2} \right)^{\frac{2}{3}} \rho_0^{\frac{2}{3}} + \frac{9\sigma(\sigma+1)}{16} t_3 \rho_0^{\sigma+1} \quad (1.27)$$

Ce coefficient est crucial quant à la détermination de l'équation d'état et fait l'objet de nombreux travaux théoriques. C'est le principal coefficient que l'on cherche à trouver expérimentalement ce qui en fait un paramètre très important pour la validation de modèles théoriques. En effet, avec les expériences sur les résonances géantes des noyaux on peut estimer un module d'incompressibilité de la matière nucléaire [Bla80].

Cas de la matière asymétrique

On va aller plus loin dans notre modèle en y ajoutant les contributions au fait que la matière soit asymétrique en nombre de proton et de neutrons. Dans la partie précédente, toutes ces contributions asymétriques ont été mises à zéro. Le but de cette partie est de faire apparaître une définition de l'énergie de liaison simple et élégante pour en tirer des paramètres thermodynamiques comme précédemment. On va chercher à faire émerger

une formulation comme celle-ci :

$$\frac{E}{A}(\rho, I) = \frac{E}{A}(\rho) + \frac{E_{asym}}{A}(\rho)I^2 \quad (1.28)$$

Concernant l'énergie cinétique, on va reprendre la formule que l'on a trouvé précédemment à 1.14 :

$$E_{cin} = \frac{3}{10}A\epsilon_F \left[(1+I)^{\frac{5}{3}} + (1-I)^{\frac{5}{3}} \right] \simeq \frac{3}{5}\epsilon_F + \frac{1}{3}\epsilon_F I^2 \quad (1.29)$$

En ce qui concerne l'énergie potentielle, nous allons reprendre la formulation utilisée plus tôt, mais en plus complète, une fois encore, nous reviendrons sur la formulation de Skyrme plus tard. D'ailleurs, on va reprendre notre approximation comme quoi la densité est constante à l'intérieur de noyau, de fait :

$$E_{pot} = H_{pot}V \implies \frac{E_{pot}}{A} = \frac{H_{pot}}{\rho} \quad (1.30)$$

Ce qui nous donne pour l'énergie potentielle par nucléon :

$$\begin{aligned} \frac{E_{pot}}{A} &= \frac{3}{8}t_0\rho + \frac{1}{16}t_3\rho^{\sigma+1} \\ &+ \frac{1}{2} \left[-\frac{t_0}{2} \left(x_0 + \frac{1}{2} \right) - \frac{t_3}{12} \left(x_3 + \frac{1}{2} \right) \right] \frac{\xi^2}{\rho} \end{aligned} \quad (1.31)$$

$$\text{avec } \xi = \rho_n - \rho_p \quad (1.32)$$

Pour la suite, on va relier notre facteur d'asymétrie I et la densité isovectorielle ξ utilisée précédemment. On peut en déduire l'égalité : $\frac{\xi^2}{\rho} = \rho I^2$. Ce qui nous donne pour l'énergie totale par nucléon avec les équations 1.29 et 1.31.

$$\begin{aligned} \frac{E_{tot}}{A}(\rho, I) &= \frac{3}{5}\epsilon_F + \frac{1}{3}\epsilon_F I^2 + \frac{3}{8}t_0\rho + \frac{1}{16}t_3\rho^{\sigma+1} \\ &+ \frac{1}{2} \left[-\frac{t_0}{2} \left(x_0 + \frac{1}{2} \right) - \frac{t_3}{12} \left(x_3 + \frac{1}{2} \right) \rho^\sigma \right] \rho I^2 \end{aligned} \quad (1.33)$$

$$\begin{aligned} &= \left(\frac{3}{5}\epsilon_F + \frac{3}{8}t_0\rho + \frac{1}{16}t_3\rho^{\sigma+1} \right) \\ &+ \left[\frac{1}{3}\epsilon_F + \frac{1}{2} \left(-\frac{t_0}{2} \left(x_0 + \frac{1}{2} \right) \rho - \frac{t_3}{12} \left(x_3 + \frac{1}{2} \right) \rho^{\sigma+1} \right) \right] I^2 \end{aligned} \quad (1.34)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{3}{10} \frac{(\hbar c)^2}{mc^2} \left(\frac{3\pi^2}{2} \right)^{\frac{2}{3}} \rho^{\frac{2}{3}} + \frac{3}{8}t_0\rho + \frac{1}{16}t_3\rho^{\sigma+1} \\ &+ I^2 \left(\frac{1}{6} \frac{(\hbar c)^2}{mc^2} \left(\frac{3\pi^2}{2} \right)^{\frac{2}{3}} \rho^{\frac{2}{3}} - \frac{1}{8}t_0(2x_0 + 1)\rho - \frac{1}{48}t_3(2x_3 + 1)\rho^{\sigma+1} \right) \\ &= \frac{E}{A}(\rho) + \frac{E_{asym}}{A}(\rho)I^2 \end{aligned} \quad (1.35)$$

Le premier terme est exactement l'expression 1.20 retrouvée dans le cas de la matière symétrique. On va donc s'intéresser à la seconde partie, qui caractérise l'asymétrie de la matière nucléaire. De la même façon que précédemment, on va décrire des paramètres

qui caractérisent l'équation d'état de la matière asymétrique.

Dans un premier temps, on s'intéresse à la valeur de l'énergie de liaison à la densité de saturation. Par convention, on appelle cette valeur **l'énergie de symétrie J**.

$$J = \frac{E_{asym}}{A}(\rho_0) \quad (1.36)$$

$$= \frac{1}{6} \frac{(\hbar c)^2}{mc^2} \left(\frac{3\pi^2}{2} \right)^{\frac{2}{3}} \rho_0^{\frac{2}{3}} - \frac{1}{8} t_0 (2x_0 + 1) \rho_0 - \frac{1}{48} t_3 (2x_3 + 1) \rho_0^{\sigma+1} \quad (1.37)$$

Cette valeur est très importante est fait l'objet de beaucoup d'études, qu'elles soient théoriques ou expérimentales [Tsa+12; LS14; Hor+14].

La seconde observable, proportionnelle à la pression, se nomme la **densité d'énergie de symétrie L** :

$$L = 3\rho_0 \left. \frac{\partial \frac{E_{asym}}{A}}{\partial \rho} \right|_{\rho=\rho_0} \quad (1.38)$$

$$= \frac{1}{3} \frac{(\hbar c)^2}{mc^2} \left(\frac{3\pi^2}{2} \right)^{\frac{2}{3}} \rho_0^{\frac{2}{3}} - \frac{3}{8} t_0 (2x_0 + 1) \rho_0 - \frac{\sigma + 1}{16} t_3 (2x_3 + 1) \rho_0^{\sigma+1} \quad (1.39)$$

Et enfin, le dernier paramètre, qui s'exprime de la même façon que dans le cas de la matière symétrique, c'est le module d'incompressibilité K_{sym} :

$$K_{sym} = 9\rho_0^2 \left. \frac{\partial^2 \frac{E_{asym}}{A}(\rho)}{\partial \rho^2} \right|_{\rho=\rho_0} \quad (1.40)$$

$$= -\frac{1}{3} \frac{(\hbar c)^2}{mc^2} \left(\frac{3\pi^2}{2} \right)^{\frac{2}{3}} \rho_0^{\frac{2}{3}} - \frac{3\sigma(\sigma + 1)}{16} t_3 (2x_3 + 1) \rho_0^{\sigma+1} \quad (1.41)$$

Il existe beaucoup plus d'incertitude sur ce paramètre. Car c'est un paramètre assez fin, il s'agit du deuxième ordre de courbure de l'équation d'état.

En conclusion de cette approche, celle-ci nous permet de définir des paramètres, qui sont exprimés à partir des ingrédients d'une force que l'on va utiliser au sein du modèle. En fait, les différentes approches expérimentales et théoriques, à l'échelle microscopique et astrophysique, vont contraindre ces paramètres, ce qui permet de raffiner les forces effectives utilisées dans les modèles. De fil en aiguille, de part la variété et la complémentarité des approches, l'équation d'état de la matière nucléaire pour la matière nucléonique va être mieux définie pour converger vers une paramétrisation commune.

1.3 Physique des collisions d'ions lourds

Comme nous avons vu précédemment, les collisions d'ions lourds aux énergies basses et intermédiaires permettent expérimentalement d'atteindre des densités de l'ordre de deux fois la densité de saturation, ce qui permet d'explorer un peu plus l'équation d'état de la matière nucléaire. Dans cette partie, nous allons décrire le déroulement global et les phénomènes particuliers qui surviennent dans une collisions d'ions lourds aux énergies

basses et intermédiaires. Cela fera éventuellement intervenir les transitions de phases dont on a succinctement parlé dans la partie précédente, les différentes approches et visions des noyaux au sein des collisions, les ingrédients d'une collision et leurs rôles au sein de ce processus.

1.3.1 Cadre cinématique

Les collisions d'ions lourds aux énergies qui nous intéressent sont réalisées à l'aide d'un faisceau d'ions accélérés sur une cible fixe. Les grandeurs qui caractérisent la collision sont les ions A_1 et A_2 en jeu, l'énergie par nucléon incidente du faisceau $\frac{E_{inc}}{A}$ (ou l'énergie disponible dans le centre de masse), qui traduit la vitesse relative entre les noyaux et enfin le paramètre d'impact b comme indiqué sur la figure 1.2. Si les deux premiers ingrédients sont fixés en laboratoire (choix des ions : pureté du faisceau et de la cible, accélération des ions), le paramètre d'impact reste un paramètre relativement aléatoire (*comme un archer les yeux bandés*) et seule une estimation via des observables est possible. Le paramètre d'impact est la distance perpendiculaire entre les centres des noyaux dans le plan de collision. Un grand paramètre d'impact signifie une collision plus périphérique entre les noyaux, la limite pour qu'il y ait réaction est la somme des rayons des noyaux. Dans le reste de cette thèse, notamment pour les illustrations et explications, la collision sera représentée dans le centre de masse de la collision. Donc au lieu d'avoir un projectile qui fonce vers une cible, nous observerons le projectile et la cible se rentrer dedans l'un vers l'autre.

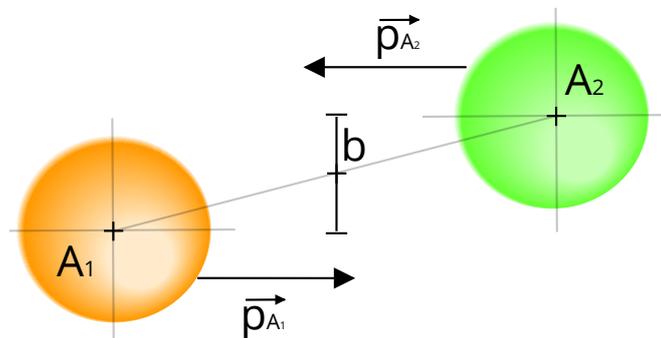


FIGURE 1.2 – Schéma d'une collision entre deux noyaux.

Dans nos collisions, les énergies par nucléon incidentes utilisées seront de quelques MeV jusqu'à une centaine de MeV. Les échelles de distance sont de l'ordre de quelques *fermis* (soit $10^{-15}m$). Concernant les échelles de temps, cela ira jusqu'à $1000fm/c$ soit environ $3 \times 10^{-21}s$.

1.3.2 Les différents types de collisions

En fonction du paramètre d'impact b et de l'énergie incidente $\frac{E_{inc}}{A}$, les différents scénarii possibles sont très différents. Bien qu'on distingue ces scénarii, il est normal qu'il existe des comportements transitoires que l'on peut avoir du mal à classer. Une représentation schématique [Sur98] des différents scénarii possibles peut guider notre description :

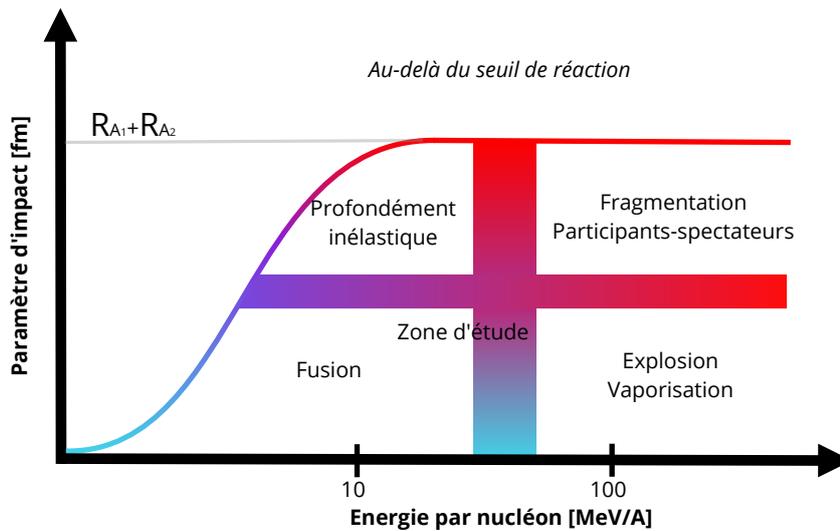


FIGURE 1.3 – Schéma simplifié des différents mécanismes en fonction de l'énergie des noyaux et de la centralité de la réaction. Notre région d'étude se porte sur le cercle violet, autour des énergies de Fermi.

Schéma reproduit de *Physique des collisions nucléaire* (Eric Suraud) [Sur98]

On voit qu'il existe plusieurs zones, nous allons les décrire succinctement l'une après l'autre.

Transparence

Pour les plus basses énergies, à quelques MeV/A , nous sommes dans un régime où les collisions nucléon-nucléon ne sont pas assez énergétiques et sont rendus impossibles par le principe d'exclusion de Pauli. De fait, on peut **supposer l'existence d'un régime non-dissipatif** où les noyaux sont transparents l'un pour l'autre et l'énergie incidente est suffisante pour qu'ils se traversent complètement. En fonction du paramètre d'impact, les noyaux seront plus ou moins déviés. Techniquement, ce régime est observé en modélisation mais aucune mesure ne semble confirmer l'existence d'un tel mécanisme. Celui-ci est illustré dans la figure 1.4.

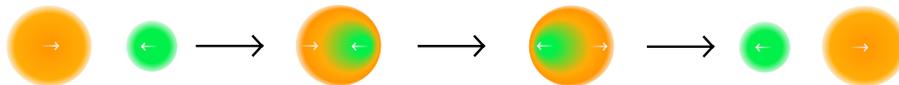


FIGURE 1.4 – Schéma de mécanisme (hypothétique) de la transparence.

Fusion

Si une collision est relativement centrale et à basse-énergie, nous sommes dans un régime où la fusion peut être possible. Que cela soit avec quelques collisions nucléon-nucléon permises, ce qui permet des transferts d'énergie cinétique et de la dissipation; ou la dissipation à 1-Corps [Blo+78], les noyaux sont freinés dans leur élan. De part la centralité, la densité issue de la superposition des deux noyaux est grande, les noyaux se recouvrent et l'attractivité de l'interaction nucléaire joue son rôle. De fait, le noyau formé

va osciller autour de la densité de saturation par des phases de compression et de dé-compression jusqu'à atteindre un équilibre comme illustré sur la figure 1.5. Cependant, ce noyau de fusion formé peut avoir une durée de vie plus ou moins longue en fonction de sa composition. Si ces informations sont fondamentales pour sa détection expérimentale, la radioactivité et la durée de vie de ces noyaux formés ne rentreront pas dans le cadre de cette thèse. Car si l'ordre de grandeur de nos réactions est de $10^{-21} s$, cette durée est inférieure au temps de fission ou d'émission (radioactivité) des noyaux.

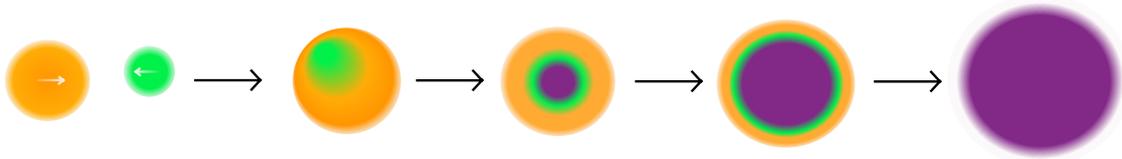


FIGURE 1.5 – Schéma de mécanisme de la fusion à basse-énergie.
La couleur mauve signifie un mélange de la matière nucléaire issue des deux noyaux.

Profondément inélastique

Dans la même gamme d'énergie que précédemment (moins d'une dizaine de MeV/A), mais pour des paramètres d'impact plus haut, les réactions sont dites "profondément inélastiques". Il y a une forme de compétition entre la zone de recouvrement des deux noyaux qui est relativement freinée par les quelques collisions nucléon-nucléon permises et la périphérie des noyaux qui conservent leur élan. De part la viscosité de la matière nucléaire, on se retrouve avec un noyau composé avec un grand moment angulaire comme illustré sur la figure 1.6. C'est une phase purement dynamique et en fonction du système, ce noyau composé peut finir en noyau de fusion ou se séparer en deux fragments.

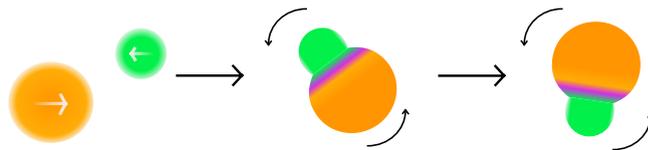


FIGURE 1.6 – Schéma de mécanisme de la formation d'un quasi-noyau.
Celui-ci possède deux centres et un fort moment rotationnel.

Ce quasi-noyau possède un grand moment angulaire, autrement dit une grande énergie rotationnelle qu'il va chercher à dissiper. Cela va nécessairement passer par de l'émission de nucléons. Si l'énergie est trop grande, le quasi-noyau peut se fragmenter en deux morceaux. Ce n'est pas exactement une fission, car il y a une bonne mémoire de la voie d'entrée, néanmoins, durant la phase rotationnelle, il y a eu échange de matière entre les noyaux. De plus, durant cette phase, si la masse des noyaux est suffisante, il peut se former un col. C'est un lien de matière nucléonique entre les noyaux, c'est par ce col que se font les échanges de matière. Au moment de la séparation des deux noyaux, si séparation il y a, ce col peut se faire réabsorber par les deux noyaux de façon plus ou moins égale, mais il peut aussi, si le col est assez massif, former un troisième fragment. Dont la vitesse, dans le centre de masse, sera proche de zéro. La figure 1.7 illustre ce mécanisme.

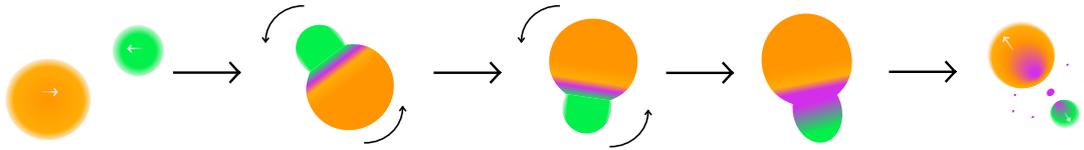


FIGURE 1.7 – Schéma de mécanisme de la formation d'un quasi-noyau suivi d'une phase de séparation en deux fragments et un possible fragment au centre issu du col.

Cependant, si l'énergie rotationnelle se dissipe suffisamment via l'émission de nucléon, les deux noyaux peuvent se rapprocher et finir par former un noyau de fusion, comme indiqué sur la figure 1.8.

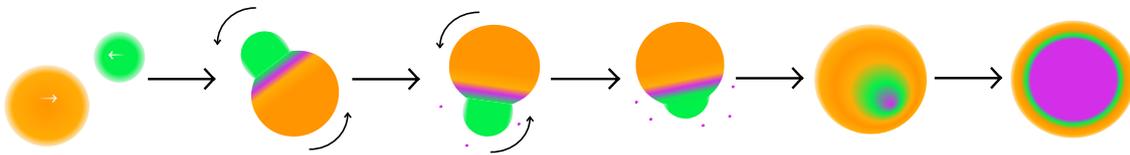


FIGURE 1.8 – Schéma de mécanisme de la formation d'un quasi-noyau suivi d'une phase de coalescence.

Ce processus de collision profondément inélastique est très riche en informations, car il permet d'étudier le transport de la matière nucléaire, mais aussi les notions de viscosité de la matière nucléaire [Dan95]. De plus, dans ce scénario-ci, on sent bien que nous sommes dans une région où la voie de sortie est très dépendante des ingrédients de départ, qui sont le paramètre d'impact, la masse des noyaux et l'énergie incidente.

Explosion

Dans le domaine des plus hautes-énergie, qui dépassent facilement plusieurs fois l'énergie de liaison par nucléon ($8MeV/A$), donc dans des énergies de plusieurs dizaines de MeV/A , si le paramètre d'impact est faible, l'énergie incidente par nucléon est transmise à plus ou moins tous les nucléons. De fait, un grand nombre de collisions nucléon-nucléon sont permises et les nucléons peuvent être émis et éjectés de toute part comme schématisé sur la figure 1.9. La violence de cette réaction peut entraîner une destruction quasi-totale des noyaux de la voie d'entrée et engendrer une vaporisation si les fragments restants sont de masse très faible. Ce cas est possible pour des paramètres d'impact très faibles, car le recouvrement doit être grand pour que les collisions nucléon-nucléon soient prédominantes par rapport à la cohésion de la force nucléaire. Néanmoins, cette vision de la collision reste très géométrique et peut être nuancée par plusieurs considérations dynamiques que l'on va détailler ensuite.

Ce scénario de collisions très centrales avec une grande énergie incidente nous intéressent pour l'exploration de l'équation d'état. En effet, le recouvrement des noyaux qui engendrent une forte densité, beaucoup d'interaction et d'échanges de matière entre les noyaux en font un cas idéal d'exploration. Ceci dit, il faut décrire le cas particulier de la dynamique des collisions centrales à ces énergies là :

- Tout d'abord, nous avons la phase d'approche.

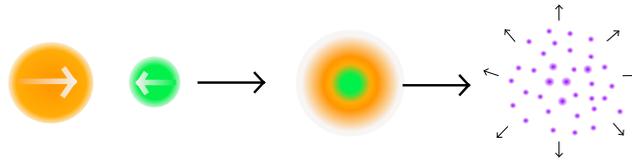


FIGURE 1.9 – Schéma de mécanisme de la vaporisation.

La centralité et l'énergie de cette réaction forme une énorme pression, la matière se disloque en de multiples fragments plus ou moins légers.

- Les noyaux se superposent, la densité est haute et quasiment à deux fois la valeur de saturation. C'est la phase de compression, la matière est très comprimée et s'échauffe. Les interactions sont nombreuses, la matière se mélange, difficile de dire s'il existe encore une mémoire de la voie d'entrée.
- Durant la phase de compression, la pression est positive, donc va s'en suivre une phase de décompression ou d'expansion. Le gaz chaud formé, va se dilater et diminuer en densité.
- Mais sous l'élan de l'expansion, la densité va diminuer encore et peut atteindre des valeurs relativement faibles, où la pression peut être négative, c'est la région instable de la spinodale. Ce régime instable présente des fluctuations non négligeables et la matière nucléonique peut former des fragments plus ou moins gros.

Ou bien, la pression peut aussi rester positive, on n'atteint pas ce régime instable et on retombe sur la description géométrique qu'on a eu précédemment et le système se vaporise. Cela se produit pour les énergies incidentes les plus élevées. Ces possibilités sont schématisées sur la figure 1.10.

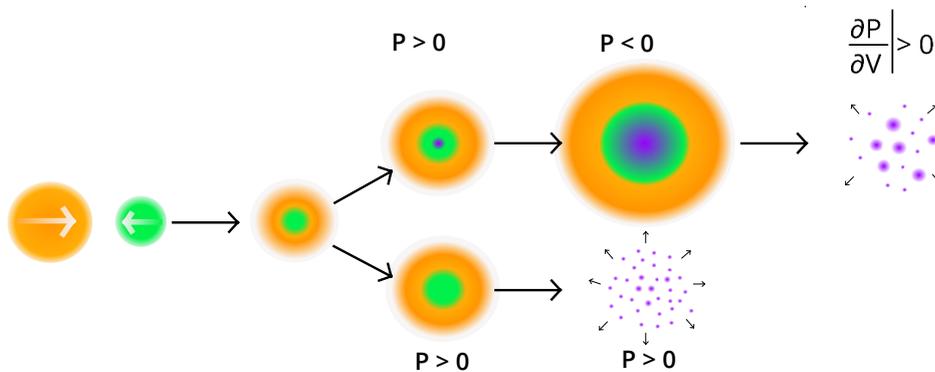


FIGURE 1.10 – Schéma des différents cas d'explosion en fonction du comportement de la pression. [Sur98]

Ensuite, dans le cas où des fragments sont formés, il peut se passer deux scénarii les plus probables. Soit les fragments acquièrent une impulsion suffisante et diffusent, on a donc un système qui s'est fragmenté. Soit l'impulsion des fragments est insuffisante, l'attraction nucléaire est plus forte et les fragments se ré-agrègent. On forme alors un noyau de quasi-fusion. Cela se produit pour les énergies incidentes moyennes.

Participants-spectateurs

Et enfin, pour les réactions les plus énergétiques (de la centaine de MeV/A et plus) et périphériques, on parle du cas des réactions "participants-spectateurs". Il s'agit de la figure 1.11 Dans ce cas là, on retrouve l'image de la collision profondément-inélastique, mais l'énergie incidente est telle que l'élasticité de la matière nucléaire ne suffit pas pour garder la cohésion du noyau.

La partie formée par le recouvrement des deux noyaux est riche de collisions nucléon-nucléon et est donc fortement ralentie, voire stoppée. C'est la partie "participants".

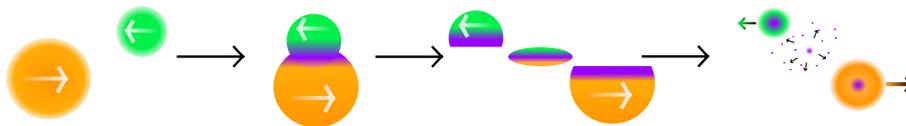


FIGURE 1.11 – Schéma du mécanisme "participants-spectateurs".

Les parties périphériques, qui n'interagissent peu, continuent dans leur élan, échauffées et forcément ralenties par l'interaction centrale et le déchirement du noyau. Le quasi-projectile et la quasi-cible qui ont peu interagis, sont des bons indicateurs de la dynamique de la collision. Ces sont les "spectateurs".

Zoom sur les réactions centrales aux énergies intermédiaires

Notre intérêt se portera surtout sur les collisions centrales aux énergies basses et intermédiaires (cercle violet figure 1.3), c'est à dire de la dizaine à la centaine de MeV par nucléon. Dans ce régime, les scénarii qui nous intéressent sont :

- La fusion complète ou incomplète
- Les collisions binaires dissipatives (qui pourront éventuellement faire intervenir la formation d'un col pour les systèmes les plus lourds
- Les collisions quasi-élastiques (plutôt périphériques).
- La vaporisation (pour les systèmes légers aux *hautes* énergies)

Nous reviendrons sur ces scénarii de réactions dans le dernier chapitre sur les résultats de notre code de simulation.

La description des différentes mécaniques de collision donne un aperçu global du comportement de la matière nucléaire. Mais cette description reste assez qualitative, en effet, il est assez aisé de conceptualiser le comportement de la matière nucléaire si l'on a l'image de deux gouttes d'un fluide quasi liquide qui collisionnent. D'ailleurs, les premières approches pour décrire la dynamique d'une collision étaient macroscopiques et l'on s'aidait de collision de gouttes d'eau [GJ84] et de modèles hydrodynamiques. Cependant, les phénomènes qui régissent les dynamiques sont beaucoup plus complexes et l'on ne peut se limiter à ces descriptions macroscopiques, nous devons les compléter de modèles plus fins, avec des approches microscopiques.

1.4 État de l'art de la modélisation nucléaire

Les différents mécanismes de réactions dans les collisions d'ions lourds sont le résultats de processus dynamiques. Comme on l'a dit précédemment, les expériences n'ont

pas la possibilité de faire un suivi dynamique de la collision, de fait, toutes les hypothèses formulées sur le déroulement d'une collision sont issues de modèles. Dans cette partie, nous allons aborder et lister les principales approches de modélisation nucléaire. En commençant tout d'abord par la modélisation des noyaux : la description de leurs états fondamentaux, de leurs structures et les différentes approches qui permettent de déduire ces informations. Ensuite nous aborderons la dynamique nucléaire. La liste d'approches qui existent n'est pas exhaustive et chaque approche ne fera pas lieu d'une description détaillée.

1.4.1 Statique des noyaux

Nous aborderons ici les modèles dont l'objectif est de modéliser les noyaux dans leur état fondamental ou légèrement excité. Ces modèles peuvent avoir plusieurs niveaux de précision en fonction de ce que l'on cherche à obtenir. Certains modèles visent à décrire le plus finement possible la structure en couches des noyaux. D'autres modèles visent plus simplement à décrire la structure du noyau et reproduire des observables macroscopiques comme le rayon ou l'énergie de liaison.

Modèle de la Goutte(lette) Liquide - GL/LDM

Le modèle de la goutte liquide est historiquement un pionnier [BW39]. Comme son nom l'indique, l'hypothèse de base consiste à considérer que le noyau nucléaire est une goutte liquide. C'est une approche macroscopique, dont l'idée de base vient du fait que la matière nucléaire a des propriétés de compressibilité quantitativement proche des liquides. De plus, cette goutte, comme de l'eau, a des bords francs et de densité constante. De fait, on définit son rayon comme : $R = r_0 A^{\frac{1}{3}}$ avec $r_0 = 1.2[fm]$ une constante empirique et A le nombre de nucléons. La formule associée à ce modèle est celle de Bethe-Weizsäcker [BB36 ; Wei35] qui décrit l'énergie par nucléon pour un noyau :

$$B(N, Z) = a_V + a_S A^{\frac{2}{3}} + a_C \frac{Z^2}{A^{\frac{1}{3}}} + a_I \frac{(N - Z)^2}{A} - \delta(A) \quad (1.42)$$

La force de cette formule est sa redoutable efficacité avec des termes relativement simples. En effet, chaque terme apporte une contribution physique à l'équation : terme de volume, de surface, coulombien, d'asymétrie et d'appariement. Ce dernier terme est le seul qui provient de considération de la nature quantique des noyaux. En effet, en fonction de la composition du noyau (nombre pair ou impair), l'énergie de liaison peut être plus ou moins élevée. On retrouve ici aussi des termes que l'on peut apparenter à des contributions de l'équation d'état. Bien que la formule de Bethe-Weizsäcker ne soit pas définie en fonction de la densité, on retrouve bien le terme de volume qui s'apparente à l'énergie de volume vu dans l'équation 1.21. De même, le terme d'asymétrie a_I qui représente la contribution asymétrique s'apparente à l'énergie de symétrie J vu à l'équation 1.36. Ces termes sont ajustés sur les mesures et ces paramètres sont affinés régulièrement [RGO10].

Le modèle permet aussi d'étudier les déformations des noyaux (avec des approches géométriques), la prédiction des barrières de potentiel, l'émission alpha, la fission et la demi-vie des noyaux [RGO10 ; Zha+06 ; RZ08].

Et enfin, ce modèle a reçu plusieurs évolutions, notamment : "Gouttelette Liquide" [Mye77 ; RR09]. Celle-ci ajoute la possibilité de prendre en compte des densités locales,

on se rapproche d'un modèle microscopique, mais la philosophie reste la même. Dans ce modèle là, la formule de Bethe-Weizsäcker est développée et fait apparaître de nombreux paramètres à ajuster.

(Approximation de) Hartree-Fock - HF

L'introduction de potentiel extérieur dans le modèle en couches a donné une autre vision du noyau, que ses constituants sont indépendants. L'idée de Hartree-Fock est que les nucléons se meuvent indépendamment dans un potentiel moyen, créé par les autres nucléons. Le point de départ étant toujours l'équation de Schrödinger $H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$. De l'hypothèse énoncée précédemment, on va approximer notre Hamiltonien comme la somme des Hamiltoniens par particule, car chaque particule est supposée indépendante.

$$H^{HF} = \sum_{i=1}^A h(i) \quad (1.43)$$

Les fonctions propres de ce potentiel ont pour valeurs propres les énergies les plus basses E_0^{HF} comme approximation de la fonction exacte de l'état fondamental. Et comme fonction propre, on utilisera un déterminant de Slater $\Phi(1\dots A)$ qui est très cohérente pour des objets indépendants.

$$|HF\rangle = |\Phi(1\dots A)\rangle = \prod_{i=1}^A a_i^+ |-\rangle \quad (1.44)$$

On retrouve a_k^+ (et a_k) les opérateurs fermioniques, qui sont associés aux fonctions d'onde à une particule ϕ_k , qui seront les fonctions propres des Hamiltoniens à 1-particule h . On représentera le déterminant de Slater avec la matrice densité ρ à 1-particule, qui possède comme propriété $\rho^2 = \rho$ (ce qui implique la propriété que ses valeurs propres sont 0 ou 1 et que $|HF\rangle$ est un déterminant de Slater).

Le concept-même de la méthode de Hartree-Fock consiste à minimiser l'énergie avec des fonctions d'ondes à 1-particule (avec un principe variationnel, qui est une résolution approchée du problème aux valeurs propres), ce qui, en outre, revient à diagonaliser la matrice densité, tout en respectant la propriété $\rho^2 = \rho$ et $Tr\rho = A$. La suite de problème reste à expliciter H^{HF} et l'énergie E^{HF} associée.

En explicitant l'Hamiltonien H^{HF} à N-Corps en seconde quantification et à l'aide du théorème de Wick(Annexe C4 [RS80]), on aboutit sur l'expression de l'énergie de Hartree-Fock comme fonction de la densité à 1-Corps :

$$E^{HF}[\rho] = Tr(t\rho) + \frac{1}{2}Tr[Tr(\rho\bar{v}\rho)] \quad (1.45)$$

On retrouve l'opérateur cinétique t et un deuxième terme qui traduit l'interaction moyennée de tous les nucléons sur un autre. Dans ce terme on a \bar{v} , qui est l'interaction nue antisymétrisé. De fait, on simplifiera cette expression par : $h = t + \Gamma$, où Γ est nommé **champ-moyen**. On aboutit alors à la-dîtes équation de Hartree-Fock :

$$[h, \rho] = [t + \Gamma[\rho], \rho] = 0 \quad (1.46)$$

Dans cette sobriété réside toute la richesse et la complexité de résolution de cette approche. De plus, on peut observer l'auto-cohérence du problème. En effet, l'Hamiltonien dépend de la densité et celle-ci dépend de lui. Ce système peut être résolu avec une méthode itérative, où la condition initiale doit être choisie avec un modèle phénoménologique acceptable (approche de Thomas-Fermi pour la partie cinétique et formulation empirique pour le potentiel nucléaire par exemple).

Cette partie sera détaillée plus tard dans le chapitre suivant car la méthode de Hartree-Fock peut constituer la condition initiale pour sa version dynamique, Hartree-Fock dépendant du temps.

Hartree-Fock-Bogoliubov - HFB

Le modèle de Hartree-Fock est une approche avec l'hypothèse de particules indépendantes. C'est ce formalisme qui introduit le "champ-moyen". Cette méthode permet de décrire la structure globale et certaines propriétés. Cependant, la prise en compte des corrélations particules-particules à courte portée n'est pas prise en compte. L'approximation de Hartree-Fock-Bogoliubov est la combinaison de la méthode de Hartree-Fock mais aussi de la méthode BCS (Barden-Cooper-Schrieffer) [BCS57]. Cette seconde méthode, non détaillée ici consiste à traiter les corrélations particule-particule avec l'introduction d'un *potentiel d'appariement*. Ce potentiel constituant une contribution de courte portée des interactions.

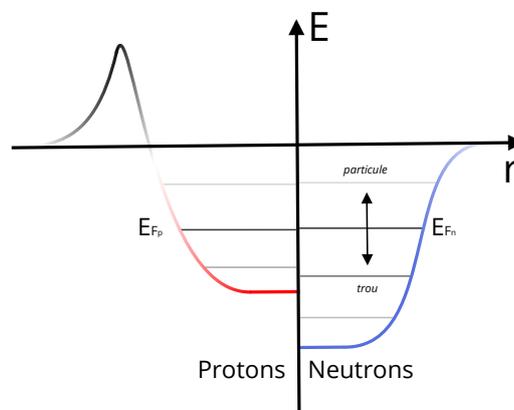


FIGURE 1.12 – Schéma du principe de l'effet "particule-trou".

Ceci illustre un puits de potentiel nucléaire pour neutrons et protons (ainsi que la bosse coulombienne). Un nucléon d'un niveau sous le niveau de Fermi passe sur un niveau plus élevé.

Ce modèle utilise des *quasi-particules*, celles-ci sont définies comme un mélange statistique de d'états "particules" et d'états "trous" dont les amplitudes de l'un des états ou de l'autre dépend du niveau énergétique. On trouve des états "**particules**" au-dessus le niveau de Fermi ($\epsilon > \epsilon_F$) et des états "**trous**" en dessous le niveau de Fermi ($\epsilon \leq \epsilon_F$). Ce raisonnement, peu intuitif au premier abord, est à réfléchir en terme d'opérateur. En effet, quand une particule va vers un niveau au delà le niveau de Fermi, on crée bien un état-trou, en dessous le niveau de Fermi, et un état-particule au dessus de celui-ci. Cela

est illustré sur la figure 1.12.

La méthode HFB reste très utilisée [DFT84; Ter+96] pour l'étude des noyaux proches de leur état fondamental, pour la description de leurs niveaux et structures. Si le formalisme reste le même, les forces effectives utilisées se perfectionnent, notamment avec la force de Skyrme [Sky58] ou de Gogny [Gog75].

Approximation des phases aléatoires (en Quasi-particules) - APA(Q)/(Q)RPA

Néanmoins, que cela soit HF ou HFB, ces modèles décrivent bien les états fondamentaux et quelques niveaux excités du noyau. L'APA (ou RPA) va plus loin que ces approches et cherche à décrire les excitations des noyaux au delà des excitations particule-trou ou quasiparticule-quasiparticule qui ne peuvent être reproduites avec les approches précédentes (HF, HFB ou Modèle en couches).

Ces excitations, qu'il nous faut décrire, sont appelées résonances géantes. Ce sont des modes d'oscillations de la matière nucléaire, qui peuvent être, soit isoculaire : la densité totale oscille (dilatation-contraction ou déformation oblate-prolate), soit isovectorielle : les densités de protons et de neutrons peuvent osciller en opposition de phase sur les mêmes modes que la densité totale (dilatation, contraction, déformation). Elles peuvent aussi être électriques ou magnétiques, celles-ci correspondent à des oscillations en spins identiques ou opposés. Ces différents modes sont résumés dans la figure 1.13

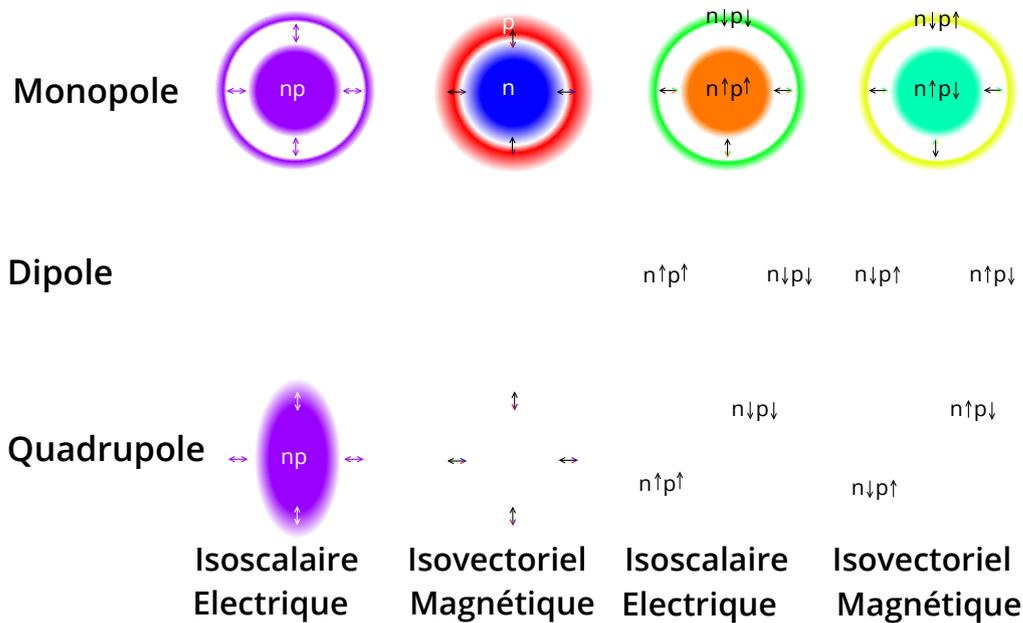


FIGURE 1.13 – Récapitulatif des différents modes d'excitations : monopolaire, dipolaire et quadrupolaire.

Dans les cas des oscillations isoculaires ou isovectorielles et/ou électriques ou magnétiques. Ce schéma est inspiré de *N.Harakeh et A. Van Der Woode. Giant resonances, fundamental high-frequency modes of nuclear excitation. Oxford science publications (2001).*

[HW01]

Ces processus sont évidemment dynamiques, de fait, RPA est une approche dynamique et reste évidemment très lié au modèle HF. Cette approche permet aussi une utilisation de forces dépendantes de la densité (Skyrme par exemple) ce qui en fait une approche type champ-moyen. Une phrase qui résume bien ce qu'est la RPA nous vient du [RS80] : "L'approximation RPA n'est rien de plus que la limite aux faibles amplitudes [aux équations] de l'approche champ-moyen dépendante du temps" dont nous parlerons plus tard. Quant au modèle *quasi-particle*-RPA, il s'agit d'une évolution du modèle dont le rôle est de pouvoir utiliser des forces plus sophistiquées, permettant de prendre en compte des processus plus complexes et fins, comme les résonances quadrupolaires ou la description de noyaux rares et très exotiques.

1.4.2 Dynamique nucléaire

Dans cette partie, nous allons nous intéresser aux modèles dynamiques qui existent pour décrire la dynamique nucléaire. Nous avons vu précédemment les approches statiques (voire dynamique pour la RPA) qui peuvent constituer une condition initiale aux différents formalismes qui vont être décrit. En effet, si l'on s'intéresse à la dynamique des noyaux (en collision ou non) il nous faut une condition initiale assez réaliste. Néanmoins, certaines conditions initiales peuvent ne pas être des noyaux. Dans le cas de la matière infinie, il peut s'agir d'un gaz de nucléons. On y reviendra dans une autre partie.

Hartree-Fock dépendant du temps - HFDT/TDHF

On retrouve le formalisme de Hartree-Fock vu précédemment. Cette fois-ci, l'idée est de propager dans le temps un état de départ :

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-iHt/\hbar} |\Psi(0)\rangle \quad (1.47)$$

où H est notre Hamiltonien à N-Corps. On va donc retrouver toutes les approximations et outils que l'on a utilisé dans la partie HF, dont l'utilisation d'un déterminant de Slater. On considérera d'ailleurs que ce déterminant de Slater conserve ses propriétés en fonction du temps. Les particules sont toujours considérées comme indépendantes (image du **champ-moyen**) et n'interagissent pas, de fait le principe de Pauli est toujours respecté. Donc, le formalisme TDHF est très approprié pour la description dynamique des phénomènes à basse-énergie comme les résonances géantes, la fission ou la fusion. Il n'y a, à priori, rien dans le fait de propager les états issus de la statique qui puisse engendrer une violation du principe de Pauli. De fait, tant que nous restons dans ces basses-énergies, les corrélations à deux-corps peuvent être négligées. Donc la densité à deux-corps s'exprimera comme un simple produit antisymétrisé de densité à un-corps (le détail de ce calcul sera détaillée dans le chapitre 2). On a alors :

$$i\hbar\dot{\rho} = [h, \rho] \quad (1.48)$$

On retrouve alors l'équation de HF 1.46 à l'équilibre. Et $h = t + \Gamma$ l'Hamiltonien à 1-corps comme en HF. Pour la suite, on utilisera le principe variationnel [KK76] pour obtenir les équations d'évolution des fonctions d'onde à 1-particule du système. On définit le

Lagrangien :

$$\mathcal{L} = \langle \Phi(t) | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H | \Phi(t) \rangle \quad (1.49)$$

On retrouve notre déterminant de Slater $|\Phi(t)\rangle$ des fonctions d'ondes à 1-Corps $\phi_1(\mathbf{r}, t), \dots, \phi_A(\mathbf{r}, t)$ toujours dans la même logique que Hartree-Fock. Ce calcul sera détaillé dans un prochain chapitre avec une méthode alternative.

Hartree-Fock dépendant du temps étendu- HFDTE/ETDHF

Néanmoins, les équations TDHF ont quelques limites. D'une part, ces équations sont totalement réversibles dans le temps, ce qui ne peut pas donner lieu à une relaxation. D'autre part, si l'on a supposé les effets à 2-Corps négligeables, ils peuvent contribuer dynamiquement, voire être très importants dans des processus à plus haute-énergie tels qu'on cherche à les décrire. De fait, les équations TDHF sont vite limitées aux énergies incidentes relativement faibles lors des collisions d'ions lourds. Donc, si l'on a supposé que l'évolution dynamique ne changerait pas la nature des déterminants de Slater, cela n'est vrai que pour des temps courts où des corrélations n'ont pas encore eu lieu. Les effets à 2-corps vont altérer la nature des déterminants de Slater. Il nous faut donc traiter ces effets *au-delà* de 1-corps.

La première méthode pour aller *au-delà* du champ-moyen est de prendre en compte les ordres supérieurs. Pour cela, on va utiliser la hiérarchie Bogolyubov-Born-Green-Kirkwood-Yvon [Bog46; HSG46; Kir46; Yvo35] (dont le calcul sera détaillé dans le chapitre 2) qui est un système d'équations différentielles couplées où chaque ordre n définit l'équation différentielle qui régit l'opérateur densité à n - corps.

$$i\hbar\dot{\rho}_1 = [t_1, \rho_1] + Tr_2([V_{12}, \rho_{12}]) \quad (1.50)$$

$$i\hbar\dot{\rho}_{12} = [t_1 + t_2, \rho_{12}] + [V_{12}, \rho_{12}] + Tr_3([V_{13} + V_{23}, \rho_{123}]) \quad (1.51)$$

...

$$i\hbar\dot{\rho}_{1\dots k} = \left[\sum_{i=1}^k (t_i + \sum_{j<i}^k V_{ij}), \rho_{1\dots k} \right] + \sum_{i=1}^k Tr_{k+1}([V_{ik+1}, \rho_{1\dots k+1}]) \quad (1.52)$$

Si l'on réalise une troncature à l'ordre 1 du système d'équations BBGKY, on retrouve l'équation de TDHF à 1-Corps. Une première approche étendue, consiste à prendre l'ordre $n + 1$, soit l'ordre 2. Si l'on s'intéresse aux opérateurs de *corrélations*, qui représente une mesure de l'écart avec une description en particules indépendantes (description à 1-corps), pour celui à deux corps :

$$C_{12} = \rho_1 \rho_2 - \widetilde{\rho_1 \rho_2} \quad (1.53)$$

Pour TDHF, on avait supposé que $\widetilde{\rho_1 \rho_2} = 0$, ici, vu qu'on souhaite prendre en compte l'ordre supérieur, ce terme est conservé. Donc on s'intéresse à l'opérateur à 3-Corps qui intervient dans le dernier terme de l'ordre-2 de la hiérarchie BBGKY :

$$C_{123} = \rho_1 \rho_2 \rho_3 - \widetilde{\rho_1 C_{23}} - \widetilde{\rho_2 C_{13}} - \widetilde{\rho_3 C_{12}} - \widetilde{\rho_1 \rho_2 \rho_3} \quad (1.54)$$

L'opérateur *tilde* est là pour signifier qu'on prend en compte l'anti-symétrisation. De fait, on peut utiliser un opérateur de permutation P_{ij} entre les états i et j . On obtient alors ce système d'équations :

$$i\hbar\dot{\rho}_1 = [t_1, \rho_1] + Tr_2([V_{12}, \rho_{12}]) \quad (1.55)$$

$$\begin{aligned} i\hbar\dot{C}_{12} = & [h_1 + h_2, C_{12}] + (1 - \rho_1 - \rho_2)V_{12}\widetilde{\rho_1\rho_2} - \widetilde{\rho_1\rho_2}V_{12}(1 - \rho_1 - \rho_2) \\ & + (1 - \rho_1 - \rho_2)V_{12}C_{12} - C_{12}V_{12}(1 - \rho_1 - \rho_2) \\ & + Tr_3[V_{13}, (1 - P_{13})\rho_1 C_{23}(1 - P_{12})] \\ & + Tr_3[V_{23}, (1 - P_{23})\rho_1 C_{23}(1 - P_{12})] \\ & + Tr_3[V_{13} + V_{23}, C_{123}] \end{aligned} \quad (1.56)$$

Plusieurs approches cherchent à résoudre ce système dynamiquement. Si l'on linéarise ce système, on retombe sur les équations de RPA dont on a parlé précédemment. Le formalisme cherchant à résoudre l'équation régissant l'évolution de $C_{12}(t)$ est la *Time-Dependent-Density-Matrix* [RG84], de part les difficultés numériques, cette méthode est difficile à mettre en place.

Néanmoins, certains travaux de Born (repris dans [HSG46]) ont montré qu'en ne conservant que les deux premiers termes de l'équation de $C_{12}(t)$, ce qui revient aussi à négliger les corrélations à 3-Corps et la propagation auto-cohérente des corrélations à 2-Corps, on peut simplifier le problème et aboutir à un système solvable. Notre équation d'évolution sera d'une part, l'équation de TDHF 1.48, et d'une autre part un terme I , dit de "collision" et enfin δI un terme dit "fluctuant" :

$$i\hbar\dot{\rho}_1 = [h_1, \rho_1] + I + \delta I \quad (1.57)$$

Le terme de collision dont il sera question plusieurs fois dans cet ouvrage peut être considéré comme une projection des collisions (ou effets) à 2-Corps dans l'espace à 1-Corps (l'espace de TDHF). Le terme fluctuant δI sera discuté aussi.

Cascade Intra-Nucléaire - CIN/INC

Afin de parler de l'approche Cascade Intranucléaire, il nous faut introduire l'équation de Boltzmann.

Prenons un système classique isolé (sans champ extérieur) de N particules dans l'espace des phases, donc attribuées d'une position $\mathbf{r}_i(t)$ et d'une impulsion $\mathbf{p}_i(t)$ avec $i = 1 \dots N$. Le système complet sera décrit par une fonction d'évolution dans l'espace des phases $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$. Si l'on découpe l'espace des phases en volumes élémentaires $dV = d\mathbf{r}d\mathbf{p}$, on a alors le nombre élémentaire de particules $dN = f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)dV = f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)d\mathbf{r}d\mathbf{p}$. Ainsi, $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ représente une probabilité de présence d'une particule dans un volume élémentaire de l'espace des phases. Donc si l'on cherche à étudier la dynamique de notre système, on va avoir un premier terme dépendant du temps, donc $\frac{\partial f}{\partial t}$.

De plus, le système n'est pas figé, les particules sont en mouvement, ainsi, la population des volumes va dépendre de la vitesse des particules, d'où un terme $\frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla_r f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$. Tout ceci traite du flux de particules, leurs déplacements indépendants. Mais ce qui nous intéresse ici, c'est que ces particules vont rentrer en collision les unes avec les autres et diffuser. Comme sur un billard après avoir "cassé le triangle", on va compter les boules qui entrent et sortent d'une zone prédéfinie, ainsi, le terme qui traite des collisions I_{coll}

sera interprété comme un terme de "gain" et un terme de "perte".

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla_r f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = I_{coll} = I_{GAIN} - I_{PERTE} \quad (1.58)$$

avec pour terme de collision :

$$I_{coll} = \int d\mathbf{p}_1 d\mathbf{p}_2 d\mathbf{p}_3 W(12 \rightarrow 34) [f(\mathbf{r}, \mathbf{p}_3, t)f(\mathbf{r}, \mathbf{p}_4, t) - f(\mathbf{r}, \mathbf{p}_2, t)f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)] \quad (1.59)$$

avec $W(12 \rightarrow 34)$ le taux de transition, qui dépendra d'une section efficace différentielle $\frac{d\sigma}{d\Omega}$, formulation plus récente que celle proposée par Boltzmann [Bal75].

$$W(12 \rightarrow 34) = \frac{4}{m^2} \frac{d\sigma}{d\Omega} \delta(\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_3 - \mathbf{p}_4) \delta\left(\frac{\mathbf{p}_1^2}{2m} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m} - \frac{\mathbf{p}_3^2}{2m} - \frac{\mathbf{p}_4^2}{2m}\right) \quad (1.60)$$

Le modèle INC ou Cascade Intranucléaire consiste à traiter l'équation de Boltzmann. Ce n'est pas un traitement exacte, mais une méthode pour la résoudre où on ne traite le mouvement des participants (nucléons) qu'avec des particules "classiques" qui n'interagissent que par des collisions à deux-corps. En fonction des énergies qui nous intéressent, les collisions peuvent être élastiques (diffusion nucléon-nucléon) voire inélastiques (avec création de particules) pour les études très énergétiques. L'équation de Boltzmann dans cette configuration et cette méthode relativement simple numériquement possèdent par contre plusieurs problèmes. Le traitement physique voire quantique des particules n'est pas toujours bien pris en compte, comme le blocage de Pauli. De plus, certaines approximations mathématiques (non détaillées ici) supposent le cas d'un gaz dilué (hypothèse du *chaos moléculaire* [Max67]) alors que c'est contradictoire avec l'approche qui consiste à traiter de nombreuses collisions, donc plutôt le cas d'un gaz dense.

Boltzmann Uehling Uhlenbeck - BUU

De fait, dans les années 30, Uehling et Uhlenbeck ont introduit une extension à l'équation de Boltzmann. Pour raffiner le blocage de Pauli (traité simplement avec des critères sur l'impulsion de Fermi dans les modèles INC), ils ont introduit un blocage sur les états finaux. De fait, le terme de collision s'exprime ainsi :

$$I_{coll} = \int d\mathbf{p}_1 d\mathbf{p}_2 d\mathbf{p}_3 W(12 \rightarrow 34) [f_3 f_4 (1 - f_1)(1 - f_2) - f_1 f_2 (1 - f_3)(1 - f_4)] \quad (1.61)$$

où f_i est toujours la fonction de distribution et i associé aux états initiaux et finaux : (1, 2, 3, 4).

Vlasov Uehling Uhlenbeck - VUU

Plus tard, Vlasov a introduit la possibilité qu'un champ extérieur, un potentiel, affecte aussi la dynamique des particules dans une cellule. Et ce champ "extérieur", pourrait aussi être traité comme champ-moyen des particules (avec des potentiels effectifs). Ainsi, si l'on couple cette amélioration et le terme de collisions affiné par Uehling et Uhlenbeck,

on a :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla_r f - \nabla_r U(\rho(\mathbf{r})) \cdot \nabla_p f = \frac{\partial f}{\partial t} + \{f, h\} = I_{coll} \quad (1.62)$$

On remarquera la similitude que l'équation de Vlasov (sans terme de collision) peut avoir avec TDHF. En effet, si l'on remplace les commutateurs de TDHF par des crochets de Poisson : $[f, g] \rightarrow \{f, g\} = \partial_r f \partial_p g - \partial_p f \partial_r g$:

$$\text{TDHF} : i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} + [\rho, h] = 0$$

$$\text{Vlasov} : \frac{\partial f}{\partial t} + \{f, h\} = 0$$

$$\text{avec} : \rho(\mathbf{r}) = \int f(\mathbf{r}, \mathbf{p}) d\mathbf{p}$$

Cette équation de Boltzmann nucléaire est traitée par plusieurs méthodes, on peut d'ailleurs regrouper BUU, Landau-Vlasov (LV) et BNV (Boltzmann Nordheim Vlasov) sous la même bannière, sous la même équation. Le but n'étant pas ici de rentrer dans les détails techniques, nous ne détaillerons pas les différentes méthodes de résolution qui différencient ces méthodes.

Dynamique Moléculaire - DM/MD

La plupart des méthodes décrites précédemment cherchent à décrire les équations régissant l'évolution dynamique à 1-Corps de l'espace des phases. De fait, on observe aussi que la frontière entre une approche quantique (ETDHF) ou semi-classique (VUU, BUU, LV, BNV) peut être mince, car les effets de champ-moyen sont prédominants dans ces approches. Une approche alternative consiste à étudier l'évolution de toutes les particules du système en interactions mutuelles : la dynamique moléculaire. En théorie, une résolution en dynamique moléculaire, pour le cas classique, mène à une description complète du problème. Mais c'est hors de portée pour le cas quantique au vu de la complexité et des degrés de liberté. L'idée est donc de substituer l'état à A-Corps $|\Psi_{1\dots A}\rangle$ par un état à A particules classiques $\{\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i\}_{i=1\dots A}$. De fait, les équations d'évolutions sont classiques :

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{r}}_i &= \frac{\partial H_C}{\partial \mathbf{p}_i} \\ \dot{\mathbf{p}}_i &= -\frac{\partial H_C}{\partial \mathbf{r}_i} \end{aligned} \quad (1.63)$$

Ainsi, une connaissance de l'Hamiltonien classique à A-Corps H_C suffit à obtenir une description complète du système. Donc, on peut décrire toutes les corrélations entre particules, mais tout cela reste purement classique, ce qui constitue une limite de cette approche. Mais différentes améliorations ont permis de prendre en compte le caractère quantique de la physique nucléaire pour décrire les noyaux dans les collisions d'ions lourds. D'ailleurs, l'approche MD a donné naissance à des nombreuses approches et modèles : QMD [Aic91], iQMD [Har+89], AMD [Ono+92], FMD [Fel90], CoMD [PMB01], UrQMD [Bas+98].

L'utilisation de la dynamique moléculaire pour la physique des ions lourds a directement impliqué de prendre en compte certains effets quantiques. Premièrement, le principe de Pauli a été traité. Une des premières approches est de considérer un potentiel très répulsif en espace des phases afin de ne pas dépasser l'occupation maximale d'une cellule d'espace des phases. De fait, ce "potentiel de Pauli" s'ajoute au potentiel nucléaire et coulombien. Néanmoins, cette approche intuitive pose question sur la nature même du principe de Pauli. Cet effet n'est pas une interaction à proprement-dit, c'est une propriété intrinsèque de tous les fermions et cet effet n'a pas vraiment de "portée".

Dynamique Moléculaire Quantique - DMQ/QMD

Une des approches les plus réputés en dynamique moléculaire reste QMD (et son petit frère iQMD). C'est une alternative aux approches BUU pour la description de la dynamique nucléaire des collisions d'ions lourds. La première spécificité de QMD est sa définition de ses "particules classiques". Celles-ci possèdent une taille, une distribution de Dirac dans l'espace des impulsions, cela en fait des paquets d'ondes de type gaussiens (avec L un rayon classique de nucléon) :

$$\psi_i(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \frac{1}{(2\pi L)^{3/4}} \exp \left[-\frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{0i(t)})^2}{4L} \right] \exp(i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}) \quad (1.64)$$

De fait, on va retrouver des expressions de potentiels effectifs déjà utilisés dans les approches type *champ-moyen* ou semi-classiques. Deuxième particularité, QMD comporte un terme de "collision" sensé reproduire des effets d'ordres supérieurs (approche utilisée en BUU voire ETDHF vu le formalisme des observables à 1-Corps). Paradoxalement, QMD utilise une approche dynamique moléculaire, une approche classique qui permet de traiter théoriquement toutes les corrélations classiques d'ordres supérieurs. Malgré cela, QMD comporte ce terme de collision, qui traite les corrélations résiduelles, qui est clairement inspiré de BUU alors que les formalismes diffèrent.

Donc, on remarque qu'on a une approche dynamique moléculaire qui emprunte beaucoup des différents ingrédients de BUU. On retrouve le potentiel de Skyrme dans le formalisme de champ-moyen, mais aussi le terme de collision à deux-corps (type Uehling-Uhlenbeck). La dernière version de QMD, nommé iQMD introduit des effets d'asymétrie en isospin du potentiel de Skyrme [Sky58].

Dynamique Moléculaire Fermionique/Antisymétrisée - DMF/FMD et DMA/AMD

Face aux questions sur le formalisme de QMD, d'autres modèles du type *dynamique moléculaire* ont vu le jour. L'état à A-corps $|\Psi_{1\dots A}\rangle$ est défini comme un déterminant de Slater à 1-Corps $\mathcal{A}_{1\dots A} (\prod_{i=1}^A |\phi_i\rangle)$ (qui est un aspect commun avec Hartree-Fock). Les états $|\phi_i\rangle$ sont des paquets d'ondes gaussiens localisés et paramétrés avec une position et impulsion moyenne ($\langle \mathbf{r}_i \rangle, \langle \mathbf{p}_i \rangle$), avec des largeurs (en position) $\sigma_i(t)$.

Les équations de mouvement sont obtenues avec un principe variationnel, comme TDHF, qui donne trois équations d'évolution : pour $\langle \mathbf{r}_i \rangle, \langle \mathbf{p}_i \rangle$ et σ_i . Vu que les objets utilisés sont des déterminants de Slater (qui implique des propriétés d'anti-symétrisation), les paramètres ne sont pas directement des positions (ou impulsions) de nucléons, contrairement aux approches de dynamique moléculaire classiques. Ceci constitue la base commune d'AMD et de FMD.

La différence est que dans FMD, la contribution du potentiel à l'Hamiltonien est simplifiée et se construit sur deux gaussiennes [Fel90]. Pour aller plus loin, AMD ajoute à FMD un terme à 3-Corps au potentiel ainsi que les collisions à 2 corps exactement comme QMD. Cependant avec AMD et FMD, vu que les positions traitées ne sont pas des nucléons, il y a un passage par une reconstruction des coordonnées classiques des nucléons.

D'un point de vue formalisme, force est de constater que FMD est une approche qui ressemble à TDHF. On retrouve bien la même idée dans la construction des états utilisés, on pourrait conclure que FMD constitue une description complémentaire ou un cas particulier de TDHF, dans un sous-espace particulier, celui de la construction de la base des états de départ de FMD. De plus l'utilisation du terme de collision type *BUU* dans AMD semble être une approche pour du E-TDHF. De fait, on peut se poser la question du gain d'une approche particulière (type dynamique moléculaire) par rapport à du TDHF ou du E-TDHF qui peuvent être résolus aussi numériquement.

Les deux prochaines parties sont en rupture totale avec l'approche dynamique moléculaire. Elles constituent une alternative à l'équation de Boltzmann et à TDHF.

Boltzmann Langevin - BL

L'approche de Boltzmann-Langevin est une extension stochastique aux approches Boltzmann que nous avons vu précédemment. Pour appréhender en quoi le stochastique peut être introduit dans ces modèles, on peut s'aider de l'idée du mouvement brownien [Ein05].

Celui-ci définit le déplacement, aléatoire, d'une particule massive (ou lente) dans un bain de particules légères. On considérera alors que l'évolution globale (via le terme de collision) sera lente par rapport à l'agitation du bain thermique. De fait, on va supposer que le terme de collision représente l'effet moyen des interactions microscopiques et il faudra le compléter par un terme supplémentaire de variation rapides. Donc on va compléter l'équation de Boltzmann :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = I_{coll} + \delta I_{coll} \quad (1.65)$$

Ce terme fluctuant est localisée en espace et le processus doit être Markovien (mémoire courte), de la même façon que les collisions du terme de collision. Le soucis qui peut se présenter, c'est que tout cela s'applique aisément dans un cas linéaire, mais pour les équations de Boltzmann dans le cas nucléaire, la linéarité n'est plus. De fait, on va devoir supposer que sur des temps-courts les processus sont linéaires, afin que cette approche avec le mouvement Brownien garde son sens. On a donc un processus fluctuant dont l'intervalle de temps caractéristique τ_{BL} qui doit être bien plus court que l'évolution globale $\tilde{\tau}$, mais aussi plus long que le temps d'une collision τ_{coll} [Sur95] (qui est quasi-instantané) :

$$\tau_{coll} \ll \tau_{BL} < \tilde{\tau} \quad (1.66)$$

Cette hypothèse, nous permet de faire évoluer la troncature que l'on avait faite dans la hiérarchie BBGKY de telle sorte que :

$$\rho_{12}(t_0) = \rho_1(t_0)\rho_2(t_0) + \delta\rho_{12}(t_0) \quad (1.67)$$

$$\text{avec la condition que : } \langle \delta\rho_{12}(t_0) \rangle_{\tau_{BL}} = 0 \quad (1.68)$$

Cette condition est plus permissive que $\delta\rho_{12}(t_0) = 0$, car cela permet d'introduire (ou de restaurer) les corrélations de la matrice densité, tout en les faisant disparaître en moyenne, mais sur un intervalle de temps caractéristique. Car notre approximation ne nécessite un comportement linéaire que sur cet intervalle de temps. De fait, la condition sur ce temps caractéristique est très importante. Ainsi, la dernière étape consiste à dire que le traitement de ce terme fluctuant peut être fait de façon stochastique de part les différentes hypothèses effectuées et le chemin suivi. Enfin, l'équation de Boltzmann-Langevin peut s'écrire de la façon suivante :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \{f, h\} = I_{coll}^{UU} + \delta I_{coll}^{UU} \quad (1.69)$$

On retrouve l'équation de Boltzmann, avec le terme de collision de Uehling-Uhlenbeck et un terme fluctuant (de moyenne nulle) et dont il contribue sur un temps caractéristique τ_{BL} . Les approches BL constituent une réelle approche à la description de la physique nucléaire, la prise en compte des fluctuations permet d'aller au delà des descriptions de champ-moyen étendu et ainsi de décrire des processus complexes comme la multifragmentation et la fission [Nap17].

Hartree-Fock dépendant du temps stochastique - HFDTS/STDHF

De même que pour l'équation de Boltzmann, les équations du type TDHF peuvent avoir une extension stochastique. Cette approche repose sur deux concepts. Le premier consiste en un traitement perturbatif sur l'interaction d'ordre supérieur (2-Corps), mais sur un temps adapté (comme pour Boltzmann-Langevin). Secondement, une projection en déterminants de Slater des états corrélés issus des corrélations de l'ordre supérieur, traitées de façon perturbative. De la même façon que pour BL, on peut borner ce temps caractéristique τ_{STDHF} entre le temps des interactions τ_{coll} , et le temps caractéristique du champ-moyen τ_{MF} [Sur95] :

$$\tau_{coll} \ll \tau_{STDHF} \ll \tau_{MF} \quad (1.70)$$

La condition impose que le champ-moyen soit prédominant et de variation lente. Ce qui est le cas en TDHF pur. De plus, il faut que les interactions résiduelles (d'ordre supérieur) soient assez fréquentes pour qu'on puisse les traiter de façon statistique. L'idée, c'est de faire évoluer un système non-corrélé de la voie d'entrée (condition initiale) entre un instant t et $t + \tau_{STDHF}$ avec des interactions résiduelles, cela mène vers un état corrélé. Et on définit cet état corrélé comme une superposition d'états non-corrélés (des déterminants de Slater).

Et une fois à $t + \tau_{STDHF}$, on tire aléatoirement un état non-corrélé et on le propage avec les interactions résiduelles. Et ainsi de suite. Cette ensemble de trajectoires (qui est très très grand!) constitue l'ensemble des solutions STDHF. Le caractère stochastique de STDHF opposé au déterminisme de TDHF est illustré sur la figure 1.14.

Le net avantage de STDHF par rapport à Boltzmann-Langevin est sa clarté. En effet, STDHF ne nécessite pas de distinctions des effets entre le terme de collisions et de fluctuation. De fait, on crée réellement des fluctuations de champ-moyen.

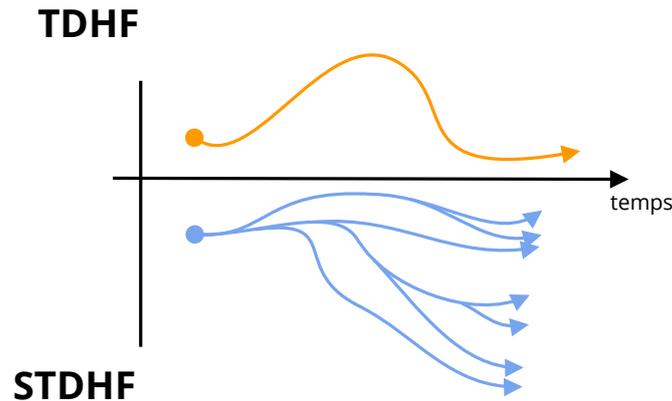


FIGURE 1.14 – Schéma de propagation de l'état dans le temps entre TDHF et STDHF.

Ce schéma illustre l'opposition entre le caractère déterministe de TDHF et stochastique de STDHF *Stochastic quantum dynamics beyond mean-field -Lacroix (2014)*

Nous avons parcouru les différentes grandes approches de modélisation qui existent à ce jour. Premièrement les approches statiques, qui consistent à décrire la structure des noyaux dans leur état fondamental. On remarquera que les approches macroscopiques (Goutte Liquide) et microscopiques (Hartree-Fock..) ne sont pas forcément opposés mais plutôt complémentaires. Le modèle Goutte-Liquide constitue une base solide, aux premiers abords plus aisée, mais redoutablement efficace. Il répond à des problématiques physiques comme les déformations et les phénomènes de fission, ce qui permet aussi de calibrer et de comparer la qualité des modèles microscopiques, mais aussi d'apporter des éléments de lien avec l'équation d'état. Deuxièmement, nous avons listé les approches dynamiques. Mais cette liste n'est pas complète, nous n'avons pas explicité les approches purement statistiques [Gro84], hydrodynamiques [BT81] ou géométriques [LVLD04]. Non pas que celles-ci soient peu intéressantes ou moins efficaces, mais elles ne rentrent pas dans la même vision de la modélisation nucléaire. En effet, nous avons cherché à montrer les deux grandes familles qui existent : les équations de transport type Boltzmann ou champ-moyen et les dynamiques moléculaires (classiques ou quantiques).

1.5 Conclusion

Ce chapitre constitue une base de départ à ce manuscrit pour la compréhension générale de notre objectif, car celui-ci est multiple. Premièrement, notre travail s'inscrit dans la compréhension et la description de l'équation d'état de la matière nucléaire. Il n'est pas possible d'apporter des éléments directs à cette problématique de part son universalité et c'est justement la variété et la complémentarité des approches qui constituent la bonne démarche pour une compréhension complète de la matière nucléaire. Cette démarche s'étend de la description théorique aux expériences, mais s'étend aussi sur l'axe des échelles d'observation : de l'astrophysique à l'échelle nucléaire. Ce qui couvre un très large spectre.

Mais l'équation d'état est un concept assez large et doit être utilisée dans un cadre. C'est pour cela que nous avons utilisé un modèle simple, afin de montrer les applications concrètes et possibles. D'une part la matière nucléaire infinie, ce qui est un modèle simple à appréhender, mais aussi sur un cas plus général, où la composition nucléonique peut être symétrique ou asymétrique. Ces modèles nous ont fournis une palette d'observables à paramétrer et à confronter entre modèles théoriques voire avec des résultats expérimentaux.

Deuxièmement, dans ce vaste projet qu'est la description de l'équation d'état, nous nous sommes focalisés sur les collisions d'ions lourds aux énergies basses et intermédiaires. Car c'est un domaine riche de phénomènes variés et d'informations à extraire. De plus, la comparaison avec les données expérimentales en fait un terrain de modélisation parfait. L'universalité de l'équation d'état nous permettra de transposer les processus observés en collisions d'ions lourds à des modélisations de la matière nucléaire au sein des phénomènes astrophysiques par exemple. De fait, dans la partie 1.3, nous avons exploré succinctement les différents processus dynamiques qui peuvent avoir lieu pendant une collision d'ions lourds. Bien entendu, cela ne se résume pas aux six scénarii que nous avons décrit, la transition d'un cas à l'autre n'est pas abrupte et laisse place aux discussions. De plus, ces phénomènes dynamiques ne seront jamais observables tels quels, donc certains aspects seront uniquement modélisables.

Et enfin, pour décrire ces collisions d'ions lourds, nous faisons appel à la modélisation. La modélisation de la physique des ions lourds a débuté après la moitié du vingtième siècle et continue se renouveler avec des nouvelles approches depuis quelques années. Si cette durée peut paraître longue, il faut songer que le problème à N-Corps n'est pas soluble aisément sur les systèmes que l'on étudie. En effet, d'une part le nombre de participants rend un traitement analytique impossible, mais le caractère quantique des objets ne facilite en rien ce problème, bien au contraire. De fait, il faut bien prendre en compte aussi que la modélisation passe inévitablement par la technique de calcul, la mise en place a été contrainte par les moyens informatiques disponibles. Donc la modélisation nucléaire continuera de progresser théoriquement et informatique-ment conjointement. La technique laissant place aux possibilités théoriques de modélisation. Car si l'on observe la multitude d'approche, c'est souvent pour répondre à des problèmes complexes qui semblent insolubles techniquement. L'équation à N-Corps quantique est (pour le moment?) insoluble numériquement, de fait, les approches TDHF ont vu le jour. Conjointement, l'équation de Boltzmann, approche semi-classique de la modélisation nucléaire, peut être traitée directement ou via des approches classiques (modifiées) type dynamique moléculaire. En enfin, ces approches ont vu des extensions stochastiques apparaître, ce qui laisse encore des possibilités de modélisations.

Néanmoins, au regard de nos moyens informatiques actuels, un regard critique doit se poser sur certaines approches qui peuvent être dépassées. Le traitement de l'équation de Boltzmann constitue une approche très flexible pour l'exploration de méthodes de traitement de tel ou tel procédé (par exemple le terme de collision de type Boltzmann ou bien les fluctuations stochastiques). L'approche E-TDHF (voire STDHF) peut clairement être utilisée et envisagée pour la description des ions lourds et c'est cette approche qui sera décrite au long de cette thèse. De fait, on peut se poser la question de l'avantage d'approches types *dynamique moléculaire* qui sont des approches dégradées de TDHF. Un

récent travail de comparaison [Xu+16] entre modèles de transport semi-classique et modèle type dynamique moléculaire a montré des relatives similitudes de comportements entre ces approches. Il se pose alors la question de la pérennisation de la modélisation nucléaire. Quelle approche apporte le plus de flexibilité et d'exactitude voire de complétude théorique? Le véritable défi semble aussi se porter sur la description des fluctuations, qui semblent être inévitables pour la description des certains phénomènes (multi-fragmentation, fission, ..) et des approches types stochastiques [Nap17] ou au-delà du champ-moyen voient le jour.

Description des noyaux à l'état fondamental

Alcool gratuit au colloque : il rentre à l'hôtel à 20h pour terminer et répéter son talk #GorafESR

@mixlamalice 09 :34 - 1 févr. 2016

2.1 Introduction

Le principal objectif de cette thèse est la description de la dynamique nucléaire. Cependant, comme nous l'avons évoqué plus tôt, les approches dynamiques ont besoin d'une condition initiale, un point de départ. Cette condition initiale peut être de plusieurs types. D'une part, les approches qui modélisent les collisions nécessitent de décrire correctement l'espace des phases des noyaux. Pour ce qui est des approches astrophysiques microscopiques (dont on parlera succinctement), elles peuvent nécessiter un maillage de noyaux. Le cas de la dynamique nucléaire de la matière infinie (un gaz de nucléons) nécessite une distribution de densité de nucléon plus ou moins homogène. Il convient d'adapter sa condition initiale à son objectif de modélisation.

Dans le cas des collisions, les noyaux de la condition initiale peuvent être modélisés par différentes méthodes. La plupart des modèles semi-classiques type Boltzmann (BUU, BL, ...) utilisent une approche type Thomas-Fermi [Tho27 ; Fer28 ; Bet68] pour leurs conditions initiales. Cette méthode, très rapide à comparer avec des approches Hartree-Fock ou Hartree-Fock-Bogoluibov, utilise aussi un potentiel effectif (type Skyrme) et permet de reproduire de façon acceptable des observables macroscopiques comme les masses et les rayons des noyaux [Pea+91].

Mais le formalisme qui sera décrit dans cette thèse est du type Hartree-Fock dépendant du temps (et ses extensions). De fait, on utilisera une approche Hartree-Fock statique pour la condition initiale.

Tout d'abord, nous reviendrons sur le formalisme de Hartree-Fock (mais aussi Hartree-Fock dépendant du temps) avec le calcul de l'équation de celui-ci et le détail de l'approximation en champ-moyen. Ensuite, nous appliquerons l'équation de Hartree-Fock à la description d'un noyau dans son état fondamental. Puis, nous expliciterons la méthode utilisée pour la résolution de Hartree-Fock, dont les objets mathématiques utilisés, mais aussi l'approximation en oscillateur harmonique quantique. Et enfin, nous montrerons quelques résultats du modèle sur différents noyaux.

2.2 Approximation en champ-moyen

Dans cette partie, nous allons détailler le calcul qui permet d'arriver à l'équation de Hartree-Fock. Il existe d'ailleurs plusieurs méthodes pour obtenir celle-ci. La première méthode est celle décrite dans la partie 1.4.1, qui consiste à résoudre l'équation de Schrödinger aux valeurs et vecteurs propres. On retrouve ce calcul de façon très complète dans le **Chapitre 5** de [RS80]. Une autre méthode consiste à tirer partie de la hiérarchie BBGKY dont on a parlé dans la partie 1.4.2. On va détailler la méthode de *réduction*. Nous allons partir de l'équation de Schrödinger à N-Corps dépendante du temps :

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi^N(t)\rangle}{\partial t} = H^N |\Psi^N(t)\rangle \quad (2.1)$$

Au lieu de décrire la fonction d'onde à N-Corps qui décrit **intégralement** notre système, on va utiliser l'opérateur **densité à N-Corps** : $\rho^{(N)}(t) = |\Psi^N(t)\rangle \langle \Psi^N(t)|$. De fait, on va réécrire notre équation de Schrödinger pour l'opérateur densité :

$$i\hbar \frac{\partial \rho^{(N)}(t)}{\partial t} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (|\Psi^N(t)\rangle \langle \Psi^N(t)|) \quad (2.2)$$

$$= \left(i\hbar \frac{\partial |\Psi^N(t)\rangle}{\partial t} \right) \langle \Psi^N(t)| + |\Psi^N(t)\rangle \left(i\hbar \frac{\partial \langle \Psi^N(t)|}{\partial t} \right) \quad (2.3)$$

$$= H^N |\Psi^N(t)\rangle \langle \Psi^N(t)| - |\Psi^N(t)\rangle \langle \Psi^N(t)| H^N \quad (2.4)$$

$$= H^N \rho^{(N)}(t) - \rho^{(N)}(t) H^N \quad (2.5)$$

$$= [H^N, \rho^{(N)}] = L^N \rho^{(N)} \quad (2.6)$$

On appelle L^N le *liouvilien* à N-Corps, où 2.6 est l'équation de **Liouville von Neumann**[NW29]. On considère que notre système complet est isolé et donc l'hamiltonien n'est constitué que d'une partie cinétique T et d'un terme de potentiel V . De fait, notre hamiltonien peut s'écrire en seconde quantification :

$$\begin{aligned} H^N = & \sum_{\alpha, \beta} \langle \alpha | T | \beta \rangle c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta} + \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \delta} \langle \alpha, \beta | V | \gamma, \delta \rangle c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta}^{\dagger} c_{\delta} c_{\gamma} \\ & + \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \delta, \epsilon, \zeta} \langle \alpha, \beta, \gamma | V | \delta, \epsilon, \zeta \rangle c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta}^{\dagger} c_{\gamma}^{\dagger} c_{\zeta} c_{\epsilon} c_{\delta} + \dots \end{aligned} \quad (2.7)$$

$\langle \alpha | T | \beta \rangle$ sont les éléments de la matrice à 1-Corps de l'opérateur d'énergie cinétique. Ensuite, on a $\langle \alpha, \beta | V | \gamma, \delta \rangle$ qui représente le terme de la matrice de l'interaction à deux corps et $\langle \alpha, \beta, \gamma | V | \delta, \epsilon, \zeta \rangle$ les éléments de la matrice de l'interaction à trois corps et ainsi de suite jusqu'à N-Corps.

La résolution exacte du problème à N-Corps est à ce jour impossible au vu du nombre de degrés de liberté à traiter. Dans le cadre de la théorie de Hartree-Fock, nous allons réduire le problème aux opérateurs à **un** et **deux** corps :

$$H^N = \sum_{\alpha, \beta} \langle \alpha | T | \beta \rangle c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta} + \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \delta} \langle \alpha, \beta | V | \gamma, \delta \rangle c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta}^{\dagger} c_{\delta} c_{\gamma} \quad (2.8)$$

2.2. Approximation en champ-moyen

La méthode de réduction consiste à réduire le problème à N-Corps vers un problème à S-Corps. Réduire le problème revient en fait à sommer sur les degrés de liberté non pertinents (les ordres supérieurs), c'est-à-dire qui ne nous intéressent pas. On prend la **trace** de la matrice ρ^N sur les $N - S$ degrés de liberté. On a alors la matrice réduite :

$$\rho^{(S)} = \frac{N!}{(N - S)!} \text{Tr}_{S+1, \dots, N} [\rho^{(N)}] \quad (2.9)$$

Pour plus de clarté, on va séparer les contributions cinétiques et potentielle : $H^N = \sum_{i=1}^N T_i + \sum_{i \neq j}^N V_{i,j}$. L'indice 0 représentera la partie cinétique, et l'indice 1 représente le terme potentiel. On va réécrire notre Liouvilien de la façon suivante :

$$L^N = L_0^N + L_1^N = \sum_{i=1}^N [T_i, \] + \sum_{i \neq j}^N [V_{i,j}, \] = \sum_{i=1}^N L^0(i) + \sum_{i \neq j}^N L^1(i, j) \quad (2.10)$$

Ainsi, avant de réduire complètement le problème à S-Corps, on a :

$$L^N = \sum_{i=1}^S L^0(i) + \sum_{i=S+1}^N L^0(i) \quad (2.11)$$

$$+ \sum_{i < j=1}^S L^1(i, j) + \sum_{i=1}^S \sum_{j=S+1}^N L^1(i, j) + \sum_{i=S+1}^N \sum_{j=1(i < j)}^N L^1(i, j) \quad (2.12)$$

De fait, en sommant sur les $N - S$ degrés de libertés supplémentaires sur l'équation de Liouville von Neumann 2.6, on a :

$$i\hbar\dot{\rho}^{(S)} = L_0^S \rho^{(S)} + L_1^S \rho^{(S)} + \text{Tr}_{S+1} \left[\sum_{i=1}^S L^1(i, S+1) \rho^{(S+1)} \right] \quad (2.13)$$

Ce système d'équations différentielles couplées (l'équation S faisant intervenir la densité $S + 1$) est la hiérarchie BBGKY dont on a parlé dans la partie 1.4.2. Les informations de cette hiérarchie sont exactement les mêmes que dans l'équation de Liouville von Neumann. La méthode de réduction n'est pas une approximation. Néanmoins, si on tronque le système d'équation pour $S = 1$. Cela va nous donner l'équation différentielle régissant les opérateurs à 1-corps :

$$i\hbar\dot{\rho}^{(1)} = L_0^1 \rho^{(1)}(1) + \text{Tr}_2 \left[L^1(1, 2) \rho^{(2)}(1, 2) \right] \quad (2.14)$$

Dans l'approche ETDHF nous avons continué le calcul en traitant les interactions à deux-corps et en définissant un opérateur corrélation $C_{12}(t)$ (équation 1.53), car nous avons exprimé notre densité à deux corps $\rho^{(2)}$ comme tel :

$$\rho^{(2)}(1, 2) = \mathcal{A}\{\rho^{(1)}(1) \times \rho^{(1)}(2)\} + g(1, 2) \quad (2.15)$$

avec \mathcal{A} l'opérateur d'anti-symétrisation. Le premier terme est construit comme le produit des densités à un-corps. Le deuxième terme $g(1, 2)$ traduit les interactions résiduelles à deux-corps, c'est un terme de corrélation. Pour retrouver l'approximation de Hartree-Fock, nous allons prendre le terme $g(1, 2)$ égal à zéro. Comme nous l'avons abordé dans

la partie 1.4.2 sur ETDHF, il est possible d'aller plus loin, nous y reviendrons dans un autre chapitre.

De fait, on a alors :

$$i\hbar\dot{\rho}^{(1)} = L_1^0\rho^{(1)}(1) + \text{Tr}_2 \left[L^1(1,2)\mathcal{A}\rho^{(1)}(1)\rho^{(1)}(2) \right] \quad (2.16)$$

On introduit alors l'hamiltonien de Hartree-Fock h_{HF} :

$$i\hbar\dot{\rho}^{(1)} = [h_{HF}, \rho^{(1)}(1)] \quad (2.17)$$

$$\text{avec : } h_{HF} = T + \text{Tr}_2 \left[V^A(1,2)\rho^{(1)}(2) \right] \quad (2.18)$$

Le second terme de h_{HF} s'appelle le **champ-moyen**. Son expression mathématique relève toute sa saveur physique. Il s'agit de la sommation des contributions des autres participants (indépendants) qui s'applique comme une moyenne, au participant dont on cherche l'évolution. Sous l'image des particules indépendantes, on moyenne l'effet de toute la distribution sur une particule du système. Le potentiel $V^A(1,2)$ (ou $v_{\bar{1}2}$) est le terme d'interaction (antisymétrisé).

Pour vulgariser l'image du champ-moyen, on peut imaginer une foule.

Cette foule, constituée de nombreux participants, hommes et femmes, parlant tous la même langue est impossible à traiter totalement, le nombre d'interactions seul, à deux, à trois ou plus encore est très difficile à traiter. L'approximation en champ-moyen consiste à étudier l'effet du "brouhaha" ambiant de toutes les discussions sur un seul individu. On ne traitera pas l'évolution de ce personnage en regardant toutes les interactions (à deux, à trois, ...) mais uniquement le bruit moyen qu'il entend auquel il réagit. Pour aller plus loin, le fait que la foule soit constituée de femmes et d'hommes peut augmenter la difficulté de traitement car les interactions ne sont pas toujours les mêmes. C'est une analogie des effets d'isospin auxquels on peut faire face dans le traitement des noyaux. On peut aussi imaginer des effets de bords, les participants ne réagissant pas de la même façon quand il sont au centre de la foule ou sur les bords. C'est aussi un effet qu'on peut observer dans la description des noyaux. De plus, pour conclure, on peut aussi envisager que les hommes se repoussent les uns les autres car ils parlent très fort, une analogie des effets coulombiens.

2.3 Application à la description de l'état fondamental

L'équation 2.17 représente l'évolution dynamique du système. Mais on cherche à décrire les noyaux dans leur état fondamental. De fait, il suffit de prendre cette équation à l'équilibre :

$$[h_{HF}, \rho] = 0 \quad (2.19)$$

On retrouve bien l'équation 1.46 de Hartree-Fock dont on a parlé dans la partie précédente. Où on avait $h = t + \Gamma$ où t représente la partie cinétique et Γ le champ moyen.

L'équation de Hartree-Fock est auto-cohérente. En effet, l'hamiltonien dépend de la densité et l'évolution de la densité dépend de l'hamiltonien. Donc résoudre cette équation revient à diagonaliser nos matrices hamiltonienne et de densité. Ce qui égal, en outre, à trouver l'état d'énergie minimale du système, solution approchée de l'état fondamental

du noyau (c'est d'ailleurs le principe de la méthode pour trouver l'équation de Hartree-Fock détaillée dans le chapitre précédent).

Le problème de l'équation de Hartree-Fock est qu'il est auto-cohérent. Dans ce genre de problème, on utilise une méthode itérative. Avant de rentrer dans le cœur même de la méthode de résolution du problème. Nous allons préparer tous les ingrédients nécessaires.

2.3.1 Force effective

Il existe deux potentiels effectifs très réputés à deux-corps. Le premier (historiquement) est celui de Skyrme [Sky58], puis il a été complété par Gogny [Gog75]. Dans le cadre de notre résolution, nous allons utiliser le potentiel de Skyrme. Le potentiel de Gogny peut engendrer des difficultés de mises en place en fonction du formalisme et des objets mathématiques utilisés. La grande amélioration du potentiel de Gogny est l'ajout de termes dits "*non-locaux*". Dans le cadre de la modélisation nucléaire, la démarche usuelle consiste à partir d'une force relativement simple et monter en complexité. C'est cette démarche qui a été choisie. De fait, nous allons expliciter la force de Skyrme dans son intégralité, et ensuite la tronquer en fonction de l'avancement de ce travail de recherche. Le but final étant l'utilisation d'une force la plus sophistiquée.

La force de Skyrme d'interaction nucléon-nucléon s'exprime ainsi :

$$\begin{aligned}
 V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = & t_0(1 + x_0 P_\sigma) \delta(\mathbf{r}) && \text{terme local} \\
 & + \frac{1}{2} t_1(1 + x_1 P_\sigma) [\mathbf{P}'^2 \delta(\mathbf{r}) + \delta(\mathbf{r}) \mathbf{P}^2] \\
 & + t_2(1 + x_2 P_\sigma) \mathbf{P}' \cdot \delta(\mathbf{r}) \mathbf{P} && \text{terme non-local} \\
 & + \frac{1}{6} t_3(1 + x_3 P_\sigma) [\rho(\mathbf{R})]^\gamma \delta(\mathbf{r}) && \text{terme 3-corps local} \\
 & + i W_0 \boldsymbol{\sigma} \cdot [\mathbf{P}' \times \delta(\mathbf{r}) \mathbf{P}] && \text{terme spin-orbite}
 \end{aligned}$$

avec :

$$\begin{aligned}
 \mathbf{r} &= \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, & \mathbf{R} &= \frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2} \\
 \mathbf{P} &= \frac{1}{2i} (\nabla_1 - \nabla_2), & \mathbf{P}' & \text{complexe conjugué de } \mathbf{P} \\
 \boldsymbol{\sigma} &= \boldsymbol{\sigma}_1 + \boldsymbol{\sigma}_2, & P_\sigma &= (1 + \boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2)/2
 \end{aligned}$$

Avec \mathbf{r}_1 et \mathbf{r}_2 , les positions des deux corps, $\boldsymbol{\sigma}_1$ et $\boldsymbol{\sigma}_2$ leurs spins.

Globalement, cette force introduit des termes de façon phénoménologique. Ainsi chaque terme traduit une interaction d'un type entre les deux corps. Cette force s'ajuste en fonction des différents paramètres à disposition : $t_0, x_0, t_1, x_1, t_2, x_2, t_3, x_3, \gamma$ et W_0 . De fait, le premier terme, dit "local" est un terme plutôt attractif. Le deuxième et le troisième terme sont des termes dits "non-locaux". Il font intervenir l'impulsion. Indirectement, ces termes vont faire apparaître d'autres effets une fois moyennés : les effets de surface et de masse effective. Le quatrième terme est à 3-corps mais local et est un terme plutôt répulsif. Le dernier terme est celui de l'interaction "spin-orbite". Il fait directement intervenir les effets de spin et d'impulsion. Les termes locaux (donc le premier et le quatrième) sont des effets dominants de la structure. De plus, il faut noter la présence du paramètre γ qui va traduire la "dureté" de la force. Un γ assez fort (environ 1) va donner une force assez

dure, donc une matière nucléaire assez "rigide". Alors qu'un γ plus faible (environ 1/3) donne une force plus molle, avec une matière nucléaire plus "souple". Il existe autant de paramétrisations de cette force qu'il existe de code qui l'utilise. Certaines études les comparent et cherchent à faire ressortir un panel de forces qui satisfont de nombreux critères [Dut+12].

2.3.2 Potentiel nucléaire, champ-moyen

Pour pouvoir utiliser la force effective dans un modèle en densité, il faut adapter le terme d'interaction effective à deux corps à une description à 1-corps en champ-moyen, c'est à dire exprimer le terme de potentiel comme dépendant de la densité. Pour cela on va d'abord calculer la densité d'énergie potentielle $H(\vec{r})$, qui est directement reliée au potentiel par l'expression suivante :

$$E_{pot} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \langle ij | V(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) | ij \rangle = \int H(\vec{r}) d^3r \quad (2.20)$$

L'énergie potentielle totale E_{pot} représente la somme de toutes les contributions des interactions à deux corps mais aussi l'intégration de la densité d'énergie potentielle dans tout l'espace. Le but principal est de trouver une expression pour $H(\vec{r})$, on s'appuiera sur la référence [VB72]. Le calcul est détaillé sur le reste de cette sous-partie.

On commence le calcul en se plaçant dans un sous-espace des états occupés, celui-ci étant invariant par renversement temporel. Soit notre état $|i\rangle$ qui devient $|\bar{i}\rangle = K|i\rangle$ par renversement temporel K et on admettra l'expression de $K = -i \sigma_y K_0$. Notre état dépend de la position \vec{r} , du spin σ et de l'isospin q pour protons ou neutrons :

$$\Phi_{\bar{i}}(\vec{r}, \sigma, q) = -i \sum_{\sigma'} \langle \sigma | \sigma_y | \sigma' \rangle \Phi_i^*(\vec{r}, \sigma', q) \quad (2.21)$$

$$= -2\sigma \Phi_i^*(\vec{r}, -\sigma, q) \quad (2.22)$$

Il nous faut extraire les propriétés de ces fonctions d'onde. Pour cela on va regarder les différents cas :

— On va maintenant étudier les différents cas de spin avec un même nucléon :

$$\sum_i \Phi_i^*(\vec{r}, \sigma_1, q) \Phi_i(\vec{r}, \sigma_2, q) = \frac{1}{2} \sum_i [\Phi_i^*(\vec{r}, \sigma_1, q) \Phi_i(\vec{r}, \sigma_2, q) + 4\sigma_1 \sigma_2 \Phi_i(\vec{r}, -\sigma_1, q) \Phi_i^*(\vec{r}, -\sigma_2, q)] \quad (2.23)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_i [\Phi_i^*(\vec{r}, \sigma_1, q) \Phi_i(\vec{r}, \sigma_2, q) + \Phi_i^*(\vec{r}, \sigma_1, q) \Phi_{\bar{i}}(\vec{r}, \sigma_2, q)] \quad (2.24)$$

— Dans le cas où les spins sont opposés $\sigma_1 = -\sigma_2$:

2.3. Application à la description de l'état fondamental

$$\sum_i \Phi_i^*(\vec{r}, -\sigma_2, q) \Phi_i(\vec{r}, \sigma_2, q) = \frac{1}{2} \sum_i \left[\Phi_i^*(\vec{r}, -\sigma_2, q) \Phi_i(\vec{r}, \sigma_2, q) + 4 \underbrace{\sigma_2^2}_I \Phi_i(\vec{r}, \sigma_2, q) \Phi_i^*(\vec{r}, -\sigma_2, q) \right] \quad (2.25)$$

$$= 0 \quad (2.26)$$

— On regarde maintenant dans le cas où les spins sont égaux $\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma$:

$$\sum_i \Phi_i^*(\vec{r}, \sigma, q) \Phi_i(\vec{r}, \sigma, q) = \frac{1}{2} \sum_i [\Phi_i^*(\vec{r}, \sigma, q) \Phi_i(\vec{r}, \sigma, q) + 4 \Phi_i(\vec{r}, -\sigma, q) \Phi_i^*(\vec{r}, -\sigma, q)] \quad (2.27)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_i |\Phi_i(\vec{r}, \sigma, q)|^2 + 2 \sum_i |\Phi_i(\vec{r}, -\sigma, q)|^2 \quad (2.28)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_i |\Phi_i(\vec{r}, \sigma, q)|^2 \quad (2.29)$$

$$= \frac{1}{2} \rho_q(\vec{r}) \text{ Dans l'approximation d'un déterminant de Slater} \quad (2.30)$$

Si on résume :

$$\sum_i \Phi_i^*(\vec{r}, \sigma_1, q) \Phi_i(\vec{r}, \sigma_2, q) = \frac{1}{2} \delta_{\sigma_1, \sigma_2} \rho_q(\vec{r}) \quad (2.31)$$

— On va maintenant utiliser un projecteur du spin afin de tirer le dernier résultat nécessaire pour la suite :

$$\sum_{i, \sigma_1, \sigma_2} \Phi_i^*(\vec{r}, \sigma_1, q) \langle \sigma_1 | \vec{\sigma} | \sigma_2 \rangle \Phi_i(\vec{r}, \sigma_2, q) = \sum_{i, \sigma_1, \sigma_2} \langle \Phi_i | \vec{r}, \sigma_1, q \rangle \langle \sigma_1 | \vec{\sigma} | \sigma_2 \rangle \langle \vec{r}, \sigma_2, q | \Phi_i \rangle \quad (2.32)$$

$$= \sum_i \langle \Phi_i | \vec{r}, q \rangle \left(\sum_{\sigma_1} |\sigma_1\rangle \langle \sigma_1| \right) \vec{\sigma} \left(\sum_{\sigma_2} |\sigma_2\rangle \langle \sigma_2| \right) \langle \vec{r}, q | \Phi_i \rangle \quad (2.33)$$

$$= \sum_i \langle \Phi_i(\vec{r}, q) | \vec{\sigma} | \Phi_i(\vec{r}, q) \rangle \quad (2.34)$$

$$= \text{Tr}(\vec{\sigma}) = 0 \Rightarrow \sum_i \Phi_i^*(\vec{r}) \vec{\sigma} \Phi_i(\vec{r}) = 0 \quad (2.35)$$

On va s'intéresser uniquement au terme local de l'interaction à deux-corps pour le moment :

$$v_{12} = t_0(1 + x_0 P_\sigma \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)) \quad (2.36)$$

$$\widetilde{v}_{12} = t_0 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) (1 + x_0 P_\sigma) \underbrace{(1 - P_M P_\sigma P_\tau)}_{\text{antisymétrisation}} \quad (2.37)$$

On retrouve $P_\sigma = \frac{(1+\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2)}{2}$, $P_\tau = \frac{(1+\vec{r}_1 \cdot \vec{r}_2)}{2}$ et P_M est supposé égal à 1. On calcule alors l'énergie potentielle avec le potentiel à deux-corps directement antisymétrisé :

$$V_0 = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \langle ij | t_0 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) (1 + x_0 P_\sigma (1 - P_M P_\sigma P_\tau)) | ij \rangle \quad (2.38)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{i,j} \langle ij | t_0 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) (1 - P_\sigma P_\tau + x_0 P_\sigma - x_0 P_\sigma P_\sigma P_\tau) | ij \rangle \quad (2.39)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{i,j} \langle ij | t_0 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) [1 - x_0 P_\sigma P_\sigma P_\tau + P_\sigma (x_0 - P_\tau)] | ij \rangle \quad (2.40)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{i,j} \left\langle ij \left| t_0 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \left[1 - x_0 \delta_{q_i, q_j} + \frac{1}{2} (1 + \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2) (x_0 - \delta_{q_i, q_j}) \right] \right| ij \right\rangle \quad (2.41)$$

$$(2.42)$$

On remplace les états $|ij\rangle$ et $\langle ij|$ par leurs valeurs :

$$V_0 = \frac{t_0}{2} \sum_{ij} \iint d^3 r_1 d^3 r_2 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) [\Phi_i^*(\vec{r}_1, \sigma_i, q_i) \Phi_j^*(\vec{r}_2, \sigma_j, q_j)] \\ \times \left(1 - x_0 \delta_{q_i, q_j} + \frac{1}{2} (1 + \underbrace{\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2}_{=0}) (x_0 - \delta_{q_i, q_j}) \right) [\Phi_i(\vec{r}_1, \sigma_i, q_i) \Phi_j(\vec{r}_2, \sigma_j, q_j)] \quad (2.43)$$

$$= \frac{t_0}{2} \sum_{ij} \int d^3 r [\Phi_i^*(\vec{r}, q_i) \Phi_i(\vec{r}, q_i)] [\Phi_j^*(\vec{r}, q_j) \Phi_j(\vec{r}, q_j)] \left(\left(1 + \frac{x_0}{2} \right) - \delta_{q_i, q_j} \left(x_0 + \frac{1}{2} \right) \right) \quad (2.44)$$

$$= \int d^3 r \left(\frac{t_0}{2} \sum_{ij} [\Phi_i^*(\vec{r}, q_i) \Phi_i(\vec{r}, q_i)] [\Phi_j^*(\vec{r}, q_j) \Phi_j(\vec{r}, q_j)] \left(1 + \frac{x_0}{2} \right) \right. \\ \left. - \frac{t_0}{2} \left(x_0 + \frac{1}{2} \right) \sum_{ij} \delta_{q_i, q_j} [\Phi_i^*(\vec{r}, q_i) \Phi_i(\vec{r}, q_i)] [\Phi_j^*(\vec{r}, q_j) \Phi_j(\vec{r}, q_j)] \right) \quad (2.45)$$

$$= \int d^3 r \left(\frac{t_0}{2} \left(1 + \frac{x_0}{2} \right) \underbrace{\left(\rho_n(\vec{r})^2 + \rho_n(\vec{r}) \rho_p(\vec{r}) + \rho_p(\vec{r}) \rho_n(\vec{r}) + \rho_p(\vec{r})^2 \right)}_{\rho(\vec{r})^2} \right) \\ - \frac{t_0}{2} \left(x_0 + \frac{1}{2} \right) (\rho_n(\vec{r})^2 + \rho_p(\vec{r})^2) \quad (2.46)$$

$$\Rightarrow H_0(\vec{r}) = \frac{1}{2} t_0 \left[\left(1 + \frac{x_0}{2} \right) \rho^2 - \left(x_0 + \frac{1}{2} \right) (\rho_n^2 + \rho_p^2) \right] \quad (2.47)$$

Il en est exactement de même pour le terme dépendant de la densité $v_{12} = \frac{1}{6} t_3 (1 + x_3 P_\sigma) [\rho(\vec{R})]^\sigma \delta(\vec{R})$ où $\vec{R} = \frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{2}$, on obtient alors :

$$H_3(\vec{r}) = \frac{1}{24} t_3 \rho^\sigma [(2 + x_3) \rho^2 - (2x_3 + 1) (\rho_n^2 + \rho_p^2)] \quad (2.48)$$

2.3. Application à la description de l'état fondamental

On rappelle que la densité isoscalaire s'exprime : $\rho = \rho_n + \rho_p$ et la densité isovectorielle $\xi = \rho_n - \rho_p$. Ainsi, on a :

$$\rho_n^2 + \rho_p^2 = \frac{\xi^2}{2} + \frac{\rho^2}{2} \quad (2.49)$$

On fait disparaître les densités pour chaque isospin au profit de la densité totale et isovectorielle :

$$H_0(\rho, \xi) = \frac{1}{4}t_0 \left[\left(1 + \frac{x_0}{2}\right) \rho^2 - \left(x_0 + \frac{1}{2}\right) \xi^2 - \left(x_0 + \frac{1}{2}\right) \rho^2 \right] \quad (2.50)$$

$$= \frac{1}{4}t_0 \left[\frac{3}{2}\rho^2 - \left(x_0 + \frac{1}{2}\right) \xi^2 \right] \quad (2.51)$$

$$= \left(\frac{3}{8}t_0\rho_0\right) \frac{\rho^2}{\rho_0} - \left[\frac{\left(x_0 + \frac{1}{2}\right)t_0\rho_0}{4}\right] \frac{\xi^2}{\rho_0} \quad (2.52)$$

et :

$$H_3(\rho, \xi) = \frac{1}{24}t_3\rho^\sigma \left[(2 + x_3) \rho^2 - \left(x_3 + \frac{1}{2}\right) \rho^2 - \left(x_3 + \frac{1}{2}\right) \xi^2 \right] \quad (2.53)$$

$$= \frac{1}{24}t_3\rho^\sigma \left[\frac{3}{2}\rho^2 - \left(x_3 + \frac{1}{2}\right) \rho^2 - \left(x_3 + \frac{1}{2}\right) \xi^2 \right] \quad (2.54)$$

$$= \left(\frac{1}{16}t_3\rho_0^{\sigma+1}\right) \frac{\rho^{\sigma+2}}{\rho_0^{\sigma+1}} - \rho^\sigma \left[\frac{\left(x_3 + \frac{1}{2}\right)t_3\rho_0}{24}\right] \frac{\xi^2}{\rho_0} \quad (2.55)$$

On rassemble maintenant les deux expressions de H_0 et H_3 :

$$H_{pot}(\rho, \xi) = \underbrace{\frac{3}{8}t_0\rho^2 - \frac{1}{2}\left[\frac{1}{2}t_0\left(x_0 + \frac{1}{2}\right)\right]\xi^2}_{H_0} + \underbrace{\frac{1}{16}t_3\rho^{\sigma+2} - \frac{1}{2}\left[\frac{1}{12}t_3\left(x_3 + \frac{1}{2}\right)\right]\rho^\sigma\xi^2}_{H_3} \quad (2.56)$$

L'expression de la densité d'énergie totale pour les termes locaux, dépendant de la densité et de surface est :

$$H_{pot} = H_0 + H_3 + H_{surf}$$

Avec [Cha+97] :

$$H_0 = \frac{3}{8}t_0\rho^2 - \frac{1}{2}\left[\frac{1}{2}t_0\left(x_0 + \frac{1}{2}\right)\right]\xi^2 \quad (2.57)$$

$$H_3 = \frac{1}{16}t_3\rho^{\sigma+2} - \frac{1}{2}\left[\frac{1}{12}t_3\left(x_3 + \frac{1}{2}\right)\right]\rho^\sigma\xi^2 \quad (2.58)$$

$$H_{surf} = \frac{1}{16}\left[\frac{9}{4}t_1 - t_2\left(x_2 + \frac{5}{4}\right)\right](\nabla\rho)^2 - \frac{1}{32}\left[3t_1\left(x_1 + \frac{1}{2}\right) + t_2\left(x_2 + \frac{1}{2}\right)\right](\nabla\xi)^2 \quad (2.59)$$

Le potentiel moyen est défini à partir des expressions de la densité d'énergie potentielle par :

$$U^{(p,n)} = \frac{\partial H_{pot}}{\partial \rho_{p,n}} \quad (2.60)$$

On différenciera potentiel $U^{(p,n)}$ pour les protons (p) et neutrons (n). Car bien que la densité isoscalaire se dérive de la même façon pour protons et neutrons, la densité isovectorielle n'aura pas la même valeur en fonction de l'isospin, de fait on utilisera $\tau_{(p,n)}$ pour protons et neutrons ($q = n, p$) tel que :

$$\begin{aligned} \tau_n &= \frac{\partial \xi}{\partial \rho_n} = +1 && \text{neutrons} \\ \tau_p &= \frac{\partial \xi}{\partial \rho_p} = -1 && \text{protons} \end{aligned} \quad (2.61)$$

Le calcul pour H_0 et H_3 donne :

$$U_0^{(p,n)} = \frac{3}{4}t_0\rho - \tau_{(p,n)}\frac{1}{2}t_0\left(x_0 + \frac{1}{2}\right)\xi \quad (2.62)$$

$$U_3^{(p,n)} = \frac{(\sigma + 2)}{16}t_3\rho^{\sigma+1} - \frac{\sigma t_3}{24}\left(x_3 + \frac{1}{2}\right)\rho^{\sigma-1}\xi^2 - \tau_{(p,n)}\frac{t_3}{12}\left(x_3 + \frac{1}{2}\right)\rho^\sigma\xi \quad (2.63)$$

Concernant le terme de surface, la densité d'énergie potentielle de surface varie en fonction de $(\nabla\rho)^2$ et $(\nabla\xi)^2$. Pour la dériver, on va devoir avoir recours à des calculs intermédiaires. D'une part, on doit réexprimer $(\nabla\rho)^2$:

$$\begin{aligned} \int (\nabla\rho)^2 d^3r &= \int (\nabla\rho) \cdot (\nabla\rho) d^3r = [\rho \cdot \nabla\rho]_{-\infty}^{+\infty} - \int (\rho\Delta\rho) d^3r \quad \rho \text{ fonction paire} \\ \Rightarrow (\nabla\rho)^2 &= -\rho\Delta\rho \end{aligned} \quad (2.64)$$

Alors :

$$\begin{aligned} H_{surf} &= \frac{1}{16} \left[\frac{9}{4}t_1 - t_2 \left(x_2 + \frac{5}{4} \right) \right] (\nabla\rho)^2 - \frac{1}{32} \left[3t_1 \left(x_1 + \frac{1}{2} \right) + t_2 \left(x_2 + \frac{1}{2} \right) \right] (\nabla\xi)^2 \\ H_{surf} &= A(\nabla\rho)^2 - B(\nabla\xi)^2 \\ \text{et : } E_{surf} &= \int H_{surf} d^3r \\ &= \int (A(\nabla\rho)^2 - B(\nabla\xi)^2) d^3r \\ &= - \int (A\rho\Delta\rho + B\xi\Delta\xi) d^3r \\ &= -A \int d^3r (\rho\Delta\rho) + B \int d^3r (\xi\Delta\xi) \end{aligned} \quad (2.65)$$

2.3. Application à la description de l'état fondamental

$$\begin{aligned}
 \text{or : } \delta E_{surf} &= \int d^3r \delta H_{surf} \quad \text{et :} \quad U_{surf} = \frac{\delta H_{surf}}{\delta \rho} \\
 &= \int d^3r U_{surf} \delta \rho \\
 &= -2A \int d^3r \Delta \rho \delta \rho + 2B \int d^3r \Delta \xi \delta \xi \\
 &= -2A \int d^3r \Delta \rho \delta \rho + \tau_{(p,n)} 2B \int d^3r \Delta \xi \delta \rho \\
 U_{surf} &= -2A \Delta \rho + \tau_{(p,n)} 2B \Delta \xi
 \end{aligned}$$

donc :

$$U_{surf}^{(p,n)} = -\frac{1}{8} \left[\frac{9}{4} t_1 - t_2 \left(x_2 + \frac{5}{4} \right) \right] \Delta \rho + \tau_{(p,n)} \frac{1}{16} \left[3t_1 \left(x_1 + \frac{1}{2} \right) + t_2 \left(x_2 + \frac{1}{2} \right) \right] \Delta \xi \quad (2.66)$$

Avec 2.62, 2.63 et 2.66, on a nos trois contributions au potentiel nucléaire auquel on aura recours. On a désormais un potentiel $U(\rho)$ qui dépend bien de la densité, ainsi, notre équation de Hartree-Fock peut s'écrire :

$$[h_{HF}, \rho] = [T + U(\rho), \rho] = 0 \quad (2.67)$$

De plus, on sait que nous aurons recours à une méthode itérative pour résoudre le problème auto-cohérent. Mais, il nous reste à trouver une condition initiale pour amorcer la méthode itérative.

2.3.3 Condition initiale

Le problème de l'auto-cohérence qui est dans l'équation de Hartree-Fock est l'interdépendance entre la densité et l'hamiltonien à 1-Corps par le champ-moyen.

A un moment de cette boucle il faut définir une approximation de l'étape, qui constituera une amorce à cette boucle. L'hamiltonien sera défini à partir du potentiel. On peut alors soit imposer un profil de densité initial, ou un profil de potentiel initial. Le plus courant reste d'amorcer avec un potentiel nucléaire réaliste et indépendant de la densité. Un profil très utilisé est le potentiel de Woods-Saxon [WS54; RS80], dont l'allure pour différents noyaux est tracé en figure 2.1 :

$$V^{WS}(r) = \frac{V_0}{1 + e^{\frac{r-\tilde{r}}{r_d}}} \quad (2.68)$$

avec :

$$\begin{aligned}
 V_0 = -53.0 \text{ MeV} & & : \text{ Amplitude centrale du potentiel} \\
 \tilde{r} = r_0 A^{1/3} \text{ [fm]} & & : \text{ Rayon moyen du noyau} \\
 r_d = 0.66 \text{ [fm]} & & : \text{ Distance de diffusivité}
 \end{aligned} \quad (2.69)$$

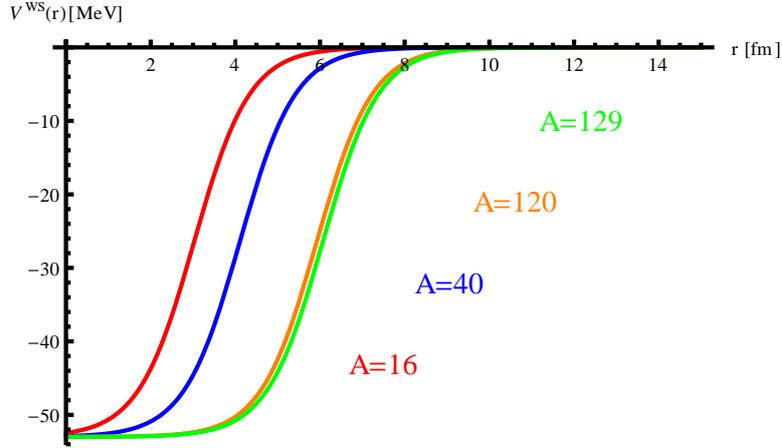


FIGURE 2.1 – Allures d'un potentiel type Woods-Saxon pour différentes masses (16,40,120,129).

Mais il ne s'agit là que du potentiel nucléaire, on prendra soin aussi de calculer le potentiel coulombien généré par les protons du noyau :

$$V_{CB}(r) = \begin{cases} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} & \text{pour } r > \tilde{r} \\ \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1.5 - 0.5 \left(\frac{r}{\tilde{r}}\right)^2}{\tilde{r}} & \text{pour } r < \tilde{r} \end{cases} \quad (2.70)$$

Avec ce potentiel pour amorcer la méthode itérative, nous avons tous les ingrédients pour détailler, étape après étape notre méthode de résolution de l'équation de Hartree-Fock pour les noyaux.

2.4 Résolution de l'équation de Hartree-Fock

Dans cette partie, nous allons décrire comment nous résolvons numériquement l'équation de Hartree-Fock pour les noyaux dans notre modèle. D'une part, nous allons expliquer notre formalisme mathématique pour notre résolution. Dans une seconde partie, nous expliquerons l'approximation harmonique que nous utilisons pour notre résolution de l'équation de Hartree-Fock, à l'aide des ingrédients que nous avons préparés dans la partie précédente.

2.4.1 Les états cohérents

Dans le modèle STAWAN pour **ST**atic **W**avelets in **N**uclei [JOU96], l'idée phare est de résoudre l'équation de Hartree-Fock, à l'aide de la théorie mathématique des ondelettes. Les fonctions d'ondes sont décomposées en ondelettes. La décomposition en ondelettes a été très détaillée dans [JOU96; JSDLM98; DLMS01] et ce manuscrit ne fera pas le détail de cette analyse. Néanmoins, on retiendra que la base d'ondelettes utilisées sont les "états cohérents" [Gla63b; Gla63a].

L'utilisation des états cohérents pour la description statique ne semble pas directe, car

ceux-ci sont plus souvent utilisés en dynamique. Mais, rappelons que notre solution de Hartree-Fock a pour but de constituer une condition initiale à la dynamique. De fait, on doit utiliser des objets qui peuvent se mouvoir dans le temps. Les états-cohérents sont les états propres de l'opérateur d'annihilation de l'oscillateur harmonique (même s'ils ne sont pas orthogonaux, on peut les utiliser comme une base). Ils se caractérisent par la minimisation de la relation d'incertitude à tout temps, et leur évolution préserve leur structure. Pour cette raison, on les appelle *Displaced ground state* et leur mouvement est similaire à celui d'une particule classique.

Autrement dit, les états-cohérents décrivent un état du système où l'état fondamental est déformé et déplacé de son origine. Donc cela correspond très directement à notre objectif. Mais plus globalement, les états cohérents ont été assez généralisés et sont utilisés dans de différents problèmes : mathématiques appliquées, quantification de signaux, traitements d'images. Pour distinguer les états cohérents, dans leur utilisation d'origine, c'est-à-dire comme solution de l'oscillateur harmonique quantique (que l'on va discuter juste après), on parle aussi d'états cohérents canoniques ou d'états gaussiens (d'où un raccourci de langage entre *états-cohérents* et *gaussiennes*).

2.4.2 Espace de travail

Dans le cadre de la résolution de l'équation de Hartree-Fock, notre problème se situe évidemment dans l'espace des phases. Mais il n'est pas rare que la résolution de l'équation de Schrödinger se fasse dans l'espace des positions usuellement. Ainsi, la plupart du temps, on a une description de notre système avec une fonction d'onde dans l'espace des configurations $\Psi(r)$. Mais du fait de la nature quantique du système qu'on étudie, on ne peut se satisfaire d'une description restreinte à l'espace des positions. De plus, en raison du principe d'incertitude d'Heisenberg, la définition exacte de la position implique une grande incertitude sur l'impulsion (et vice et versa), il nous faut donc travailler sur les deux tableaux simultanément, donc dans l'espace des phases. De fait, on pourrait utiliser une transformation de Fourier pour décrire $\Psi(p)$ mais le problème s'inverserait, avec une grande incertitude sur l'espace des configurations.

Dans le cadre de notre description quantique, nous allons nous inspirer d'une fonction de distribution classique $f(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ [Lee95] pour définir notre fonction de distribution quantique $f^W(\mathbf{r}, \mathbf{p})$. Nous allons utiliser la transformation de Wigner, issue des travaux de Wigner-Ville, qui définissent la fonction de distribution quantique comme une opération sur la matrice densité dans l'espace des configurations :

$$f^W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \frac{1}{\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{s} \langle \rho | \mathbf{r} + \mathbf{s} \rangle e^{\frac{2i(\mathbf{r}-\mathbf{s})\mathbf{p}}{\hbar}} \quad (2.71)$$

réduit à une seule dimension, cela nous donne :

$$f^W(x, p_x) = \frac{1}{\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} ds \psi(x+s)\psi(x-s) e^{\frac{2ip_x s}{\hbar}} \quad (2.72)$$

Et cette fonction de distribution possède les propriétés suivantes :

- $\int f^W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) d\mathbf{p} = \rho(\mathbf{r})$
- $\int f^W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) d\mathbf{r} = \rho(\mathbf{p})$

$$- \int f^W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) d\mathbf{r} d\mathbf{p} = N$$

L'intégration dans un espace nous donne la densité dans l'autre, et l'intégration sur tout l'espace des phases redonne le nombre de particules N dans le système qu'on décrit. La transformation de Wigner est très intéressante car elle permet d'obtenir l'évolution en impulsion d'un système décrit dans l'espace des phases.

Nous allons maintenant faire le lien entre les états cohérents et l'espace des phases. Pour ce faire, nous allons nous intéresser aux états-cohérents généralisés, qui sont le cas général des états cohérents canoniques [ZFG90]. Pour cela, nous allons utiliser l'opérateur d'annihilation a et de création a^+ en seconde quantification de l'oscillateur harmonique. On définit alors un opérateur unitaire $S(\gamma)$:

$$S(\gamma) = e^{\frac{i}{2}(\gamma a^+ - \gamma^* a)^2} \quad (2.73)$$

On définit l'opérateur B qui est l'équivalent de l'opérateur d'annihilation de l'oscillateur harmonique a :

$$B = S^{-1}(\gamma) a S(\gamma) \quad (2.74)$$

$$= a + i(\gamma^2 a^+ - |\gamma|^2 a) \quad \text{tel que : } [B, B^+] = 1 \quad (2.75)$$

Les états-cohérents sont aussi construits à partir d'un opérateur de déplacement $D(\beta) = e^{\beta a^+ - \beta^* a}$. Comme on l'a dit plus tôt, les états-cohérents sont issus du déplacement de l'état fondamental de l'oscillateur harmonique, donc :

$$|\beta\gamma\rangle = S^{-1}(\gamma) D(\beta) |0\rangle \quad (2.76)$$

Les états-cohérents généralisés sont alors les états propres de B avec la valeur propre β associée [RDH82; Per86] :

$$B|\beta\gamma\rangle = \beta|\beta\gamma\rangle \quad (2.77)$$

On définit alors pour notre oscillateur harmonique (de pulsation ω) les paramètres :

$$\alpha_1 = \sqrt{m\omega}(1 - i|\gamma| + i\gamma^2) \quad (2.78)$$

$$\alpha_2 = \frac{1}{\sqrt{m\omega}}(1 - i|\gamma| - i\gamma^2) \quad (2.79)$$

2.4. Résolution de l'équation de Hartree-Fock

On obtient alors les positions moyennes et les "largeurs" de nos états cohérents (premiers et seconds moments) :

$$\langle x \rangle = \sqrt{2\hbar} \operatorname{Re}(\beta\alpha_2^*) \quad (2.80)$$

$$\langle p \rangle = \sqrt{2\hbar} \operatorname{Im}(\beta\alpha_1^*) \quad (2.81)$$

$$\chi = \frac{\hbar}{2} |\alpha_2|^2 \quad (2.82)$$

$$\phi = \frac{\hbar}{2} |\alpha_1|^2 \quad (2.83)$$

$$\sigma = -\frac{\hbar}{2} \operatorname{Im}(\alpha_1\alpha_2^*) \quad (2.84)$$

$$(2.85)$$

Les états-cohérents dits "non-corrélés" sont en fait des états cohérents canoniques de l'oscillateur harmonique, c'est à dire qui minimisent le terme suivant, avec $\sigma = 0$:

$$\Delta = \phi\chi - \sigma^2 = \frac{\hbar^2}{4} \quad (2.86)$$

On retrouve ici explicitement le principe d'incertitude d'Heisenberg. Et les états cohérents canoniques (ou non-corrélés) minimisent ce principe là. Mais dans le cas des états cohérents généralisés, ceux-ci peuvent être corrélés avec une valeur de σ différente de zéro. On a alors une expression pour nos états-cohérents généralisés dans l'espace des configurations (à une dimension) :

$$\langle x | \beta\gamma \rangle = \left(\frac{1}{\pi\hbar|\alpha_2|^2} \right)^{1/4} e^{-\frac{1}{2\hbar} \frac{\alpha_1}{\alpha_2} (x - \langle x \rangle)^2} e^{\frac{i}{\hbar} \langle p \rangle (x - \langle x \rangle)^2} \quad (2.87)$$

On va donc appliquer la transformation de Wigner qu'on a détaillé plus tôt à nos états-cohérents dans l'espace des configurations pour les généraliser à l'espace des phases :

$$f^W(x, p_x) = \frac{1}{2\pi\sqrt{\Delta_x}} \exp \left\{ -\frac{1}{2\Delta_x} [\phi_x (x - \langle x \rangle)^2 + \chi_x (p_x - \langle p_x \rangle)^2 - 2\sigma_x (x - \langle x \rangle)(p_x - \langle p_x \rangle)] \right\} \quad (2.88)$$

On a alors une base surcomplète dans l'espace des phases. Ces états cohérents généralisés vont prendre une orientation dans l'espace des phases et la corrélation entre leurs *largeurs* (seconds moments) sera prise en compte. C'est un point très important, nous avons une vraie prise en compte de caractère quantique des particules qu'on cherche à décrire avec le principe d'incertitude d'Heisenberg. De plus, on observe clairement le caractère gaussien des états cohérents généralisés, d'où le raccourci de langage : "*gaussiennes*" quand on parle d'états-cohérents généralisés, qui est aussi vrai si l'on parle de la transformée de Wigner d'un état-cohérent comme contribution à la densité.

2.4.3 L'oscillateur harmonique quantique

Pour la résolution de Hartree-Fock, on va procéder à une approximation, c'est-à-dire qu'on va utiliser le modèle de l'oscillateur harmonique quantique. De fait, ce problème est connu, les fonctions d'onde ont une forme analytique, ce qui va grandement aider à

la résolution. Si la forme analytique est connue, il faudra néanmoins ajuster ces fonctions en fonction de notre potentiel, Hamiltonien et densité. Nous allons détailler la procédure que nous utilisons.

Les niveaux

Dans le cadre de l'oscillateur harmonique quantique, la construction des niveaux dans le noyau se fait avec le nombre quantique principale N . C'est à dire que les nucléons vont "remplir" des couches de $N = 0$ jusqu'à un niveau maximal N_{max} , ce niveau sera le **niveau de Fermi**. Première précision, nous distinguerons bien protons et neutrons, chacun va remplir ses niveaux qui lui sont propres, de fait, pour chaque type de nucléon, il nous restera à prendre le spin en compte. La dégénérescence d'un niveau est donnée par :

$$g_N = 2 \times \frac{(N + 1)(N + 2)}{2} \quad (2.89)$$

Le facteur 2 multiplicatif représente les deux orientations de spin possible pour 1 nucléon sur un niveau. Pour chaque niveau N (colonne de gauche tableau 2.1), on remplit sépa-

TABLE 2.1 – Distribution des nucléons par niveaux jusqu'à $N = 3$

	Protons ou Neutrons	Total neutrons ou protons
N=3	20	40
N=2	12	20
N=1	6	8
N=0	2	2

rément protons et neutrons jusqu'au nombre de dégénérescences possibles pour chaque niveau en question (deuxième colonne du tableau 2.1). Pour chaque type de nucléon, on a une indication du niveau grâce à la troisième colonne du tableau 2.1, qui indique le nombre total du nucléon pour tel niveau. Ces nombres indiquent le maximum de places disponibles. Donc dans le cas où un niveau n'est pas rempli, c'est le niveau concerné qui est le niveau maximal.

TABLE 2.2 – Exemple du calcul des niveaux pour le $^{129}_{54}\text{Xe}$

$^{129}_{54}\text{Xe}$			
75 neutrons		54 protons	
N=0	75-(2)=73	54-(2)=52	N=0
N=1	73-(6)=67	52-(6)=46	N=1
N=2	67-(12)=55	46-(12)=34	N=2
N=3	55-(20)=35	34-(20)=14	N=3
N=4	35-(30)=5	14-(30)=-16	N=4
N=5	5-(42)=-37		
$N_{max}(n)=5$		$N_{max}(p)=4$	

2.4. Résolution de l'équation de Hartree-Fock

Dans le cas de ce noyau de Xénon-129 tableau 2.2, les neutrons vont occuper le niveau $N = 5$ mais pas le remplir. Identiquement pour les protons, ceux-ci vont occuper le niveau $N = 4$ mais pas le remplir.

Ainsi dans notre description du noyau à trois dimensions (cartésiennes), chaque niveau sera décrit comme la composition des niveaux accessibles dans chaque dimension :

$$N = n_x + n_y + n_z \quad (2.90)$$

Et la fonction d'onde de ce niveau principal N sera décrite comme un produit des fonctions d'onde des sous-niveaux n_i :

$$\Psi_N(x, y, z) = \phi_{n_x}(x) \times \phi_{n_y}(y) \times \phi_{n_z}(z) \quad (2.91)$$

Les énergies des niveaux

Dans le cadre de l'oscillateur harmonique quantique. Le potentiel prend la forme d'un oscillateur avec une pulsation ω , :

$$H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \quad (2.92)$$

Ceci est typiquement l'hamiltonien d'un oscillateur harmonique unidimensionnel classique. Pour passer à la description quantique, on va utiliser les observables X et P plutôt que les variables de position et impulsion. De plus, pour plus de clarté, nous allons faire le changement de variables suivant :

$$\hat{X} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} X \quad (2.93)$$

$$\hat{P} = \sqrt{\frac{1}{m\hbar\omega}} P \quad (2.94)$$

On définit alors les opérateurs de création et d'annihilation :

$$a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} - i\hat{P}) = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(m\omega X - iP) \quad (2.95)$$

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} + i\hat{P}) = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(m\omega X + iP) \quad (2.96)$$

$$\text{tel que : } [a, a^+] = 1 \quad (2.97)$$

Ainsi, l'hamiltonien quantique devient :

$$\hat{H} = \frac{1}{2}(\hat{X}^2 + \hat{P}^2) = aa^+ + \frac{1}{2} \quad (2.98)$$

$$\text{où : } H = \hbar\omega \left(aa^+ + \frac{1}{2} \right) \quad (2.99)$$

Les actions des opérateurs de création et d'annihilation sur les états du système sont définies comme :

$$a^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \quad (2.100)$$

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \quad (2.101)$$

$$\text{où : } N|n\rangle = n|n\rangle \quad (2.102)$$

L'opérateur $N = aa^+$ est l'opérateur de nombre. On voit ici que $|n\rangle$ est le vecteur propre de N et n les valeurs propres. On construit $|n\rangle$ à partir de l'état de vide :

$$|n\rangle = \frac{(a^+)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle \quad (2.103)$$

$$\text{tel que : } \langle n|n'\rangle = \delta_{nn'} \text{ et } \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle\langle n| = 1 \quad (2.104)$$

On a des vecteurs propres qui satisfont les relations d'orthogonalité et de complétude. Ces vecteurs forment une base orthonormale dans l'espace de Hilbert. Et sont ainsi vecteurs propres de l'équation :

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle \quad (2.105)$$

$$\text{où : } E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega \quad (2.106)$$

Ces valeurs E_n sont les énergies des niveaux pour le nombre N . On remarque que pour $N = 0$, le niveau le plus bas, le fondamental, la valeur n'est pas nulle. De plus, pour le niveau le plus haut, le dernier rempli, cette énergie sera l'**énergie de Fermi**.

Les fonctions d'ondes

Pour calculer les fonctions d'ondes des différents niveaux, on va reprendre l'expression des vecteurs propres de l'opérateur de nombre \hat{N} :

$$|n\rangle = \frac{(a^+)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle \quad (2.107)$$

Tout d'abord, il nous faut connaître l'état $|0\rangle$. Pour le calculer, on va partir d'une propriété de l'opérateur d'annihilation :

$$a|0\rangle = \vec{0} \quad (2.108)$$

Et projeter cette équation sur l'espace des configuration $\psi_0(x) = \langle x|0\rangle$, ce qui va nous donner une équation différentielle du type :

$$\frac{d\psi_0(x)}{dx} + \frac{m\omega}{\hbar}x\psi_0(x) = 0 \quad (2.109)$$

$$\Rightarrow \psi_0(x) = C_0 \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) \quad (2.110)$$

$$\text{après renormalisation : } C_0 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \quad (2.111)$$

2.4. Résolution de l'équation de Hartree-Fock

Ainsi, si on utilise l'équation 2.107 avec l'opérateur de création ainsi que l'état $|0\rangle$, on va chercher à déterminer $|n\rangle$. Pour cela, on va à nouveau projeter le problème sur l'espace des configurations : $\psi_n(x) = \langle x|n\rangle$

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \left(X - \frac{d}{dX}\right)^n \exp\left(-\frac{X^2}{2}\right) \quad \text{avec : } X = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x \quad (2.112)$$

Pour simplifier cette expression, on va utiliser les polynômes d'Hermite $H_n(X)$ sous la forme dite physique :

$$\left(X - \frac{d}{dX}\right)^n \exp\left(-\frac{X^2}{2}\right) = \exp\left(-\frac{X^2}{2}\right) H_n(X) \quad (2.113)$$

$$\text{explicitement : } H_n(X) = (-1)^n e^{X^2} \frac{d^n}{dX^n} e^{-X^2} \quad (2.114)$$

Pour la suite, on introduira la constante "de courbure" $\beta = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$ directement liée à la pulsation de l'oscillateur. De fait, la fonction d'onde de l'oscillateur harmonique d'ordre n est :

$$\psi_n(x) = \left(\frac{\beta^2}{\pi}\right)^{1/4} \frac{e^{-\beta^2 \frac{x^2}{2}}}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\beta x) \quad (2.115)$$

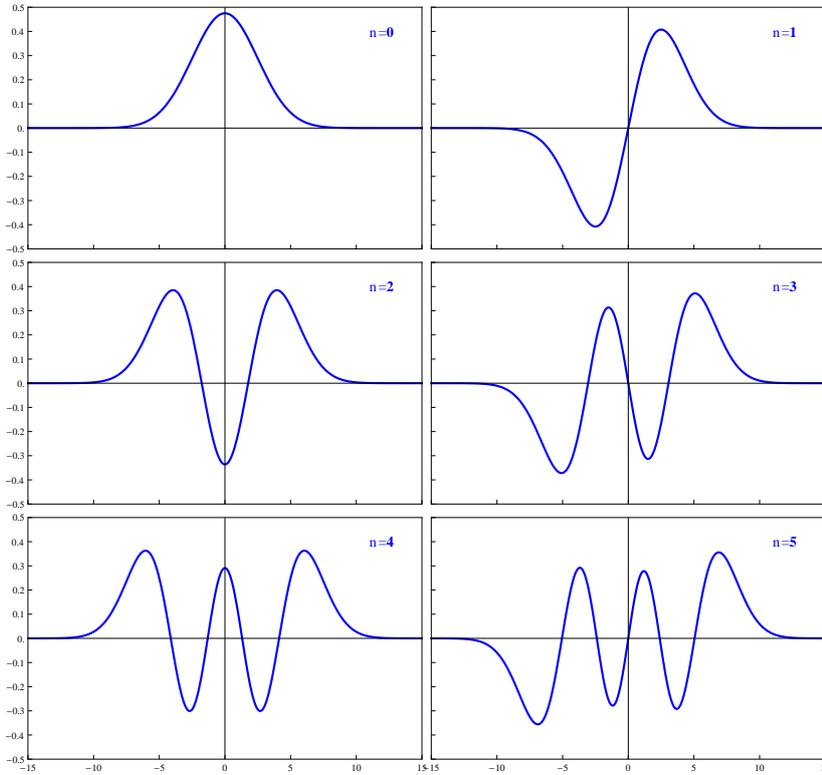


FIGURE 2.2 – Profils des fonctions d'ondes de oscillateur harmonique quantique pour n allant de 0 à 5, avec une courbure $\beta = 0.40 \text{ [fm}^{-1}\text{]}$.

Ces fonctions d'ondes, tracées sur la figure 2.2 sont dans l'espace des configurations,

donc, de la même façon que pour les états-cohérents, on va utiliser la transformation de Wigner. Ainsi, notre fonction de distribution d'ordre n aura la forme :

$$f_n^W(x, p) = \frac{(-1)^n}{\pi \hbar} \exp\left(-\frac{2H(x, p)}{\hbar\omega}\right) L_n\left(\frac{4H(x, p)}{\hbar\omega}\right) \quad (2.116)$$

$$\text{avec : } H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \quad (2.117)$$

Elles sont représentées sur la figure 2.3. Où $L_n(X)$ est le polynôme de Laguerre d'ordre n dont l'expression est :

$$L_n(X) = \frac{e^X}{n!} \frac{d^n}{dX^n} (e^{-X^n}) \quad (2.118)$$

Pulsation de l'oscillateur

La base même de l'oscillateur est sa pulsation ω . L'approximation harmonique a donné tout un cadre, une structure à la résolution de l'équation de Hartree-Fock, mais l'origine de cette approximation est dans le potentiel.

Dans une partie précédente, on a vu que dans un premier cas, quand on amorce le processus itératif, on utilise un potentiel approché : le Woods-Saxon (expression 2.68). Dans un second cas, une fois le processus itératif amorcé, le potentiel à 1-corps dépend de la densité, comme le montrent les équations 2.62, 2.63 et 2.66.

Enfin, dans l'expression 2.92 de l'hamiltonien de l'oscillateur, on a vu que celui-ci était de type parabolique. De fait, pour extraire une pulsation de nos potentiels V_{nuc} (Woods-Saxon ou champ-moyen) on va ajuster l'allure du potentiel dans une dimension avec une parabole. C'est l'approximation par un oscillateur harmonique V_{OH} . Le coefficient d'ajustement Ω nous donnera directement la valeur de la pulsation ω :

$$V_{nuc}(x) \rightarrow V_{OH}(x) = V_{nuc}(0) + \Omega x^2 = V_{nuc}(0) + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \quad (2.119)$$

Où $V_{nuc}(0)$ est la valeur minimale ou la profondeur du puits du potentiel nucléaire. Dans le cas du potentiel de Woods-Saxon 2.68, la valeur centrale est aussi minimale.

Une fois qu'on a notre pulsation, on peut calculer nos fonctions d'onde et procéder à la décomposition en états-cohérents que l'on va détailler juste après.

2.4.4 Décomposition en états-cohérents

Dans cette partie, nous allons décrire la décomposition des fonctions d'ondes de l'oscillateur harmonique en termes d'états-cohérent.

Fonction de distribution

Le principe de base est de décrire une fonction d'onde $|\phi\rangle$ par une superposition d'ondelettes $|\psi_i\rangle$:

$$|\phi\rangle = \sum_i c_i^\lambda |\psi_i^\lambda\rangle \quad (2.120)$$

2.4. Résolution de l'équation de Hartree-Fock

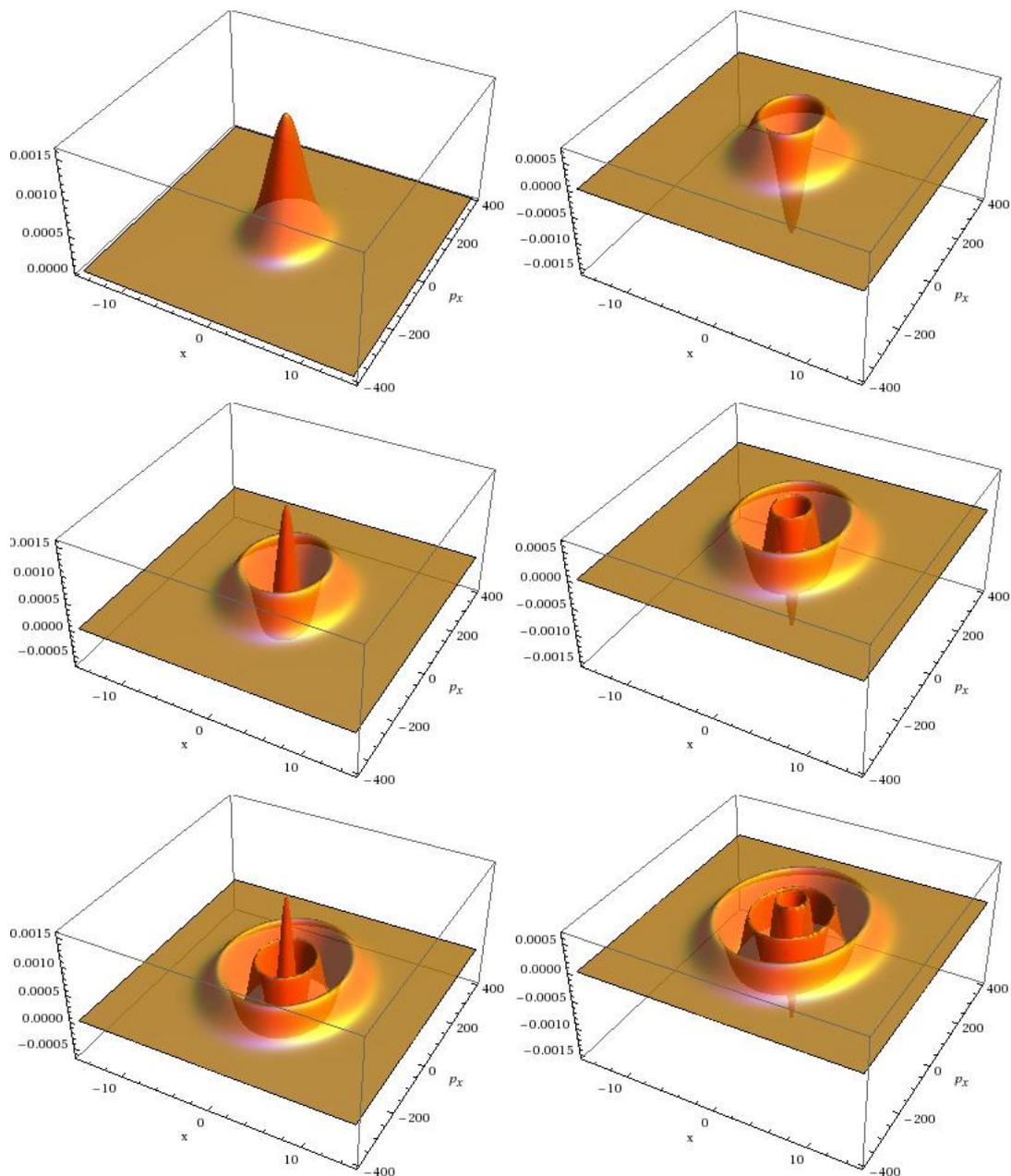


FIGURE 2.3 – Profils des transformées de Wigner des fonctions d'ondes de l'oscillateur harmonique quantique pour n allant de 0 à 5, avec une courbure $\beta = 0.40 \text{ [fm}^{-1}\text{]}$.

La matrice densité à 1-corps est définie en termes des fonctions d'ondes des nucléons comme fonctions d'ondes :

$$\rho = \sum_{\lambda=0}^N |\phi_{\lambda}\rangle\langle\phi_{\lambda}| \quad (2.121)$$

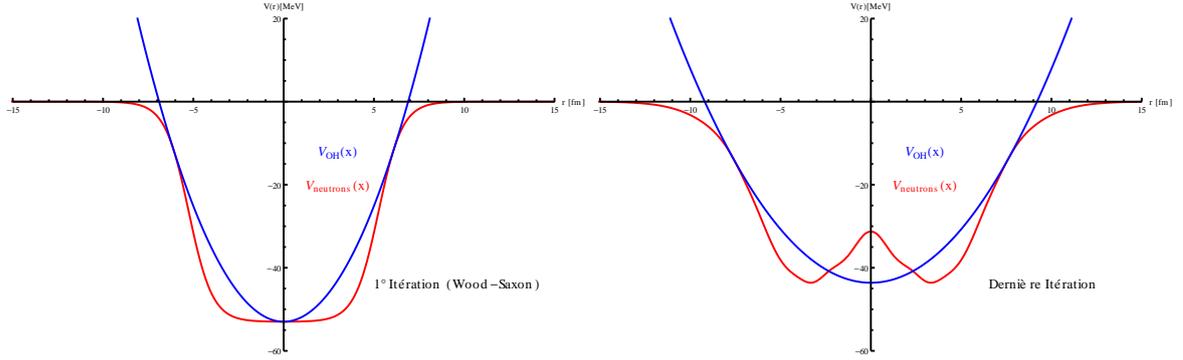


FIGURE 2.4 – Ajustement harmonique du potentiel nucléaire des neutrons pour un noyau de Xénon-129 (à gauche : première itération, à droite : dernière itération).

Si on injecte notre décomposition en ondelettes $|\psi\rangle$ dans l'expression de la matrice densité :

$$\rho = \sum_{\lambda=0}^N \sum_{i,j} c_i^{\lambda*} c_j^{\lambda} |\psi_i^{\lambda}\rangle \langle \psi_j^{\lambda}| \quad (2.122)$$

En l'état, notre matrice densité est exacte. Mais, dans notre base d'ondelettes orthogonales, les termes hors diagonale sont très oscillants et de faible amplitude par rapport aux termes diagonaux. De fait, l'information principale est contenue sur la diagonale de la matrice densité. De plus, la superposition des éléments non-diagonaux est destructrice. Ainsi, notre approximation consiste à ne conserver que les éléments diagonaux de la matrice densité [JOU96].

$$\rho = \sum_{\lambda=0}^N \sum_i |c_i^{\lambda}|^2 |\psi_i^{\lambda}\rangle \langle \psi_i^{\lambda}| \quad (2.123)$$

Et enfin, notre dernière approximation réside dans le fait de n'utiliser que des états-cohérents généralisés $|\alpha_i^{\lambda}\rangle$ pour base d'ondelettes.

$$\rho = \sum_{\lambda=0}^N \sum_i \beta_i^{\lambda} |\alpha_i^{\lambda}\rangle \langle \alpha_i^{\lambda}| \quad \text{avec : } \beta_i^{\lambda} = |c_i^{\lambda}|^2 \quad (2.124)$$

Et comme on l'a vu dans la partie 2.4.2, si on applique la transformation de Wigner sur cet opérateur densité, on obtient une fonction de distribution de notre système. De fait, à partir de la transformation de Wigner d'un état-cohérent 2.88. Notre fonction de distribution à 1-dimension totale est alors :

$$f(x, p) = \sum_i \omega_i f_i^W(x, p) \quad (2.125)$$

$$\text{avec : } f_i^W(x, p) = \frac{1}{2\pi\sqrt{\Delta}} \exp \left\{ -\frac{1}{2\Delta} [\phi_i(x - \langle x \rangle_i)^2 + \chi_i(p - \langle p \rangle_i)^2 - 2\sigma_i(x - \langle x \rangle_i)(p - \langle p \rangle_i)] \right\} \quad (2.126)$$

2.4. Résolution de l'équation de Hartree-Fock

Cette fonction de distribution, comme celle dans la partie 2.4.2, possède quelques propriétés :

$$\rho(x) = \int f(x, p) \mathbf{d}p = \sum_i \omega_i \frac{e^{-\frac{(x-\langle x \rangle_i)^2}{2\chi_i}}}{\sqrt{2\pi\chi_i}} = \sum_i \omega_i g_{\chi_i}(x - \langle x \rangle_i) \quad (2.127)$$

$$\rho(p) = \int f(x, p) \mathbf{d}x = \sum_i \omega_i \frac{e^{-\frac{(p-\langle p \rangle_i)^2}{2\phi_i}}}{\sqrt{2\pi\phi_i}} = \sum_i \omega_i g_{\phi_i}(p - \langle p \rangle_i) \quad (2.128)$$

Ainsi, notre densité dans l'espace des configurations par exemple, est la superposition de gaussiennes dont la valeur moyenne et la largeur sont les moments premiers et seconds de l'état-cohérent. Autrement dit, la densité est la combinaison linéaire de la transformée de Wigner de la projection d'un état-cohérent sur lui-même.

Cependant, notre modélisation est à trois-dimensions. En conséquence, notre base de référence sera construite comme un produit des éléments de base à une dimension :

$$|\Psi_N\rangle = |\phi_{n_x}\rangle |\phi_{n_y}\rangle |\phi_{n_z}\rangle \quad (2.129)$$

$$= \left(\sum_i c_i^x |\alpha_i\rangle \right) \left(\sum_j c_j^y |\alpha_j\rangle \right) \left(\sum_k c_k^z |\alpha_k\rangle \right) \quad (2.130)$$

$$= \sum_l C_l |\alpha_l\rangle \quad l = \{i, j, k\} \quad (2.131)$$

$$\text{avec : } C_l = c_i^x c_j^y c_k^z \quad \text{et : } |\alpha_l\rangle = |\alpha_i\rangle |\alpha_j\rangle |\alpha_k\rangle \quad (2.132)$$

Si l'on s'intéresse à la matrice densité et sa transformée de Wigner :

$$\hat{\rho} \simeq \sum_l \underbrace{|C_l|^2}_{\omega_l} |\alpha_l\rangle \langle \alpha_l| \xrightarrow{\text{Tr. Wigner}} f(\vec{r}, \vec{p}) = \sum_l \omega_l f_l^W(\vec{r}, \vec{p}) \quad (2.133)$$

Et à partir de notre décomposition en fonction d'onde mono-dimensionnelle. On généralise notre fonction de distribution à trois dimensions :

$$f(\vec{r}, \vec{p}) = \sum_l \omega_l f_l^W(x, p_x) f_l^W(y, p_y) f_l^W(z, p_z) \quad (2.134)$$

$$\rho(x, y, z) = \sum_i \omega_i (g_{\chi_{x,i}}(x - \langle x \rangle_i) g_{\chi_{y,i}}(y - \langle y \rangle_i) g_{\chi_{z,i}}(z - \langle z \rangle_i)) \quad (2.135)$$

$$\rho(p_x, p_y, p_z) = \sum_i \omega_i (g_{\phi_{x,i}}(p_x - \langle p_x \rangle_i) g_{\phi_{y,i}}(p_y - \langle p_y \rangle_i) g_{\phi_{z,i}}(p_z - \langle p_z \rangle_i)) \quad (2.136)$$

Ainsi, on voit que notre densité dans l'espace des configurations à trois-dimensions est une combinaison linéaire de gaussiennes à trois-dimensions.

Décomposition d'une fonction d'onde

Que cela soit la fonction d'onde $|\phi_n^\lambda\rangle$ ou bien la transformée de Wigner d'une fonction d'onde $f_n^W(x, p)$, on a vu qu'on pouvait les décrire comme une superposition d'états-cohérents $|\alpha_i\rangle$ ou de transformées de Wigner d'état-cohérent $f^W(x, p)_i$.

Notre problème, bien qu'il soit à trois-dimensions, peut se traiter formellement à une dimension, par simplicité. Pour revenir dans un espace à trois-dimensions, il suffit d'utiliser les relations 2.90, 2.129 et 2.134. On détaillera cette procédure plus loin.

Nous allons nous intéresser à la décomposition d'une fonction d'onde, dans une dimension spatiale en états cohérents et les implications que cela représente dans l'espace des phases avec la transformation de Wigner. Notre véritable décomposition est dans l'espace des phases, il nous faut bien reconstruire les impulsions des états-cohérents, mais faire un ajustement sur une fonction dans deux dimensions (position et impulsion) ce n'est pas forcément le plus simple. De fait une analyse de la transformée de Wigner d'une fonction d'onde à un ordre donné va nous donner des pistes pour faciliter la décomposition en états-cohérents.

On rappelle la transformée de Wigner pour un niveau n de la fonction d'onde associée :

$$f_n^W(x, p) = \frac{(-1)^n}{\pi \hbar} \exp\left(-\frac{2H(x, p)}{\hbar\omega}\right) L_n\left(\frac{4H(x, p)}{\hbar\omega}\right) \quad (2.137)$$

$$\text{avec : } H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \quad (2.138)$$

Et l'expression des polynômes de Laguerre est exprimée en 2.118. L'allure de chaque fonction pour n allant de 0 à 7 est représentée en figure 2.5 :

transformée de Wigner pour les fonctions d'ondes de n allant de zéro à sept.

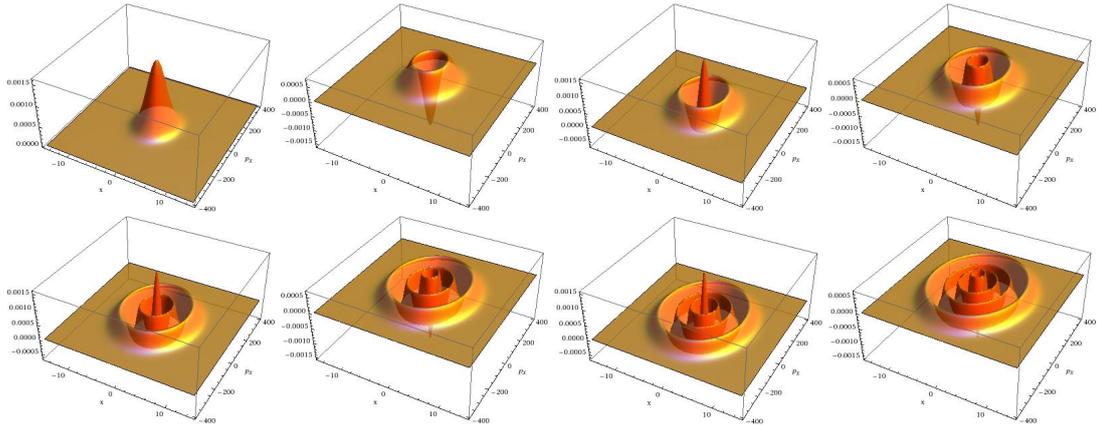


FIGURE 2.5 – Profils des transformées de Wigner des fonctions d'ondes de oscillateur harmonique quantique pour n allant de 0 à 7, avec une courbure $\beta = 0.40$ [fm⁻¹].

Tout d'abord, sur les graphiques de la figure 2.5 on peut distinguer plusieurs comportements :

2.4. Résolution de l'équation de Hartree-Fock

- La première oscillation est toujours positive
- Les oscillations sont concentriques
- Dans une dimension, la fonction est paire
- Il y a $n + 1$ variations pour un ordre n
- De fait, le pic central est positif pour n pair
- La position de la première oscillation augmente avec n (centrée pour $n = 0$)
- La largeur de la première oscillation grandit avec n (sauf pour $n = 0$)

On sait que la matrice densité est la superposition de toutes les contributions à la densité des transformées de Wigner des fonctions d'onde. Mais la superposition des oscillations centrales est destructrice [JOU96]. De fait, seul le premier lobe (la première oscillation) est constructif dans la superposition pour la densité totale. Ainsi, on n'ajustera que ce premier lobe pour chaque transformé de Wigner des fonctions d'onde avec les états-cohérents. Ce premier lobe d'énergie constante correspond à une trajectoire semi-classique. Les oscillations centrales sont purement quantiques et il est difficile d'y attribuer un comportement probabiliste [Hel77].

Si le premier lobe définit la trajectoire semi-classique, on va y placer nos états-cohérents, de telle sorte que la superposition de ceux-ci reproduisent au mieux le premier lobe de la transformée de Wigner. De plus, l'amplitude maximale de ce premier lobe forme une **ellipse** (c'est aussi une trajectoire semi-classique), c'est un raccourci de langage dont on aura recours. La suite de cet ajustement se fera en deux étapes. La première étape consiste à trouver les axes de cette ellipse pour définir la trajectoire. La deuxième étape consiste à estimer la largeur du lobe pour attribuer une largeur à nos états-cohérents, de telle sorte que la somme des états-cohérents "remplissent" au mieux ce lobe.

Une première méthode consisterait à projeter la fonction de distribution pour n donné sur l'axe des positions $f_n^W(x, 0)$ puis sur l'axes des impulsions $f_n^W(0, p)$, d'en tirer les demi-axes de l'ellipse. Ensuite on ajuste la largeur des lobes avec un état-cohérent non-corrélé (placé sur un axe, sa corrélation σ est nulle), qui, dans cet espace, aura un profil gaussien. Et on effectue un pavage de l'espace des phases avec des états-cohérents en parcourant la trajectoire semi-classique (l'ellipse). On prend soin d'effectuer une rotation de l'état-cohérent (ce qui crée une corrélation σ non-nulle si l'état cohérent n'est pas sur un axe). Cette méthode est intuitive, directe, mais une autre méthode est possible, les deux sont **équivalentes**.

Dans notre code de simulation, nous utilisons les propriétés des fonctions d'onde. En fait, notre point de départ reste la décomposition de la fonction d'onde en états-cohérents. On va utiliser des états-cohérents dans l'espace des positions $\langle x|\alpha \rangle$:

$$\alpha(x) = \frac{1}{(2\pi\chi)^{1/4}} \exp\left(\frac{i\langle p \rangle x}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{(x - \langle x \rangle)^2}{4\chi}\right) \quad (2.139)$$

Pour une fonction d'onde définie sur l'axe des positions, l'impulsion $\langle p \rangle$ d'un tel état-cohérent est nulle :

$$\alpha(x) = \frac{e^{-\frac{(x-\langle x \rangle)^2}{4\chi}}}{(2\pi\chi)^{1/4}} \quad (2.140)$$

Exactement comme pour la transformée de Wigner des fonctions d'onde, on ne va s'intéresser qu'au premier lobe, la première oscillation. La logique est exactement la même et c'est normal car la transformée de Wigner est une représentation de la fonction d'onde dans l'espace des phases. Ainsi, les oscillations centrales de la fonction d'onde, ou de sa transformée de Wigner sont des mêmes natures. De fait, on va ajuster nos fonctions d'onde uniquement sous le premier lobe. Comme décrit plus tôt. On va d'abord s'ajuster sur la position de ce lobe, en repérant son maximum, cela sera la position de notre état-cohérent $\langle x \rangle$. De plus, nous allons ajuster la largeur de ce lobe dont l'allure n'est gaussien que pour les $|x|$ croissants. Donc on s'ajuste dans ce sens-là, ce qui nous donne une largeur χ_0 . On a ainsi positionné notre premier état-cohérent sous ce lobe. Le dernier lobe est soit symétrique, soit anti-symétrique en fonction de n , ce qui ne change néanmoins pas sa position et sa largeur. Cette procédure est illustrée sur la figure 2.6

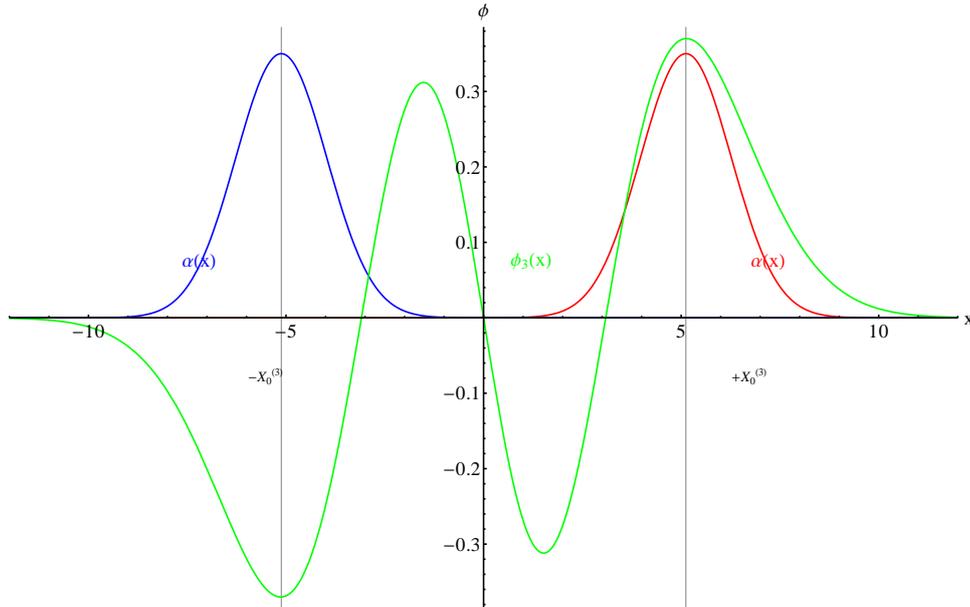


FIGURE 2.6 – Profils de la fonction d'onde de oscillateur harmonique quantique $\phi_3(x)$ (vert), ajustée avec deux états-cohérents, situés en $+X_0^{(n)}$ (rouge) et $-X_0^{(n)}$ (bleu), dans un noyau d'étain-120 (courbure $\beta = 0.396217$ [fm^{-1}]).

Si l'on se place dans l'espace des phases, le positionnement de ces deux états-cohérents n'est pas suffisant pour paver tout le lobe. Il nous faut connaître les demi-axes de l'ellipse de trajectoire. Et nous la connaissons d'ores et déjà grâce aux propriétés de l'oscillateur harmonique. En effet, si l'on nomme $X_0^{(n)}$ la valeur de demi-axe de l'ellipse sur l'axes des positions, et $Y_0^{(n)}$ la position du demi-axe sur l'axe des nombres d'ondes ($k = p/\hbar$), ces

2.4. Résolution de l'équation de Hartree-Fock

deux valeurs sont reliées par la relation :

$$Y_0^{(n)} = X_0^{(n)} \beta^2 \quad \text{avec :} \quad \beta = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \quad (2.141)$$

Cette relation peut être démontrée en calculant les fonctions d'onde de l'oscillateur harmonique dans l'espace des nombres d'ondes. Il existe une relation de transformation entre les fonctions d'onde en position $\phi_n(x)$ et en nombre d'onde $\phi_n(k)$ liée à β . A ce niveau là, nous avons trois paramètres suffisants pour décrire le premier lobe dans l'espace des phases.

TABLE 2.3 – Résumé des données extraites des fonctions d'ondes

Trajectoire	Demi-axe (x)	$X_0^{(n)}$
	Courbure	β
Extensions	Largeurs (x)	$\chi_0^{(n)}$

On remarque d'ailleurs que seule une étude en position nous donne une information complète de l'espace des phases. On placera un état-cohérent (non-corrélé) en $(X_0^{(n)}, 0)$. Pour paver l'ensemble du lobe, on procède à une rotation de cet état-cohérent dans l'ellipse. Pour paver au mieux, de façon la plus homogène, on effectue une distribution horaire (découpage en angles égaux).

On a vu précédemment que plus n est grand, plus le lobe s'écarte. De part cette excentricité, on va avoir recours à plus d'états-cohérents. Le nombre d'états nécessaires pour chaque niveau est détaillé dans le tableau 2.4. Pour la distribution, on balaie l'angle total

TABLE 2.4 – nombre d'états-cohérents nécessaires par niveau

N	0	1	2	3	4	5	6
#Etats-cohérents	4	4	4	8	8	8	8

de l'ellipse que l'on divise par le nombre d'états-cohérents nécessaires pour le niveau n en question (voir tableau 2.4).

Pour les positions (et nombre d'onde) de l'état-cohérents dans l'espace des phases, on va les placer sur un **cercle** (image de l'ellipse dans un espace sans-dimensions) tel que :

$$\langle \bar{x} \rangle = \beta \langle x \rangle = \beta X_0^{(n)} \cos(\alpha) \quad (2.142)$$

$$\langle \bar{k} \rangle = \frac{\langle k \rangle}{\beta} = \frac{1}{\beta} Y_0^{(n)} \sin(\alpha) \quad (2.143)$$

$$(2.144)$$

Avec α la coordonnée angulaire sur le plan sans-dimension.

Pour les largeurs, il nous faut connaître, comme pour l'espace des positions, la largeur de l'état-cohérent non-corrélé en nombre d'onde. Pour cela, on va utiliser les propriétés

des états-cohérents que nous avons détaillées dans la partie 2.4.2 et notamment la relation 2.86. On sait que si un état-cohérent n'est pas corrélé, il minimise la relation d'incertitude d'Heisenberg. De plus, si un état-cohérent se situe sur une position telle que : $(x, 0)$ ou $(0, k)$, c'est à dire sur un axe de l'espace des phases, il n'est pas corrélé. De fait, on a la relation :

$$\chi_0^{(n)} \phi_0^{(n)} = \frac{1}{4} \quad \text{si } \phi \text{ exprimé en nombre d'onde [fm}^{-2}] \quad (2.145)$$

$$\text{donc : } \phi_0^{(n)} = \frac{1}{4\chi_0^{(n)}} \quad (2.146)$$

Cette relation n'est vraie **que** pour un état-cohérent non-corrélé, c'est-à-dire, sur un axe. On effectue une rotation de l'état-cohérent placé en $(X_0^{(n)}, 0)$ en fonction de l'angle où il est placé avec des règles de transformations de rotation. Les nouvelles largeurs sont obtenues à partir de la condition de conservation de la phase de l'état-cohérent lors de la rotation :

$$\chi = \chi_0^{(n)} \cos^2(\alpha) + \frac{\phi_0^{(n)}}{\beta^4} \sin^2(\alpha) \quad (2.147)$$

$$\phi = \phi_0^{(n)} \cos^2(\alpha) + \chi_0^{(n)} \beta^4 \sin^2(\alpha) \quad (2.148)$$

Pour ce qui est d'un état-cohérent corrélé, il faut donc calculer sa corrélation :

$$\sigma^2 = \phi\chi - \frac{1}{4} \quad (2.149)$$

Pour le signe de σ , il suffit de regarder l'expression analytique de la transformée de Wigner d'un état-cohérent 2.88, on a :

$$\sigma = \text{sgn}(-\langle x \rangle \langle k \rangle) \times \sqrt{\phi\chi - \frac{1}{4}} \quad (2.150)$$

Ainsi pour un niveau n donné, avec un angle de départ α_0 (qui peut varier si l'on veut une distribution plus ou moins homogène) dans l'espace des phases, notre distribution en #Etats-cohérents(n) (voir tableau 2.4) états-cohérents aura la forme :

Pour i allant de 1 à #Etats-cohérents(n)

$$\alpha = \alpha_0 + \frac{2\pi(i-1)}{\text{\#Etats-cohérents}(n)}$$

$$\langle x \rangle = X_0^{(n)} \cos(\alpha) \quad \text{et} \quad \langle k \rangle = Y_0^{(n)} \sin(\alpha)$$

$$\chi = \chi_0^{(n)} \cos^2(\alpha) + \frac{\phi_0^{(n)}}{\beta^4} \sin^2(\alpha)$$

$$\phi = \phi_0^{(n)} \cos^2(\alpha) + \chi_0^{(n)} \beta^4 \sin^2(\alpha)$$

$$\sigma = \text{sgn}(-\langle x \rangle \langle k \rangle) \times \sqrt{\phi\chi - \frac{1}{4}}$$

$$\text{avec : } Y_0^{(n)} = X_0^{(n)} \beta^2, \beta = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \quad \text{et} \quad \phi_0^{(n)} = \frac{1}{4\chi_0^{(n)}}$$

2.4. Résolution de l'équation de Hartree-Fock

De fait on a toutes les informations nécessaires pour décrire la fonction de distribution d'un état-cohérent 2.88 (exprimé en position x et nombre d'onde k) :

$$f^W(x, k) = \frac{1}{2\pi\hbar\sqrt{\Delta}} \exp \left\{ -\frac{1}{2\Delta} [\phi(x - \langle x \rangle)^2 + \chi(k - \langle k \rangle)^2 - 2\sigma(x - \langle x \rangle)(k - \langle k \rangle)] \right\} \quad (2.151)$$

$$\text{avec : } \Delta = \phi\chi - \sigma^2 = \frac{1}{4} \quad (2.152)$$

On constate qu'avec uniquement la courbure β (liée à la pulsation ω) et deux informations extraites sur la fonction d'onde par niveau, on a l'intégralité des paramètres pour décrire notre distribution d'états-cohérents pour un niveau n donné.

Ainsi, il ne nous manque plus que les coefficients ω_i de l'équation 2.135 pour obtenir une expression complète de la fonction de distribution de notre système en états-cohérents.

Distribution des poids

Comme nous l'avons vu plusieurs fois auparavant, la matrice densité qui caractérise notre système, un noyau, est construite à partir des fonctions d'onde de l'oscillateur harmonique. De plus, ces fonctions d'ondes sont mono-dimensionnelle, on a vu que la modélisation à trois dimensions se fait comme un simple produit des bases à 1-dimensions :

$$|\Psi^N\rangle = |\phi_x\rangle|\phi_y\rangle|\phi_z\rangle \quad (2.153)$$

De plus, le système se construit à partir de la superposition des fonctions de **chaque niveau**, donc on va parcourir les nombres quantiques N accessibles. Cela dépend évidemment de la masse du noyau (voir partie 2.4.3). On a vu aussi que pour chaque n , comme sous-nombre quantique principal, associé à une dimension, on a une fonction d'onde, une fonction de distribution, un nombre d'état-cohérent pour décrire celle-ci.

On a vu aussi que l'on prenait en compte le spin du nucléon dans la dégénérescence par niveau. De fait, pour chaque niveau, on aura des paires de nucléons dans le même état (même position, même impulsion, même isospin), juste le spin diffère, ce qui permet de les positionner par paire dans nos niveaux. Dans le cas d'un nombre impair de nucléons d'un type, ce dernier nucléon sera nécessairement sur le niveau le plus haut, on le placera seul (sans réelle attribution d'un spin haut ou bas).

Donc, pour parcourir l'ensemble de nos niveaux de nombre quantique principal N , il nous faut parcourir l'intégralité de nos bases à une dimension des sous-nombres quantiques n :

$$N = n_x + n_y + n_z \quad (2.154)$$

On peut calculer le nombre de combinaisons des sous-nombres quantiques (n_x, n_y, n_z) qui est égale à :

$$\Omega_N = \frac{(N+1)(N+2)}{2} \quad (2.155)$$

TABLE 2.5 – Exemple de décomposition en sous-niveaux pour $N = 3$

n_x	n_y	n_z	
0	1	2	4 états
	2	1	
	3	0	
	0	3	
1	0	2	3 états
	2	0	
	1	1	
2	1	0	2 états
	0	1	
3	0	0	1 état

Ce qui est exactement égal au nombre de paires de nucléons (de spin opposé) que l'on peut disposer pour un niveau N . De fait, pour remplir notre système, on va parcourir les niveaux N , du niveau fondamental au niveau le plus haut. Pour chaque niveau, on va parcourir les combinaisons (n_x, n_y, n_z) et placer deux nucléons pour chaque.

On va maintenant s'intéresser au déroulement de la décomposition en ondelettes pour une combinaison (n_x, n_y, n_z) . Par exemple, si l'on reste dans le cas où $N = 3$ du tableau 2.5, on va prendre la contribution $(1, 0, 2)$ donne :

$$|\phi^{N=3=(1+0+2)}\rangle = |\phi_{n_x=1}\rangle |\phi_{n_y=0}\rangle |\phi_{n_z=2}\rangle \quad (2.156)$$

$$= \left(\sum_{i=1}^{\#EC(n_x=1)} c_i |\alpha_{x,i}\rangle \right) \left(\sum_{j=1}^{\#EC(n_y=0)} c_j |\alpha_{y,j}\rangle \right) \left(\sum_{k=1}^{\#EC(n_z=1)} c_k |\alpha_{z,k}\rangle \right) \quad (2.157)$$

$$= \sum_{i=1}^{\#EC(n_x=1)} \sum_{j=1}^{\#EC(n_y=0)} \sum_{k=1}^{\#EC(n_z=1)} \omega_l |\alpha_{x,i}\rangle |\alpha_{y,j}\rangle |\alpha_{z,k}\rangle \quad (2.158)$$

$$\text{avec : } \omega_l = c_i c_j c_k$$

Avec $\#EC(n)$ le nombre d'états-cohérents nécessaires pour décrire le niveau de sous-nombre n (voir tableau 2.4). On a vu que les contributions des états-cohérents à la densité ont une forme analytique de type gaussienne normalisée. De fait, le poids ω_l est un facteur de renormalisation qu'il nous faut estimer. Mais, on sait que nos dimensions (x, y, z) ne sont pas corrélées, ce qui implique que la renormalisation peut se faire en séparant les variables :

$$|\phi_{n_x=1}\rangle = \sum_{i=1}^{\#EC(n_x=1)} c_i |\alpha_{x,i}\rangle \quad (2.159)$$

$$\text{or : } \langle \phi | \phi \rangle = 1 \quad \text{et : } \langle \alpha | \alpha \rangle = 1$$

$$\text{donc : } |c_i|^2 = \frac{1}{\#EC(n_x = 1)} \quad (2.160)$$

$$\Rightarrow |\omega_l|^2 = \frac{1}{\#EC(n_x = 1)} \frac{1}{\#EC(n_y = 0)} \frac{1}{\#EC(n_z = 2)} \quad (2.161)$$

2.4. Résolution de l'équation de Hartree-Fock

Pour résumer et clarifier un peu ce découpage en niveau, on va repartir de la fonction de distribution. La fonction totale est la superposition de la contribution des fonctions de distributions par niveau :

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \sum_{\lambda=0}^{N_{\max}} f_{\lambda}^W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \quad (2.162)$$

Chaque fonction de distribution par niveau est issue du parcours des combinaisons accessibles pour les ensembles de nombres quantiques (n_x, n_y, n_z) , pour les A nucléons à placer :

$$f_{\lambda}^W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \sum_{\substack{\sum \omega_i \leq A \\ n_x, n_y, n_z \\ n_x + n_y + n_z = \lambda}} \omega_i(n_x, n_y, n_z) f_i^W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \quad (2.163)$$

$$\text{avec : } \omega_i(n_x, n_y, n_z) = \frac{1}{\#EC(n_x)} \frac{1}{\#EC(n_y)} \frac{1}{\#EC(n_z)} \quad (2.164)$$

On sait que la fonction de distribution à trois-dimensions est un simple produit des fonctions à une dimensions :

$$f_i^W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = f_i^W(x, p_x) f_i^W(y, p_y) f_i^W(z, p_z) \quad (2.165)$$

$$\text{avec : } f_i^W(x, p) = \frac{1}{2\pi\sqrt{\Delta}} \exp \left\{ -\frac{1}{2\Delta} [\phi_i(x - \langle x \rangle_i)^2 + \chi_i(p - \langle p \rangle_i)^2 - 2\sigma_i(x - \langle x \rangle_i)(p - \langle p \rangle_i)] \right\} \quad (2.166)$$

On pourra ainsi résumer la fonction de distribution totale en joignant 2.162 et 2.163, ce qui nous donne :

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \sum_i^{\#EC_{tot}} \omega_i f_i^W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \quad (2.167)$$

Si l'on intègre la fonction de distribution sur l'ensemble des espaces des phases

$$A = \int f(\mathbf{r}, \mathbf{p}) d\mathbf{r} d\mathbf{p} = \int \sum_i^{\#EC_{tot}} \omega_i f_i^W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) d\mathbf{r} d\mathbf{p} \quad (2.168)$$

$$= \sum_i^{\#EC_{tot}} \omega_i \int f_i^W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) d\mathbf{r} d\mathbf{p} \quad (2.169)$$

$$(2.170)$$

Comme les états-cohérents 2.166 sont de norme unitaire :

$$\Rightarrow \sum_i^{\#EC_{tot}} \omega_i = A \quad (2.171)$$

Les poids ω_i ne sont pas tous égaux, car cela dépend tout d'abord du nombre N et de la combinaison (n_x, n_y, n_z) . Les approches semi-classiques types Boltzmann utilisent

un nombre fixé de gaussiennes par nucléon, les poids ω_i seraient tous identiques et simplement égaux au rapport du nombre de nucléons par le nombre totale de gaussiennes. Ainsi, dans une limite semi-classique, on peut dire que les poids ω_i représente le nombre de nucléons par gaussienne. (sachant que les ω_i **ne sont pas tous égaux**).

Nous allons résumer l'ensemble des différentes parties qui décrivent la méthode de procéder de notre modèle pour résoudre l'équation de Hartree-Fock pour un noyau.

Le premier élément principal est que l'on cherche à décrire notre noyau à l'aide d'un modèle en couche, appuyé du formalisme transporté par l'approximation d'un oscillateur harmonique quantique. Pour cette approximation, le point de départ est la **pulsation** de notre oscillateur, qui plus tard, sera ré-exprimé en **courbure**. La pulsation va être soit estimée sur notre potentiel de départ (le Woods-Saxon) pour amorcer la méthode itérative. Soit estimée directement sur le **potentiel de champ-moyen** de Skyrme calculé à partir de la densité de l'itération précédente.

Une fois que nous avons notre *courbure*, nous pouvons calculer les fonctions d'ondes de l'oscillateur harmonique quantique. De ces fonctions d'ondes projetées dans l'espace des positions, nous allons extraire des informations, correspondant aux trajectoires dans l'espace des phases associées dans un puits de potentiel harmonique à un niveau d'énergie constante. Cette trajectoire est reconstruite dans l'espace des phases, après une projection des fonctions d'onde avec une transformation de Wigner. La courbure nous donne exactement le paramètre en impulsion manquant à la trajectoire dans l'espace des phases. De plus, nous allons tirer de nos fonctions d'onde une largeur, une extension que nous allons restituer à nos états-cohérents (ondelettes de décomposition de nos fonctions d'ondes) afin de reproduire au mieux : la fonction d'onde, mais aussi sa transformée de Wigner dans l'espace des phases. De fait, pour un espace des phases, nous attribuerons un nombre d'états-cohérents nécessaires pour reproduire de façon satisfaisante la transformée de Wigner de la fonction d'onde.

Avec ce cadre là, nous allons paver notre espace des phases en parcourant les niveaux de nombre quantique N , du fondamental jusqu'au niveau maximal (dépendant de la masse du noyau). Pour chaque niveau, nous allons parcourir les dégénérescences disponibles (toujours en fonction du nombre de nucléons) et paver les espaces de phases dans chaque dimension simultanément, afin d'obtenir une distribution à trois-dimensions. Pour chaque dégénérescence, on attribuera deux nucléons (même état, mais de spin opposé).

Le système étant itératif, il nécessite une condition de convergence. Celle-ci est fixée sur la convergence (ou la faible variation d'une itération à l'autre) des énergies de Fermi. Ensuite, l'information contenue dans la fonction de distribution nous permet de calculer des observables comme : la densité, les énergies cinétiques, potentielles, coulombienne et le rayon. Toutes ces observables sont comparables aux données expérimentales et aux résultats des modèles macroscopiques comme le modèle de la Goutte Liquide.

Le programme de simulation est détaillé techniquement en annexe A

2.5 Applications à différents noyaux

Dans cette partie, nous allons montrer différents résultats concernant le calcul des noyaux à l'équilibre. Rappelons que ces noyaux constituent une condition initiale à la dynamique, le but n'est pas d'obtenir une représentation détaillée des noyaux et de leur structure mais d'avoir une description de leurs propriétés globales compatibles avec des résultats expérimentaux. Pour cela, on peut s'appuyer sur des observables de type 1-Corps issues de notre description, comme l'énergie de liaison du noyau et son rayon.

Dans un premier temps, nous allons revenir sur les différentes étapes de modélisation d'un noyau. Nous prendrons le cas de l'étain-120 : $^{120}_{50}\text{Sn}$.

Dans un second temps, nous montrerons des résultats plus globaux, sur un ensemble des noyaux. Nous discuterons de la validité du modèle et de l'approche, ses atouts et ses limites.

2.5.1 Modélisation de l'étain-120

Calcul des niveaux maximaux

Tout d'abord, on cherche à estimer le niveau maximal pour chaque type de nucléon.

TABLE 2.6 – Calcul des niveaux pour le $^{120}_{50}\text{Sn}$

$^{120}_{50}\text{Sn}$			
70 neutrons		50 protons	
N=0	70-(2)=68	50-(2)=48	N=0
N=1	68-(6)=62	48-(6)=42	N=1
N=2	62-(12)=50	42-(12)=30	N=2
N=3	50-(20)=30	30-(20)=10	N=3
N=4	30-(30)=0	10-(30)=-20	N=4
$N_{max}(n)=4$		$N_{max}(p)=4$	

On remarque sur le tableau 2.6 que la couche $N = 4$ est remplie pour les neutrons et incomplète pour les protons.

Boucle itérative

A chaque itération, on utilise le même processus :

- Ajustement du potentiel avec un oscillateur harmonique
- Calcul les fonctions d'ondes
- Décomposition des fonctions d'onde en états-cohérents, construction de la matrice densité et de la fonction de distribution dans l'espace des phases
- On vérifie la convergence sur les niveaux de Fermi
- Soit on converge, soit on recommence

On va d'abord s'intéresser aux allures des potentiels en fonction de la convergence. En ce qui concerne les neutrons : on observe sur la figure 2.7 que la première itération (le Woods-Saxon) est très différente des autres allures. Ce qui a pour effet de provoquer une forte répulsivité centrale pour la deuxième itération (potentiel positif).

Les itérations suivantes oscillent autour d'une position d'équilibre et l'allure converge vers l'allure finale.

On observe sur la figure 2.7 que la première itération (le Woods-Saxon) est très diffé-

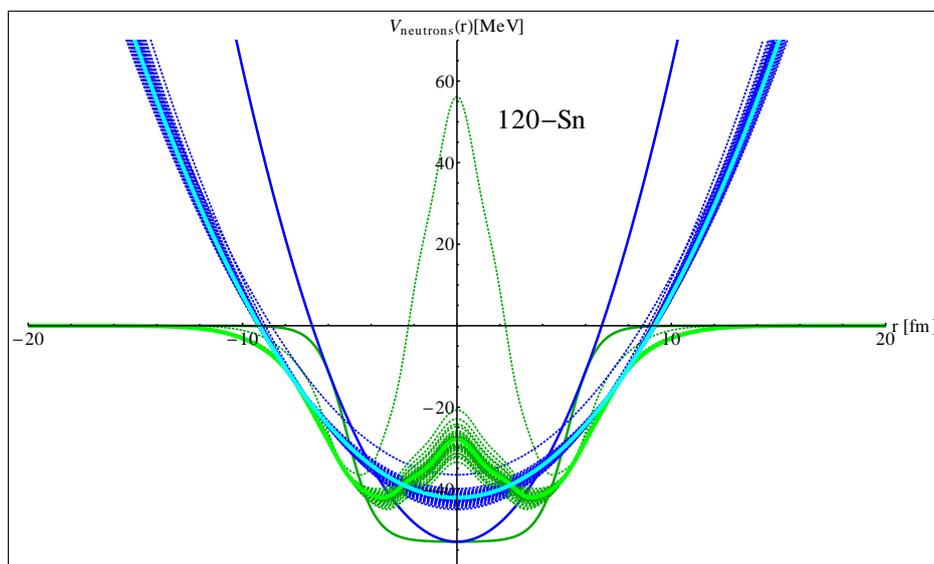


FIGURE 2.7 – Évolution du potentiel exact et de l'ajustement harmonique pour les neutrons en fonction de la convergence.
 En gros trait cyan et vert clair : le potentiel final et son ajustement harmonique.
 En trait moyen bleu et vert : le potentiel initial (Woods-Saxon) et son ajustement harmonique.
 En traits fins verts et bleus : les potentiels et leur ajustement à chaque itération (36 au total).

rente des autres allures. Ce qui a pour effet de provoquer une forte répulsivité centrale pour la deuxième itération (potentiel positif). Les itérations suivantes oscillent autour d'une position d'équilibre et l'allure converge vers l'allure finale.

Pour les protons, on retrouve la même allure que pour les neutrons, mais l'ensemble est rehaussée avec le potentiel coulombien (toujours positif). D'ailleurs, on voit que pour les plus grandes distances, le potentiel est positif. Néanmoins, l'ajustement harmonique prend peu en compte les effets à grande portée.

Pour rendre compte de la convergence du programme, qui est basée sur la faible variation de la somme des énergies de Fermi (en valeur absolue) d'une itération à la suivante, on peut regarder celles-ci sur la figure 2.9.

Ajustement des fonctions d'ondes

L'ajustement des fonctions d'onde pour la décomposition en états-cohérents est faite à chaque itération. Mais nous allons la détailler pour l'itération finale. Pour chaque niveau (sauf $n = 0$, on y reviendra plus tard), on estime la position du premier pic (ou du dernier,

2.5. Applications à différents noyaux

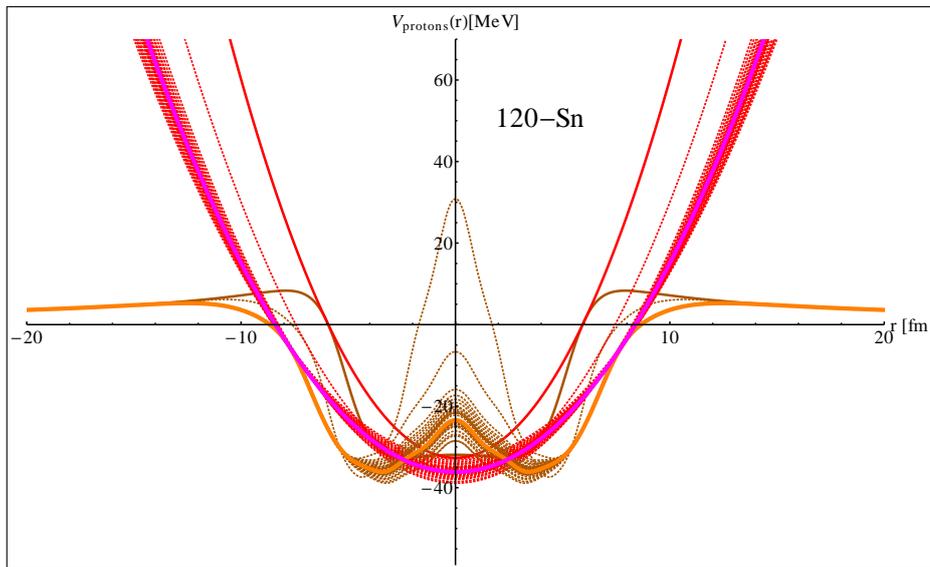


FIGURE 2.8 – Évolution du potentiel exact et de l’ajustement harmonique pour les protons en fonction de la convergence.
 En gros trait orange et magenta : le potentiel final et son ajustement harmonique.
 En trait moyen marron et rouge : le potentiel initial (Woods-Saxon) et son ajustement harmonique.
 En traits fins marrons et oranges : les potentiels et leur ajustement à chaque itération (36 au total).

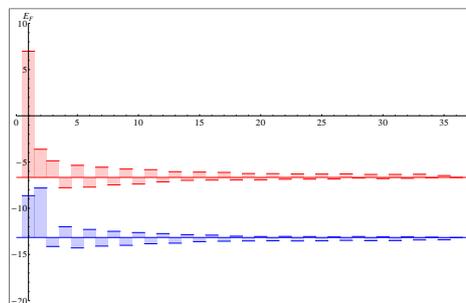


FIGURE 2.9 – Évolution des énergies de Fermi (proton en rouge, neutron en bleu) en fonction de l’itération de calcul (36 au total) pour un noyau d’étain-120. Les barres horizontales représentent les valeurs finales des énergies de Fermi.

la fonction est anti-symétrique) et la largeur de son semi-profil gaussien. On peut représenter ces ajustements avec des états-cohérents dans l’espace des configurations comme sur la figure 2.10. On voit que ceux-ci reproduisent bien le comportement des lobes extérieurs des fonctions d’ondes. Quant au signe de la première oscillation pour les n impairs, vu que nous allons projeter ces fonctions dans l’espace des phases, la première oscillation devient systématique positive. De fait, on ne s’inquiète pas de reproduire le signe lors de l’ajustement des fonctions d’ondes dans l’espace des configurations.

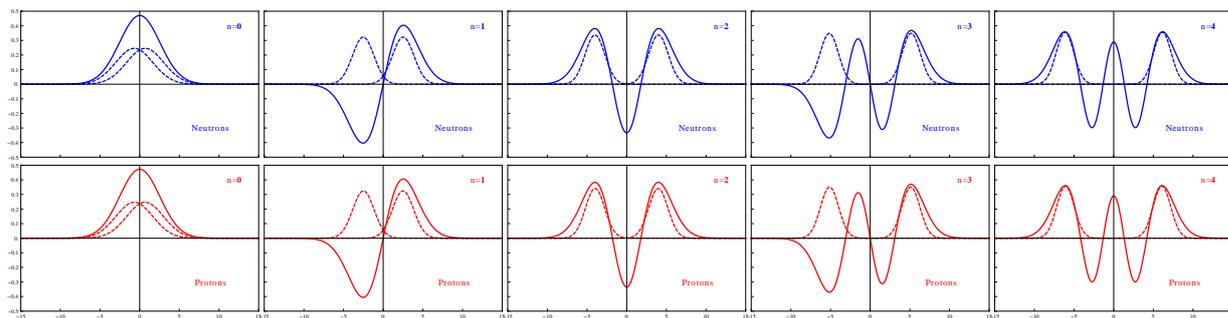


FIGURE 2.10 – Fonctions d’ondes (forme analytique) et décomposition en deux états-cohérents des lobes semi-classiques pour chaque niveau n . En haut (bleu), pour les neutrons. En bas (rouge), pour les protons.

En ce qui concerne $n = 0$, on pourrait utiliser qu’un seul état-cohérent. Car la fonction d’onde est de type gaussienne. Mais il s’avère que lors du remplissage de l’espace des phases, les cas où une combinaison de sous-nombres quantiques (n_x, n_y, n_z) appelle une ou plusieurs fois $n = 0$ (donc un seul état-cohérent), ces décompositions utilisent peu d’état-cohérent. Ce qui augmente énormément le poids des ondelettes, de fait, elles peuvent être dominantes sur la dynamique. Analytiquement, la décomposition utilisée est identique, mais utilise d’avantage d’état-cohérents, pour une distribution des poids entre les ondelettes plus équilibrée.

Parcours des niveaux et pavage de l’espace des phases

Une fois la décomposition des fonctions d’ondes faite, on peut remplir notre espace des phases. Cela se fait niveau par niveau, en partant du fondamental jusqu’au niveau le plus élevé. Pour chaque niveau N , on parcourt toutes les combinaisons (n_x, n_y, n_z) , sous condition qu’il reste des nucléons à placer. Le remplissage par niveau est détaillé sur la figure 2.11. Vu qu’il n’existe qu’une seule combinaison pour $N = 0$, inutile de détailler le parcours de l’algorithme. On observe qu’on parcourt les combinaisons "centrales" d’abord vers les plus périphériques. On préfère privilégier ces combinaisons plus "homogènes" en sous-nombres quantiques les premières. Ce choix a pour objectif de garantir une distribution plus homogène dans l’espace des phases pour une couche non-remplie. L’homogénéité vient du fait que si l’on appelle un même sous-nombre quantique, on utilisera le même nombre d’état-cohérent dans une dimension ou l’autre.

En ce qui concerne la distribution dans l’espace des phases, pour chaque combinaison (n_x, n_y, n_z) , on va disposer les états-cohérents correspondants à chaque sous-nombre quantique. On va prendre l’exemple sur le noyau d’étain-120, pour $N = 3$, la combinaison $(n_x = 1, n_y = 0, n_z = 2)$. Conformément au tableau 2.4, on va disposer 4 états-cohérents pour $n_x = 1$, 4 états-cohérents pour $n_y = 0$ et 4 états-cohérents pour $n_z = 2$. Ce qui revient à disposer $4 \times 4 \times 4 = 64$ états-cohérents en tout pour cette combinaison. Car pour chaque état-cohérent dans l’espace des phases en x , c’est quatre dans l’espace des phases en y , puis pour chaque état-cohérent en y , c’est quatre autres dans l’espace des phases en z . La différence entre ces sous-nombres se joue dans l’ordre en question (pas la même

2.5. Applications à différents noyaux

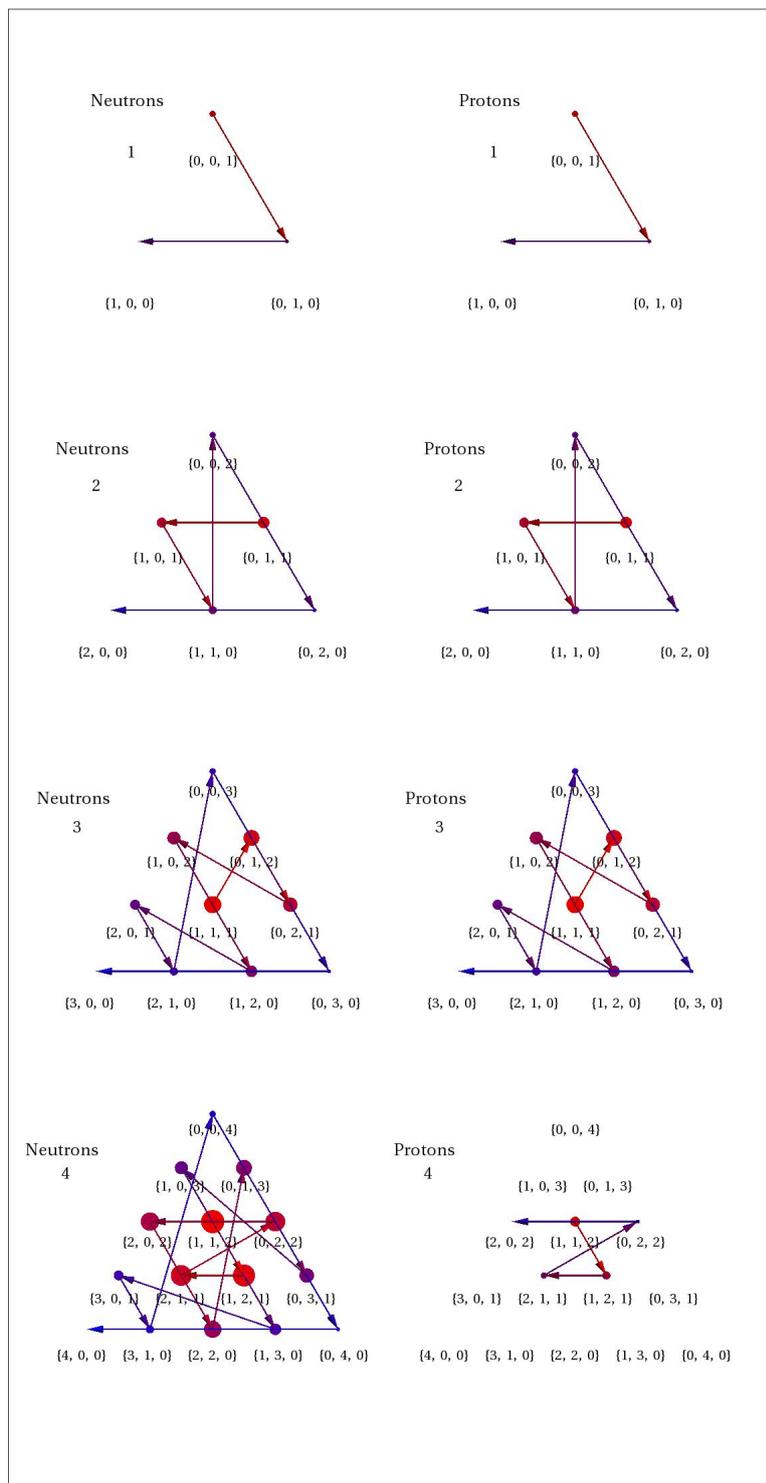


FIGURE 2.11 – Parcours des combinaisons (n_x, n_y, n_z) par niveau N de 1 au niveau maximal. A gauche pour les neutrons, à droite pour les protons. L'ordre va du plus rouge (ou point le plus gros) au plus bleu (point le plus petit).

fonction d'onde), ce cas là est illustré en figure 2.12.

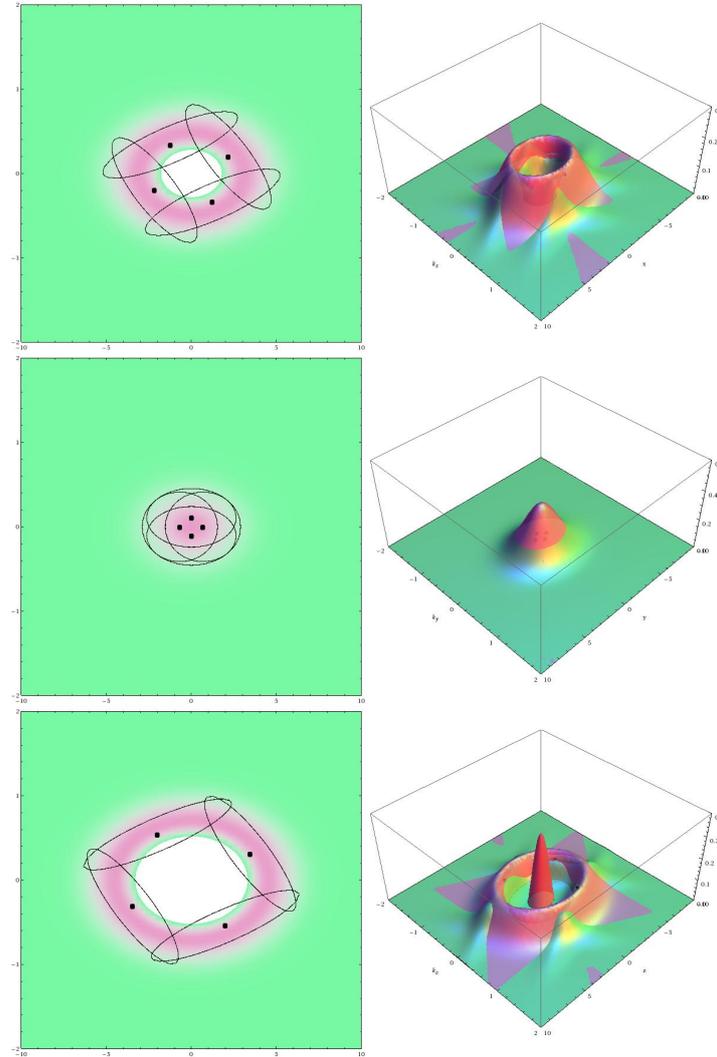


FIGURE 2.12 – De haut en bas : espace des phases en x ($n_x = 1$), en y ($n_y = 0$) et en z ($n_z = 2$). A gauche : représentation "vu-du-dessus" de la transformée de Wigner exacte, en traits et points noirs la coupe et la position des états-cohérents. A droite : la transformée de Wigner exacte (rose), les états-cohérents (vert et points noirs).

Une fois toutes les combinaisons parcourues, notre espace des phases à trois dimensions est pavé. Pour un noyau d'étain-120, le résultat est illustré en figure 2.13. Vu les différents combinaisons de sous-nombres quantiques, il y a une équivalence entre les espaces des phases pour les trois dimensions. Ceux-ci ont été pavés d'une façon strictement identique. Cela est dû au fait que les sous-nombres quantiques appelés nécessitent tous 4 états-cohérents.

Il est plus courant d'observer le résultat de la simulation en s'intéressant à la densité. Illustrée sur la figure 2.14, la densité sur le plan (x, z) est isotrope et possède une diffusivité prononcée à la surface comme conséquence des états-cohérents utilisées. La

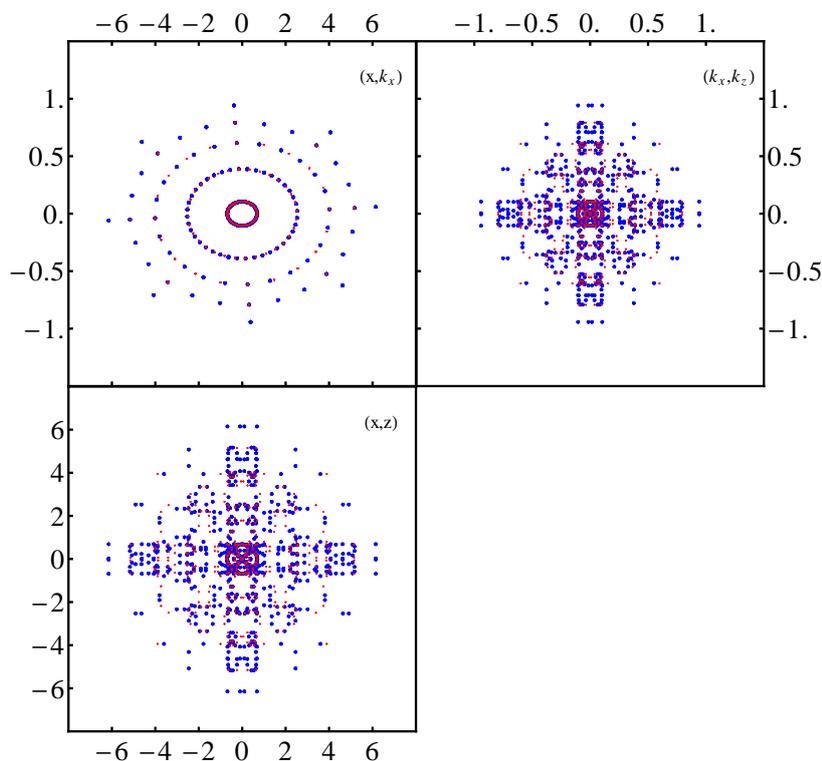


FIGURE 2.13 – En haut à gauche : distribution des positions des états cohérents dans l’espace des phases (x, k_x) . En haut à droite, distribution dans le plan (k_x, k_z) des nombres d’ondes (en $[\text{fm}^{-1}]$). En bas à gauche, distribution dans le plan (x, z) des positions (en $[\text{fm}]$). Pour tous les graphiques, les états cohérents type neutrons sont en bleu et protons en rouge).

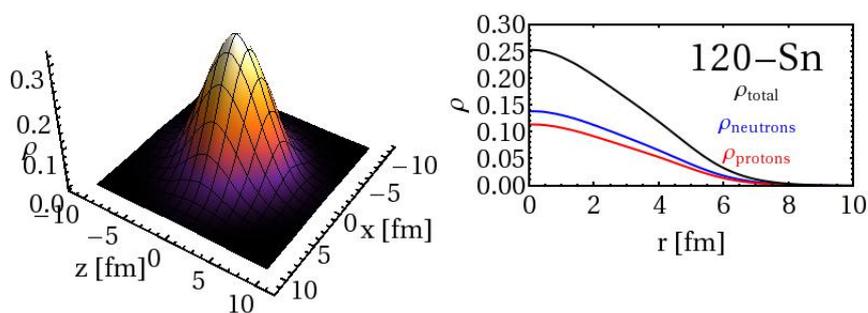


FIGURE 2.14 – Pour un noyau d’étain-120. De gauche à droite : densité isoscalaire en (x, z) , densités de neutrons (bleu), protons (rouge) et totale (noire) à 1-dimension.

densité en r affiche aussi un profil gaussien. On remarque que les valeurs de densités centrales sont relativement élevées (normalement proche de la densité de saturation $\rho_\infty = 0.16[\text{fm}^{-3}]$). Cela dépend premièrement de la paramétrisation du potentiel utilisé. Ensuite cela provient aussi du fait que lors de l’ajustement harmonique, la valeur centrale

ajustée est proche des valeurs les plus basses du potentiel mais pas nécessairement la valeur **centrale** du potentiel. En effet, il existe une légère bosse centrale répulsive, si celle-ci est mal prise en compte lors de l'ajustement, alors le centre du noyau est sur-attractif et atteint des valeurs de densités élevées.

En définitive, on va s'intéresser aux observables macroscopiques qu'on peut extraire de notre simulation. Celles-ci ne rentreront pas en jeu lors de la phase dynamique mais permettent de rendre compte des caractéristiques de notre condition initiale. Les observables les plus courantes sont l'énergie de liaison et le rayon du noyau. Les valeurs obtenues et les écarts relatifs sont résumées dans le tableau 2.7. On remarque un très bon accord pour l'énergie de liaison. Au contraire, le rayon est moins bien reproduit. Une meilleure reproduction de l'énergie de liaison fera perdre de la précision pour les rayons et vice et versa. De plus, la valeur de rayon définie dans le modèle est basée sur une prescription géométrique d'un rayon carré moyen. De fait, la comparaison n'est pas directe mais permet néanmoins de se donner un ordre d'idée.

TABLE 2.7 – Résumé des résultats de simulation comparés à l'expérience [Ang04; NNDC] pour l'étain-120.

Étain-120			
Énergie de liaison [MeV/A]	Exp.	8.504492	1,52%
	Sim.	8.375321	
Rayon [fm]	Exp.	4.6563	10,58%
	Sim.	5.2073	

Dans la prochaine partie, nous allons nous intéresser à la reproduction des énergies de liaisons sur des ensembles de noyaux. Nous avons détaillé les différentes étapes pour la modélisation d'un noyau, ces étapes sont les mêmes pour chaque noyau. Un regard global sur un ensemble de noyau permettra d'avoir un avis plus critique sur l'efficacité du modèle.

2.5.2 Résultats sur un ensemble de noyaux

Carte des noyaux

Nous avons donc utilisé notre modèle sur une large plage de noyaux. La force utilisée est **SkT5** [Ton+84]. Elle a été choisie pour son bon accord avec les énergies de liaisons expérimentales. Ses paramètres sont spécifiés dans le tableau 2.8.

TABLE 2.8 – Paramètres de SkT5 [Ton+84]

SkT5									
t_0 [MeV.fm ³]	t_1 [MeV.fm ⁵]	t_2 [MeV.fm ⁵]	t_3 [MeV.fm ^{$\alpha+1$}]	x_0	x_1	x_2	x_3	α	
-2917.1	328.2	-328.2	18584	-0.295	-0.5	-0.5	-0.5	1/6	

Premièrement, nous allons nous intéresser à l'allure globale de l'énergie de liaison pour tous les noyaux tels que $Z \leq 60$. On calcule l'intégralité des noyaux existants pour

2.5. Applications à différents noyaux

disposer d'une base de données issue du programme pour le calcul des énergies d'excitation (voir Chapitre 5). Sur la figure 2.15, on retrouve bien la vallée de stabilité qui creuse la distribution, à l'exception des noyaux les plus légers. Nous reviendrons plus loin sur cette problématique.

La figure 2.15 donne un aspect global mais ne permet pas d'observer la reproduction

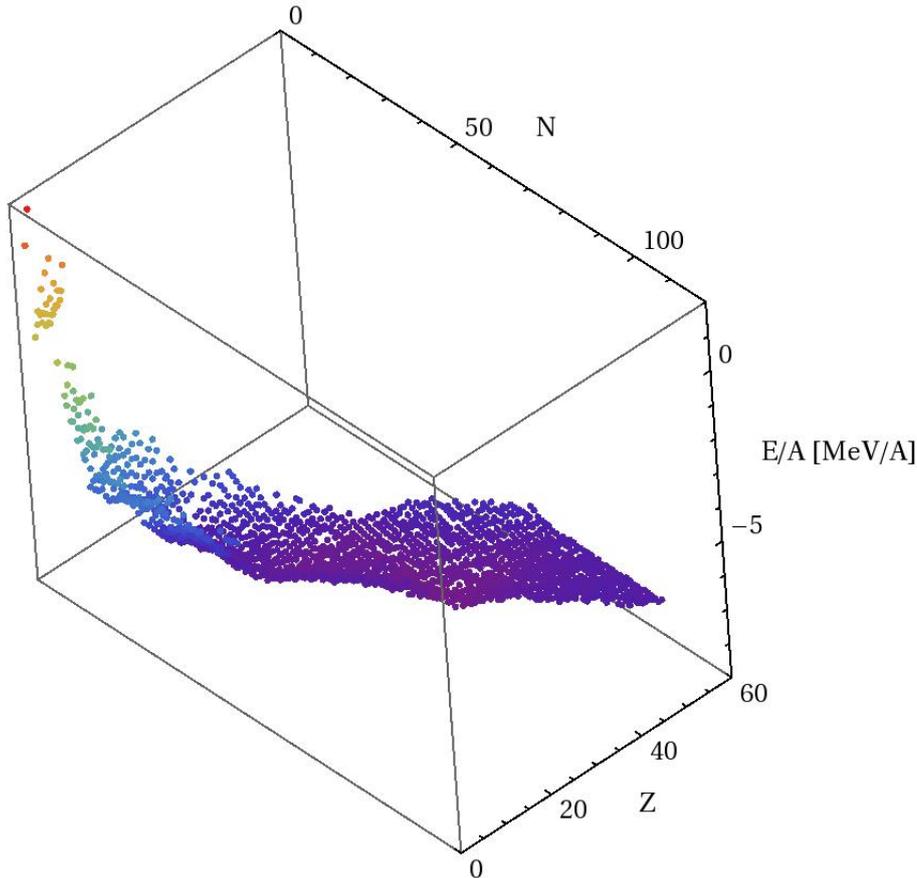


FIGURE 2.15 – Distribution des énergies de liaisons des noyaux avec la force **SkT5** pour $Z \leq 60$.

des énergies de liaison par le programme. On va donc comparer celles-ci avec des valeurs expérimentales. Sur la figure 2.16, nous avons simulé les différents noyaux stables utilisés couramment en faisceau/cible lors des collisions d'ions lourds. On voit une bonne reproduction du comportement pour les noyaux les plus massifs. En effet, pour des $Z \leq 20$, le modèle reproduit plus difficilement les énergies de liaisons.

Comme on l'observe sur la figure 2.17, les noyaux les plus massifs sont mieux reproduits. On a de très faibles écarts-relatifs pour les noyaux riches en neutrons tels que $Z \geq 30$. Si on monte en écart-relatif, on observe l'apparition de deux îlots aux alentours de $Z = 30$ et $Z = 50$. Globalement, on voit à nouveau que le modèle reproduit mieux les énergies de liaisons des noyaux plus lourds. Contrairement aux noyaux les plus légers, les écarts sont considérables à partir de $N \geq 20$. On remarque aussi que des structures se forment aux alentours des fermetures de couches. Les énergies semblent mieux reproduites sur ces niveaux-là.

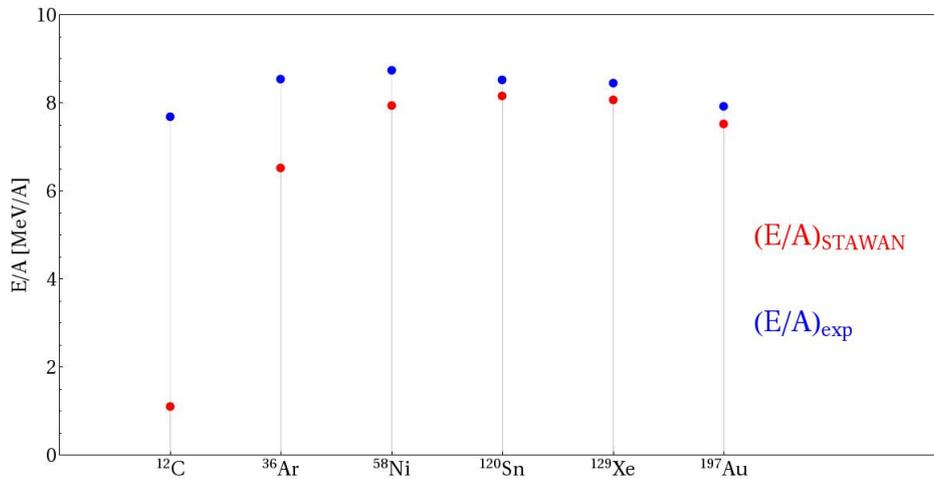


FIGURE 2.16 – Comparaison des énergies de liaisons des noyaux avec la force **SkT5** et expérimentales.

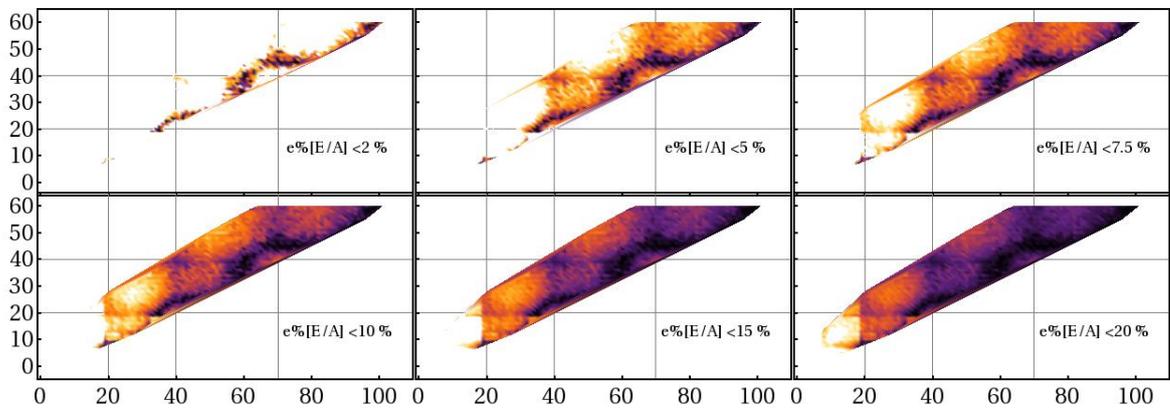


FIGURE 2.17 – Carte de noyaux.

Comparaison des écarts-relatifs entre énergies de liaisons simulées (**SkT5**, $Z \leq 60$) et expérimentales [NNDC].

Blanc : hors de portée de la coupure d'écart relatif.

Noir : valeurs les plus basses pour la coupure d'écart relatif.

Les traits fins représentent les fermetures de couches (20,40,70). Coupures à 2, 5, 7.5, 10, 15 et 20 % .

Plus c'est foncé, mieux c'est.

Nous l'avons évoqué plus tôt, mais une bonne reproduction des énergies de liaisons induit une mauvaise reproduction des rayons. Comme on le voit sur la figure 2.18, cette tendance se confirme. Nos reproductions sont meilleures pour les petits noyaux $Z \leq 20$. Contrairement aux énergies de liaisons, il ne semble pas se former de structures, ou d'îlots. Cependant, une tendance forte se dégage pour $N = 19$ et $Z = 19$, juste avant la fermeture. La parité du noyau pourrait être mise en cause, car cet effet se reproduit

2.5. Applications à différents noyaux

juste avant les fermetures de couches.

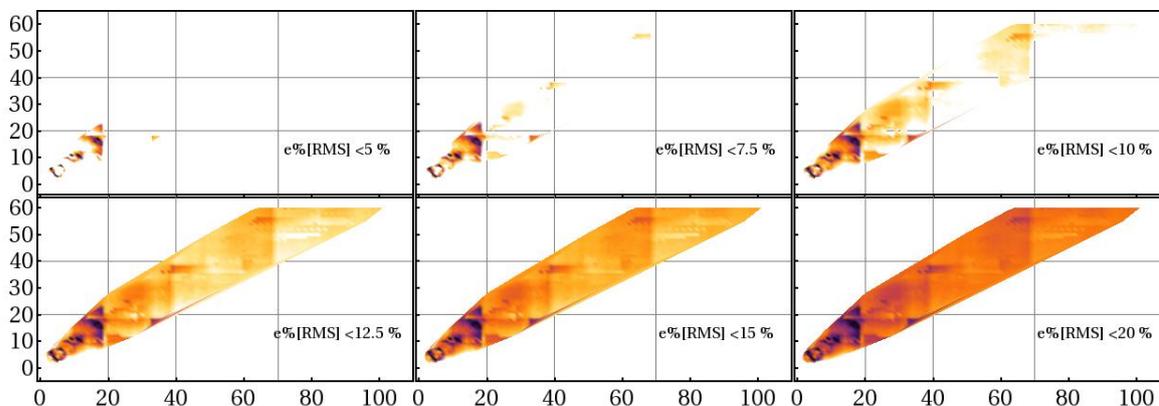


FIGURE 2.18 – Carte de noyaux.

Comparaison des écarts-relatifs entre rayons carrés-moyens ($SkT5, Z \leq 60$) et rayons de charge expérimentaux [NNDC].

Blanc : hors de portée de la coupure d'écart relatif.

Noir : valeurs les plus basses pour la coupure d'écart relatif.

Les traits fins représentent les fermetures de couches (20,40,70). Coupures à 5, 7.5, 10, 12.5, 15 et 20 % .

Plus c'est foncé, mieux c'est.

Calcium, nickel et étain

On va désormais s'intéresser au détail en prenant des noyaux exemples. Notre intérêt va se porter sur trois noyaux : le calcium, le nickel et l'étain.

Sur les figures 2.19, 2.20 et 2.21, on peut observer un bon accord sur les énergies de

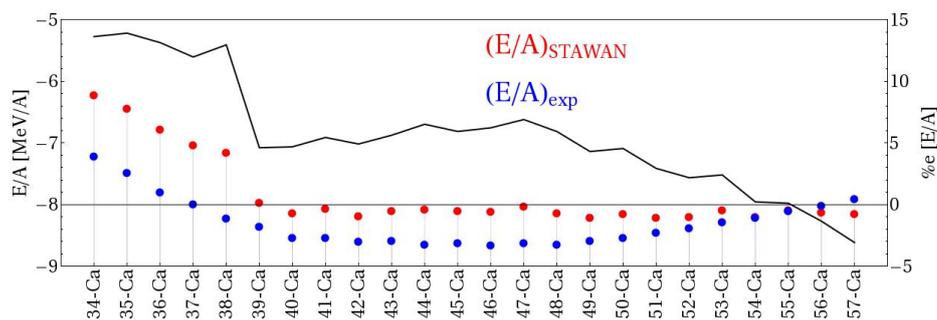


FIGURE 2.19 – Chaîne isotopique du Calcium. A gauche et points rouges et bleus : énergies de liaisons théoriques et expérimentales. A droite avec courbe noire : écart-relatif de la valeur théorique à la valeur expérimentale.

liaisons. Plusieurs choses sont à noter. Tout d'abord, on observe la reproduction du comportement en fonction de la masse de l'isotope, les noyaux simulés ont un comportement semblable en marquant un minimum autour des noyaux les plus stables. Pour le nickel,

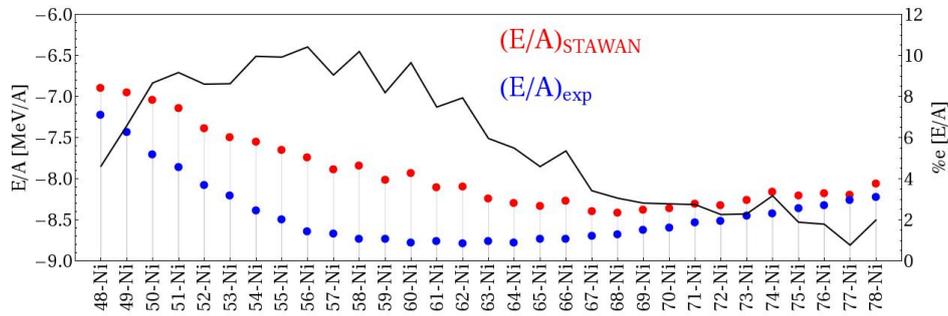


FIGURE 2.20 – Chaîne isotopique du Nickel. A gauche et points rouges et bleus : énergies de liaisons théoriques et expérimentales. A droite avec courbe noire : écart-relatif de la valeur théorique à la valeur expérimentale.

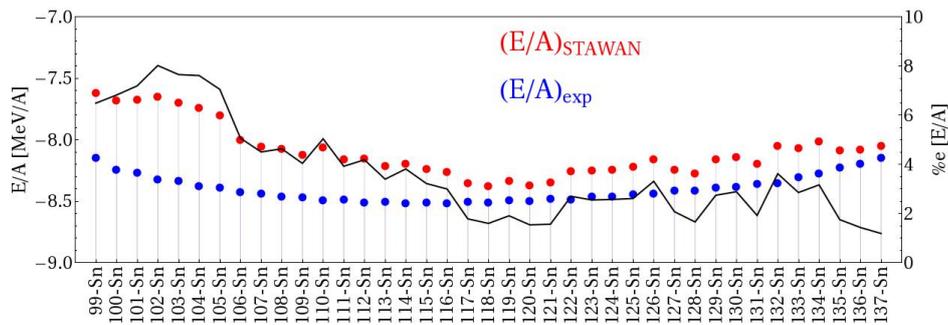


FIGURE 2.21 – Chaîne isotopique de l'étain. A gauche et points rouges et bleus : énergies de liaisons théoriques et expérimentales. A droite avec courbe noire : écart-relatif de la valeur théorique à la valeur expérimentale.

ce minimum semble décalé et est moins bien défini, comme le calcium qui ne marque pas vraiment une vraie remontée pour les isotopes les plus lourds. Pour l'étain, le comportement est très fidèle. Deuxièmement, pour les trois noyaux, on remarque une diminution globale de l'écart-relatif avec la masse. On retrouve notre observation sur le bon accord en énergie de liaison pour les noyaux les plus riches en neutrons. Cet effet peut être expliqué avec la taille du système. Plus un système est lourd et massif, plus il a de participants. De fait, la description en champ-moyen est mieux adaptée à des systèmes plus massifs.

Sur les figures 2.22,2.23 et 2.24, on peut observer accord acceptable sur les rayons. Comme on l'a dit précédemment, une bonne estimation des énergies de liaisons se traduit par une moins bonne détermination des rayons. De plus, la tendance est bien reproduite, le rayon étant proportionnel à la taille du système, cela est cohérent. Néanmoins, on ne remarque pas de nette amélioration de l'écart relatif avec la masse du système.

2.5. Applications à différents noyaux

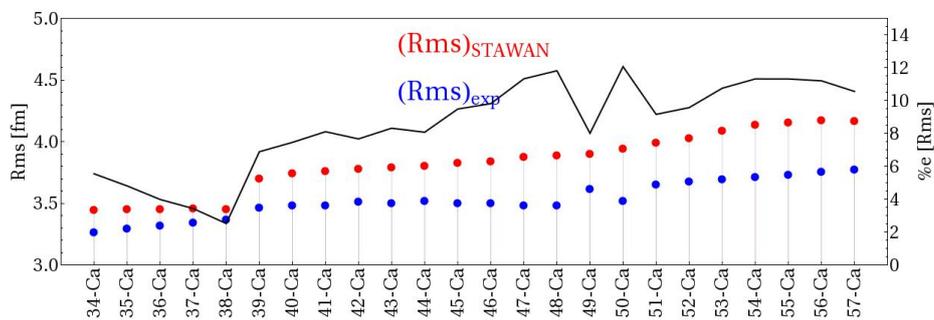


FIGURE 2.22 – Chaîne isotopique du Calcium. A gauche et points rouges et bleus : rayons carrés moyens théoriques et expérimentaux. A droite avec courbe noire : écart-relatif de la valeur théorique à la valeur expérimentale.

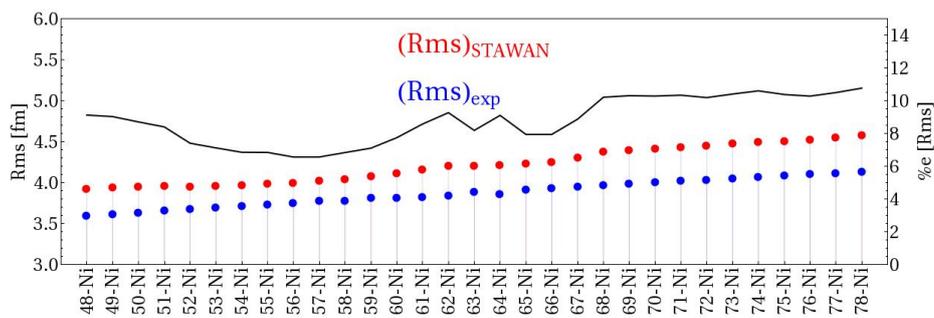


FIGURE 2.23 – Chaîne isotopique du Nickel. A gauche et points rouges et bleus : rayons carrés moyens théoriques et expérimentaux. A droite avec courbe noire : écart-relatif de la valeur théorique à la valeur expérimentale.

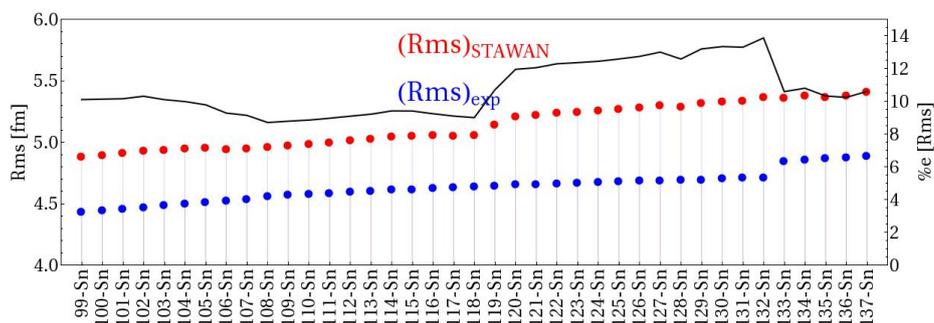


FIGURE 2.24 – Chaîne isotopique de l'étain. A gauche et points rouges et bleus : rayons carrés moyens théoriques et expérimentaux. A droite avec courbe noire : écart-relatif de la valeur théorique à la valeur expérimentale.

2.6 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons décrit l'approche qui permet de construire la condition initiale à la dynamique. Elle a consisté à résoudre l'équation de Hartree-Fock auto-cohérent par une méthode itérative. Dans **STAWAN**, nous décomposons les fonctions d'onde en ondelettes, les états-cohérents, l'objectif est ici de fournir un système prêt à "lancer" dans la dynamique. En effet, les états-cohérents ont la possibilité de se faire propager, ils ont une dépendance temporelle. Ce qui n'est pas le cas des fonctions d'ondes analytiques de l'oscillateur harmonique. De plus, contrairement aux modèles semi-classiques, nous utilisons un Hartree-Fock, qui est une solution de Time-Dependant-Hartree-Fock à l'équilibre, de fait, on a un système d'une grande stabilité numérique.

Nous avons vu que nos résultats sont globalement en bon accord avec les valeurs expérimentales. Cela donne une bonne idée de la qualité de notre condition initiale à la dynamique. Mais, un bon accord permet aussi de quantifier la qualité d'une force utilisée. En effet, les résultats de STAWAN sont très rapide à obtenir (entre quelques secondes et quelques minutes) et cela permet d'avoir un aperçu du comportement global d'une paramétrisation d'une force.

Mais STAWAN dispose aussi de plusieurs axes d'amélioration qui n'ont pas encore été mis en place.

- Le pavage de l'espace des phases comme on le voit sur la figure 2.13 n'est pas encore satisfaisant. Le pavage doit être beaucoup plus homogène et faire moins de "trous" et pourrait être amélioré.
- L'ajustement harmonique du potentiel n'est fait que dans une seule dimension, un véritable traitement nécessite un ajustement harmonique dans chaque dimension. Ainsi, chaque dimension aura sa propre pulsation (ou courbure). On a imposé une symétrie sphérique qui n'est pas garantie pour tous les noyaux (et assez rare d'ailleurs). Une première approche serait de considérer un oscillateur harmonique anisotropique [RS80].
- Le potentiel initial (Woods-Saxon) est très exotique pour le programme, de fait, l'itération suivante est très violente et il est difficile de quantifier les perturbations numériques associées. L'idée pourrait être de proposer une densité initiale et de calculer le potentiel tel quel à partir de cette densité.
- De part le profil asymétrique du lobe semi-classique des fonctions d'ondes, l'ajustement par les états-cohérents peut être amélioré, en ne se basant plus uniquement sur la position du maximum, mais sur un maximum de vraisemblances.
- L'approximation harmonique est difficilement évitable. Néanmoins, un ajustement plus fin, de la profondeur du puits de potentiel pourrait améliorer la densité centrale des noyaux avec un minimum de perte sur la reproduction des énergies de liaisons.
- Le critère de convergence est satisfaisant en l'état, mais il peut être raffiné voire remplacé par une meilleure sonde de la convergence du code.
- En l'état, aucune prescription n'est prise sur le principe de Pauli, même s'il est garanti par construction, des tests sur l'occupation peuvent être envisagés, voire une méthode de pavage de l'espace des phases dépendante directement du principe de Pauli plutôt qu'une distribution géométrique.

2.6. Conclusion

Ces modifications pourraient apporter des améliorations au code, mais le cœur-même de ce travail de thèse repose sur la dynamique, ce qui fera l'objet du prochain chapitre. En l'état, STAWAN fournit des conditions initiales satisfaisantes pour la dynamique.

Description de la dynamique nucléaire

Il survit pendant 5 ans en se
nourrissant exclusivement aux pots de
thèse #GorafiESR

@mathildeD_V 06 :20 - 1 févr. 2016

3.1 Introduction

L'objectif principal de ce travail est la description **dynamique** de la collision d'ions lourds aux énergies intermédiaires. Pour les énergies de collisions les plus faibles (dans la dizaine de MeV par nucléon), l'approche TDHF semble toute indiquée. En effet, les collisions nucléon-nucléon ne sont pas assez énergétiques et le principe de Pauli bloque les diffusions des nucléons. De fait, le formalisme de Hartree-Fock en particules indépendantes est très adéquat. Notre condition initiale, décrite dans le chapitre précédent est "prête", au sens où sa description en états-cohérents est parfaitement adaptée (et prévue pour) une évolution dynamique.

Tout d'abord, nous reviendrons au formalisme de Hartree-Fock et la déduction des équations d'évolutions régissant la dynamique de nos états-cohérents. Par la suite, nous irons plus loin que le formalisme TDHF, nous discuterons de l'approche ETDHF (évoquée dans le Chapitre 1), pourquoi cette évolution est nécessaire, en quoi est-elle justifiée et comment la mettre en place. Nous allons revoir succinctement les différents processus de collisions que nous pouvons observer à ces énergies de collisions là. Ce sera un rappel un peu détaillé des scénarii vus dans le Chapitre 1. Enfin, nous illustrerons des résultats du programme et discuterons de la stabilité du modèle. Finalement, la mutation de l'approche TDHF dans le programme vers une utilisation différente, la description de la matière nucléaire à très haute-densité, dans la croûte des étoiles à neutrons sera abordée.

3.2 Equations de Hartree-Fock dépendantes du temps

Tout d'abord, on va s'intéresser à la partie TDHF, donc purement l'évolution temporelle en champ-moyen. Comme on en a discuté précédemment, les deux processus qui contribuent à la dynamique : champ-moyen et effets dissipatifs ne se produisent pas sur la même échelle de temps, la modélisation de ces deux effets aboutit sur deux équations

distinctes. Les effets dissipatifs des corrélations d'ordres supérieurs seront traitées ultérieurement. L'équation TDHF 1.48 est :

$$i\dot{\rho} = [h(\rho), \rho] \quad (3.1)$$

Avec l'opérateur densité ρ qui est décomposé en fonctions d'ondes distribuées sur la bases des états $|\alpha_i\rangle$:

$$\rho = \sum_{\lambda} n_{\lambda} |\phi_{\lambda}\rangle \langle \phi_{\lambda}| = \sum_{\lambda} \sum_{ij} \beta_{ij}^{\lambda} |\alpha_i^{\lambda}\rangle \langle \alpha_j^{\lambda}| \quad (3.2)$$

On a évoqué au chapitre 1 que les termes hors-diagonale de la matrice densité sont très fluctuants et décroissent rapidement avec le temps [DH82], de fait, c'est la diagonale qui contient l'essentiel de l'information. Donc on ne s'occupera que de l'évolution de celle-ci. La résolution de l'évolution de ρ dans le temps peut se comprendre de deux façons, soit par la dépendance en temps des coefficients β_{ij}^{λ} soit par l'évolution dynamique des états de la base. Nous opterons pour des coefficients constants dans le temps, ce qui se traduit par la résolution de l'équation TDHF sur les états de base :

$$i \frac{\partial}{\partial t} |\alpha_i\rangle = h(\rho) |\alpha_i\rangle \quad (3.3)$$

Cette équation est très fortement liée à la condition initiale dont on a parlé dans le chapitre 2 précédent. La résolution de cette équation n'est pas analytique. Le problème reste auto-cohérent à cause de la dépendance en densité de l'Hamiltonien, et de fait que la densité soit issue des états de la base, ceux-ci soumis à l'évolution de l'Hamiltonien. Donc on traitera cette équation avec une approche numérique.

Pour traiter l'évolution des états-cohérents corrélés, ondelettes choisies pour la décomposition, on va devoir exprimer l'ensemble des équations régissant l'évolution des paramètres qui caractérisent l'état-cohérent.

3.2.1 Principe variationnel

L'utilisation des principes variationnels constitue une approche fiable en terme de résolution numérique [Hel75; Hel76; RM82]. En injectant des fonctions d'essai dans le principe variationnel, on obtient des solutions approchées qui minimisent l'erreur et des équations d'évolution pour l'évolution des différents paramètres de la fonction d'essai. Pour commencer, on exprime le principe d'action :

$$\mathcal{A} = \int_{t_1}^{t_2} dt \langle \alpha | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - h | \alpha \rangle \quad (3.4)$$

$$= \int_{t_1}^{t_2} dt \left(i\hbar \langle \alpha | \frac{\partial}{\partial t} | \alpha \rangle - \langle \alpha | h | \alpha \rangle \right) \quad (3.5)$$

3.2. Equations de Hartree-Fock dépendantes du temps

Dans un souci de simplicité, on rappelle l'expression analytique d'un état-cohérent corrélé seulement à 1 dimension :

$$\langle x|\alpha\rangle = \alpha(x) = \left(\frac{1}{\pi\hbar|\alpha_2|^2}\right)^{1/4} e^{-\frac{1}{2\hbar}\frac{\alpha_1}{\alpha_2}(x-\langle x\rangle)^2} e^{\frac{i}{\hbar}p(x-\langle x\rangle)} \quad (3.6)$$

$$\begin{aligned} \text{avec :} \quad \alpha_1 &= \sqrt{m\omega}(1 - i|\gamma|^2 + i\gamma^2) & \alpha_2 &= \frac{1}{\sqrt{m\omega}}(1 - i|\gamma|^2 - i\gamma^2) \\ \langle x\rangle &= \sqrt{2\hbar}\text{Re}(\beta\alpha_2^*) & \langle p\rangle &= \sqrt{2\hbar}\text{Im}(\beta\alpha_2^*) \\ \chi &= \frac{\hbar}{2}|\alpha_2|^2 & \phi &= \frac{\hbar}{2}|\alpha_1|^2 \\ \sigma &= -\frac{\hbar}{2}\text{Im}(\alpha_1\alpha_2^*) \end{aligned} \quad (3.7)$$

Les quatre paramètres **suffisants** pour décrire intégralement un état-cohérent sont : $\langle x\rangle, \langle p\rangle, \chi$ et $\gamma = \sigma/2\chi$.

3.2.2 Équations d'évolution

Pour extraire les équations d'évolution, on va expliciter les dérivés temporelles. On notera $q = \langle x\rangle$ et $p = \langle p\rangle$. On commence par le premier terme de 3.5 :

$$\begin{aligned} \langle \alpha | \frac{\partial}{\partial t} | \alpha \rangle &= \int dx \alpha^*(x) \frac{\partial}{\partial t} \alpha(x) \\ &= \int dx \alpha^*(x) \frac{\partial}{\partial t} \left[\left(\frac{1}{\pi\hbar|\alpha_2|^2}\right)^{1/4} e^{-\frac{1}{2\hbar}\frac{\alpha_1}{\alpha_2}(x-q)^2} e^{\frac{i}{\hbar}p(x-q)} \right] \\ &= \int dx \alpha^*(x) \left\{ \frac{\partial}{\partial t} \left[\left(\frac{1}{\pi\hbar|\alpha_2|^2}\right)^{1/4} \right] (\pi\hbar|\alpha_2|^2)^{1/4} \alpha(x) \right. \\ &\quad \left. + \frac{\partial}{\partial t} \left[-\frac{1}{2\hbar}\frac{\alpha_1}{\alpha_2}(x-q)^2 + \frac{i}{\hbar}p(x-q) \right] \alpha(x) \right\} \\ &= \frac{1}{4} \left(\frac{1}{\pi\hbar|\alpha_2|^2}\right)^{-3/4} \frac{1}{\pi\hbar} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{|\alpha_2|^2}\right) (\pi\hbar|\alpha_2|^2)^{1/4} \int dx \alpha^*(x) \alpha(x) \\ &\quad + \left\{ -\frac{1}{2\hbar} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\alpha_1}{\alpha_2}\right) \int dx \alpha^*(x) (x-q)^2 \alpha(x) \right\} + \left\{ -\frac{1}{2\hbar} \frac{\alpha_1}{\alpha_2} (-2\dot{q}) \int dx \alpha^*(x) [(x-q)] \alpha(x) \right\} \\ &\quad + \left\{ \frac{i}{\hbar} \dot{p} \int dx \alpha^*(x) (x-q) \alpha(x) \right\} + \left\{ \frac{i}{\hbar} p [-\dot{q}] \int dx \alpha^*(x) \alpha(x) \right\} \\ &= \frac{1}{4} \frac{1}{\pi\hbar} (\pi\hbar|\alpha_2|^2) \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{|\alpha_2|^2}\right) - \frac{1}{2\hbar} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\alpha_1}{\alpha_2}\right) \frac{\hbar}{2} |\alpha_2|^2 - \frac{i}{\hbar} p \dot{q} \\ &= \frac{1}{4} |\alpha_2|^2 \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{|\alpha_2|^2} - \frac{\alpha_1}{\alpha_2}\right) - \frac{i}{\hbar} p \dot{q} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \langle \alpha | \frac{\partial}{\partial t} | \alpha \rangle &= \frac{1}{4} |\alpha_2|^2 \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{|\alpha_2|^2} (1 - \alpha_1 \alpha_2^*) \right) - \frac{i}{\hbar} p \dot{q} \\
 &= \frac{1}{4} |\alpha_2|^2 \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\hbar}{2\chi} \times (-i \text{Im}(\alpha_1 \alpha_2^*)) \right) - \frac{i}{\hbar} p \dot{q} \\
 &= \frac{1}{4} |\alpha_2|^2 \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{i\sigma}{\chi} \right) - \frac{i}{\hbar} p \dot{q} = \frac{i}{\hbar} \chi \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\sigma}{2\chi} \right) - \frac{i}{\hbar} p \dot{q} \\
 \Rightarrow i\hbar \langle \alpha | \frac{\partial}{\partial t} | \alpha \rangle &= p \dot{q} - \chi \dot{\gamma} \quad \text{avec : } \gamma = \frac{\sigma}{2\chi}
 \end{aligned} \tag{3.8}$$

Pour le deuxième terme concernant l'Hamiltonien :

$$\begin{aligned}
 \langle \alpha | h | \alpha \rangle &= \langle \alpha | \frac{p^2}{2m} + V(x, t) | \alpha \rangle \\
 &= \frac{\langle \alpha | p^2 | \alpha \rangle}{2m} + \langle \alpha | V | \alpha \rangle \\
 &= \frac{\langle p \rangle^2}{2m} + \frac{\phi}{2m} + \langle V \rangle \\
 &\quad \text{avec : } \langle V(x) \rangle = \langle \alpha | V(x) | \alpha \rangle
 \end{aligned} \tag{3.9}$$

Si on injecte les expressions 3.8 et 3.9 dans l'équation 3.5, on a :

$$\mathcal{A} = \int_{t_1}^{t_2} dt \left\{ \langle p \rangle \langle \dot{x} \rangle - \chi \dot{\gamma} - \frac{\langle p \rangle^2}{2m} - \frac{\phi}{2m} - \langle V \rangle \right\} \tag{3.10}$$

On détermine notre Lagrangien \mathcal{L} :

$$\mathcal{L}(\langle x \rangle, \langle \dot{x} \rangle, \langle p \rangle, \langle \dot{p} \rangle, \chi, \dot{\chi}, \gamma, \dot{\gamma}) = \langle p \rangle \langle \dot{x} \rangle - \chi \dot{\gamma} - \frac{\langle p \rangle^2}{2m} - \frac{\phi}{2m} - \langle V \rangle \tag{3.11}$$

De fait, on utilise l'équation d'Euler-Lagrange :

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q} = 0 \tag{3.12}$$

Ainsi, on va dériver notre Lagrangien par rapport à toutes nos variables.

— D'abord pour $q = \langle x \rangle$:

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \langle \dot{x} \rangle} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \langle x \rangle} &= 0 \\
 \frac{d}{dt} (\langle p \rangle) - \frac{\partial}{\partial \langle x \rangle} (-\langle V \rangle) &= 0 \\
 \langle \dot{p} \rangle &= -\frac{\partial \langle V \rangle}{\partial \langle x \rangle}
 \end{aligned} \tag{3.13}$$

3.2. Equations de Hartree-Fock dépendantes du temps

— Ensuite pour $q = \langle p \rangle$:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \langle \dot{p} \rangle} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \langle p \rangle} &= 0 \\ - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \langle p \rangle} &= 0 \\ \langle \dot{x} \rangle &= \frac{\langle p \rangle}{m} - \frac{\partial \langle V \rangle}{\partial \langle p \rangle} \end{aligned} \quad (3.14)$$

— On passe à $q = \gamma$, on rappelle que $\chi\phi - \sigma^2 = \hbar^2/4$ et $\gamma = \sigma/2\chi$, donc $\phi = \frac{\hbar^2}{4\chi} + 4\chi\gamma^2$:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\gamma}} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \gamma} &= 0 \\ - \frac{d\chi}{dt} + \frac{1}{2m} \frac{\partial \phi}{\partial \gamma} - \frac{\partial \langle V \rangle}{\partial \gamma} &= 0 \\ \dot{\chi} &= \frac{4\gamma\chi}{m} - \frac{\partial \langle V \rangle}{\partial \gamma} \end{aligned} \quad (3.15)$$

— Et on finit avec $q = \chi$:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\chi}} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \chi} &= 0 \\ - \dot{\gamma} - \frac{1}{2m} \frac{\partial \phi}{\partial \chi} - \frac{\partial \langle V \rangle}{\partial \chi} &= 0 \\ \dot{\gamma} &= \frac{\hbar^2}{8m} \frac{1}{\chi^2} - \frac{2\gamma^2}{m} - \frac{\partial \langle V \rangle}{\partial \chi} \end{aligned} \quad (3.16)$$

Si on réunit nos quatre équations d'évolution 3.13,3.14,3.15 et 3.16 qui régissent l'évolution des quatre paramètres nécessaires à la description d'un état-cohérent corrélé, cela nous donne le système d'équations (exprimées en termes du nombre d'onde $k = p/\hbar$) :

$$\langle \dot{x} \rangle = \frac{\hbar}{m} \langle k \rangle \quad (3.17)$$

$$\langle \dot{k} \rangle = - \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \langle V \rangle}{\partial \langle x \rangle} \quad (3.18)$$

$$\dot{\chi} = \frac{4\hbar}{m} \gamma \chi \quad (3.19)$$

$$\dot{\gamma} = \frac{\hbar}{8m} \frac{1}{\chi^2} - \frac{2\hbar}{m} \gamma^2 - \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \langle V \rangle}{\partial \chi} \quad (3.20)$$

Ces équations d'évolution ne sont valables que pour un potentiel local, c'est-à-dire ne dépendant que de la densité dans l'espace des positions. Dans le cadre où une force non-locale serait utilisée (Termes non-locaux de Skyrme ou force de Gogny), les équations d'évolution seraient différentes. Les deux premières équations sont classiques. En ce qui concerne les deux suivantes, ce sont vraiment des équations propres à notre descriptions en états-cohérents.

3.2.3 Étude sur les équations d'évolution

Pour tester et appréhender le comportement des équations d'évolutions, nous pouvons utiliser un modèle simplifié. Par exemple, le cas à 1-dimension d'un unique état-cohérent, plongé dans un potentiel de Skyrme (force SkT5 tableau 2.8) calculé avec un profil gaussien en densité à l'équilibre. L'état-cohérent va donc juste se propager et évoluer dans ce système, son évolution dépendra évidemment de sa condition initiale.

Potentiels

Pour ce modèle, il nous faut un profil en densité. Nous avons choisi un profil gaussien de la forme :

$$\rho(\mathbf{r}) = \rho_0 \text{Exp} \left[-\frac{\mathbf{r}^2}{\alpha(r_0 A^{1/3})^2} \right]$$

$$\rho_n(\mathbf{r}) = \frac{N}{A} \rho(\mathbf{r}) \quad \text{et} \quad \rho_p(\mathbf{r}) = \frac{Z}{A} \rho(\mathbf{r}) \quad (3.21)$$

Le paramètre α a été ajusté comme **seul** paramètre libre et il garantit que :

$$\int \rho(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = A \Rightarrow \alpha \approx 0.75$$

avec $\rho_0 = 0.16[\text{nuc.fm}^{-3}]$ et $r_0 = 1.2[\text{fm}]$ (3.22)

Comme on le voit sur la figure 3.1, les profils de densités ne sont pas très réalistes, car il n'y a pas d'auto-cohérence. Les densités de protons et de neutrons ne prennent pas en compte les effets du potentiel, il s'agit juste d'un profil gaussien *test*. En ce qui concerne le potentiel, on voit que l'asymétrie du noyau (plus de neutrons) provoque un potentiel protonique nu plus profond, le potentiel *veut ramener* des protons au centre. En ce qui concerne le potentiel Coulombien, calculé à partir de la densité de protons, il rehausse les valeurs du potentiel proton et on retrouve une *bosse* répulsive caractéristique du potentiel (total) des protons. Enfin, on voit que les deux premières contributions sont majoritaires pour le potentiel, il s'agit des termes en t_0 et t_3 . L'asymétrie du potentiel est provoquée par le terme en t_0, t_3, x_0, x_3 (dont l'unique apport est en t_0 et x_0 , vu que $x_3 = -0.5$). Enfin, le terme de surface en densité isoscalaire montre son effet attractif sur les bords du noyaux et répulsif au centre.

Trajectoire

On va utiliser le potentiel de la figure 3.1 dans notre modèle réduit. Comme on l'a indiqué plus tôt, le profil en densité et le potentiel sont considérés comme figés dans le temps. Les états-cohérents qui vont évoluer dans ces potentiels ne contribuent pas à l'évolution de ces derniers. Ces deux états-cohérents sont issus de la même condition initiale : $x(0) = 2.[\text{fm}], k(0) = 0.[\text{fm}^{-1}], \chi(0) = 5.8[\text{fm}^2]$ et $\gamma(0) = 0.[\text{fm}^{-2}]$. On peut tout d'abord noter, sur la figure 3.2, que les évolutions d'un état-cohérent dans le potentiel proton et neutron sont très différentes. Tout d'abord, on observe que l'évolution dans l'espace des phases est plus rapide pour l'état-cohérent proton. On observe le même effet sur toutes les autres grandeurs. Ensuite, on observe que l'état-cohérent proton acquiert des plus grands nombres d'ondes, cet aspect peut-être compris comme un effet du champ Coulombien engendré par la densité de proton. Alors que les largeurs en positions proton et

3.2. Equations de Hartree-Fock dépendantes du temps

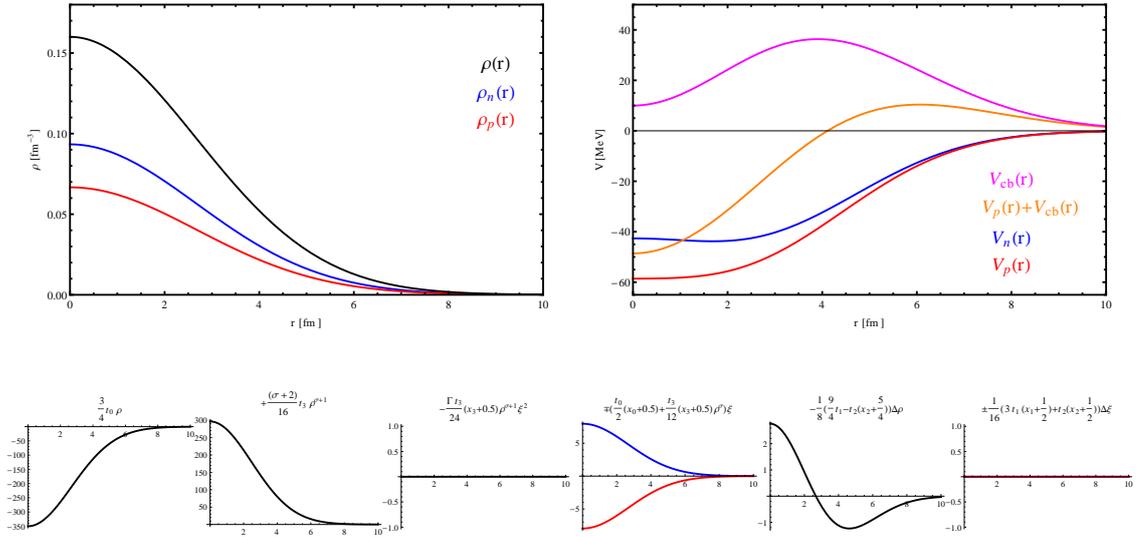


FIGURE 3.1 – En haut à gauche : Profils de densités gaussiens pour un noyau ^{48}Ca . Densité isoscalaire en noire, densité neutron en bleu et densité proton en rouge.

En haut à droite : profils de potentiels pour la force SkT5 (tableau 2.8). Potentiel Coulombien nu en magenta, potentiel proton nu en rouge, potentiel neutron nu en bleu et potentiel proton (nucléaire et Coulombien) en orange.

En bas : contributions au potentiel des différentes termes de Skyrme (tous en [MeV])

neutron ne sont pas notablement différentes, la corrélation modifiée γ adopte des oscillation brusques et de grandes amplitudes pour l'état-cohérent proton. Ce qui se traduit par des grandes amplitudes sur l'évolution des largeurs en impulsions ϕ pour celui-ci.

Pour traduire explicitement le fait que la condition initiale joue complètement sur l'évolution. On va reproduire la même étude avec un placement initial plus excentré. ($x(0) = 5.25[\text{fm}], k(0) = 0.[\text{fm}^{-1}], \chi(0) = 5.8[\text{fm}^2]$ et $\gamma(0) = 0.[\text{fm}^{-2}]$.)

Comme on le voit sur la figure 3.3, si l'état-cohérent neutron reste dans le puits de potentiel avec une bonne stabilité de sa trajectoire, l'état-cohérent proton est expulsé du puits à cause du potentiel coulombien. L'état-cohérent proton est libéré, délivré de l'interaction nucléaire et évolue comme un paquet d'ondes gaussien libre, il va s'étaler indéfiniment. Celui-ci va voir sa corrélation modifiée tendre vers zéro et sa largeur en impulsion tendre vers zéro aussi. On remarquera que même si la trajectoire de l'état-cohérent neutron est plus stable, l'évolution de ses largeurs et corrélations est plus instable.

3.2.4 Exemple sur un noyau d'étain-120

Nous avons la possibilité avec le programme de suivre l'évolution temporelle d'un noyau isolé. Le code numérique qui prépare la condition initiale fournit une solution approchée de l'état-fondamental des noyaux. Une étude dynamique sur un noyau isolé

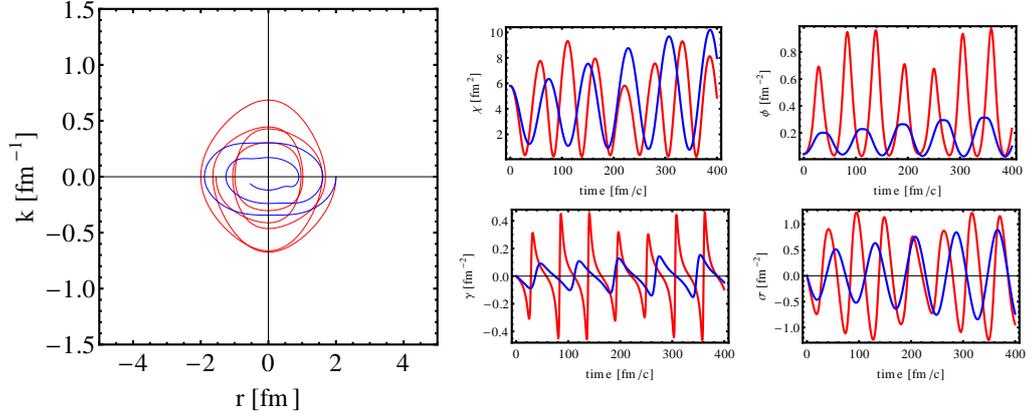


FIGURE 3.2 – A gauche : Trajectoire d'un état-cohérent dans le potentiel proton (en rouge) et dans le potentiel neutron (en bleu) dans l'espace des phases (même condition initiale).

A droite : en Haut-Gauche (HG) : évolution des largeurs en position χ pour les deux états-cohérents. En HD : évolution des largeurs en impulsions ϕ . En BG : évolution de la corrélation modifiée γ . En BD : évolution de la corrélation σ . Le tout en fonction du temps en $[\text{fm}/c]$.

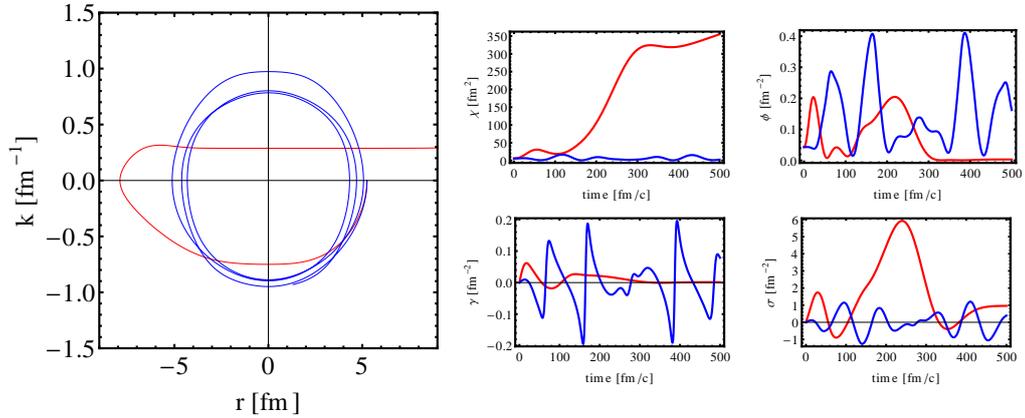


FIGURE 3.3 – Idem figure 3.2

permet néanmoins d'étudier la stabilité de la condition initiale, mais aussi de tester des paramétrisations de la force de Skyrme. En effet, les différentes approches dont on a discuté au chapitre 1 peuvent être amenées à utiliser la force de Skyrme, en utilisant une paramétrisation donnée, que cela soit pour la description statique ou dynamique. De fait, si certaines paramétrisations fonctionnent pour certains formalismes, ce n'est pas universel pour toutes les approches. Donc, on peut utiliser la prolongation d'un noyau isolé avec des forces variées pour les tester au préalable. En se focalisant sur l'évolution temporelle du rayon ou de l'énergie totale du noyau (observables sensées se conserver), on peut discuter de l'acceptation ou le rejet d'une paramétrisation de la force de Skyrme pour un usage en dynamique.

Bilan des énergies

Tout d'abord on peut regarder si des grandeurs comme les énergies se conservent. Comme on le voit sur la figure 3.4, l'énergie totale augmente légèrement avec le temps de façon relativement lente, occasionné par la légère hausse asymptotique de l'énergie cinétique et potentielle. On voit aussi une oscillation de ces énergies vers 40 [fm/c], ce qui peut indiquer que notre condition initiale ne correspond pas à un minimum absolu d'énergie.

Si l'on regarde la figure 3.5, on observe à nouveau cette déformation vers 40 [fm/c], après

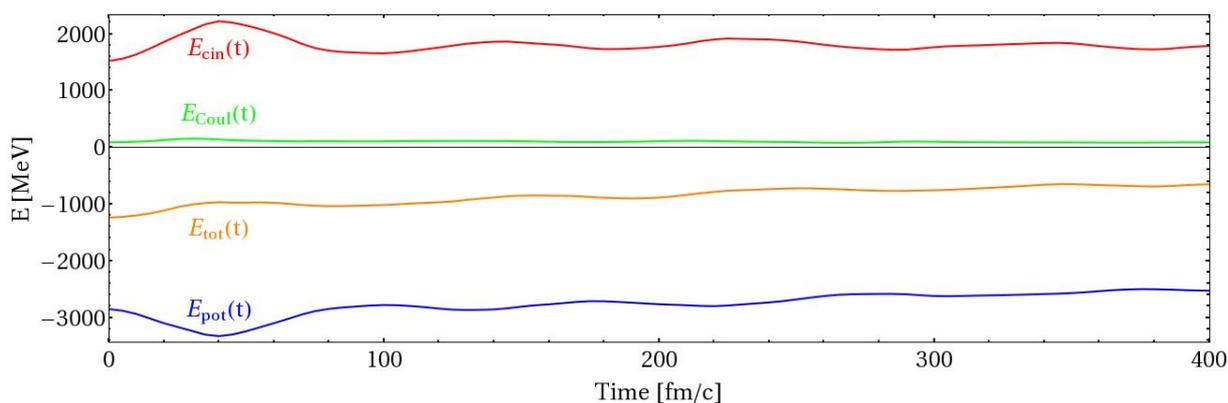


FIGURE 3.4 – Allures des contributions à l'énergie totale (orange) : cinétique (rouge), coulombienne (vert) et potentielle (bleu) pour un noyau d'étain-120 avec la force Skt5[2.8]

celle-ci, le rayon du noyau augmente doucement avec le temps. À l'inverse, le rayon de la sphère de Fermi lui diminue lentement avec le temps. Globalement, le noyau reste assez stable sur des durées *longues* (400 [fm/c]). Le noyau semble atteindre un régime stable dès les 100 [fm/c]. À notre connaissance, cette stabilité n'a pas été mise en évidence par d'autres modèles de transport de type Hartree-Fock ou Boltzmann nucléaire.

Distribution en densité

Si l'on s'intéresse à l'allure des densités, nous avons calculé la densité en x , intégrée en y et z sur la figure 3.6. On observe une bonne stabilité du profil de la densité totale avec une légère oscillation de la valeur centrale. À nouveau, on peut en conclure qu'au delà 100 [fm/c], la densité adopte un régime relativement stable.

Espace des phases

Et enfin, pour en revenir aux comportements des paramètres des états-cohérents, on peut s'intéresser aux distributions des centroïdes des états-cohérents comme on a vu précédemment avec le modèle simplifié. Tout d'abord on retrouve la disposition en ellipse concentriques de la condition initiale. Les centroïdes dans l'espace des phases admettent une trajectoire elliptique sur leur niveau à peu près stable jusqu'à 50 [fm/c]. Au delà de 200 [fm/c], les états-cohérents conservent une trajectoire elliptique mais les niveaux (sauf le central) se croisent et perdent en visibilité. Néanmoins la distribution reste cohérente et on ne remarque pas de fuite d'états-cohérents sur des temps aussi long. Le champ-moyen

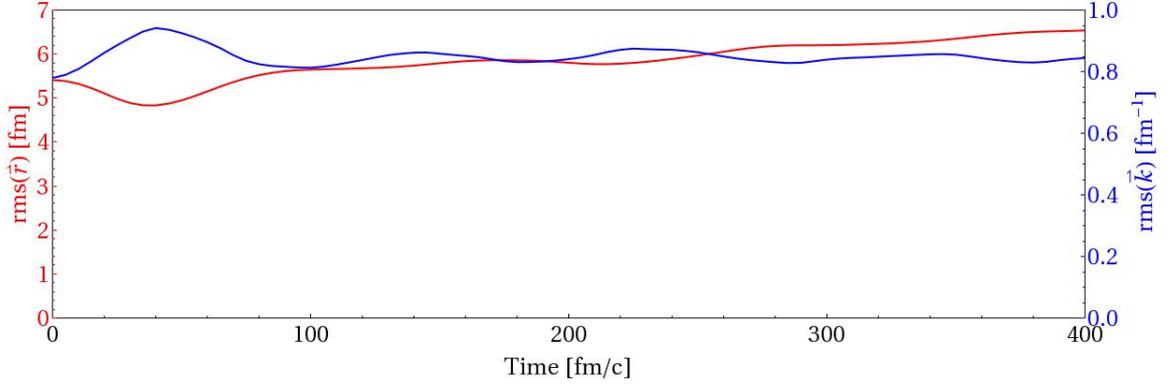


FIGURE 3.5 – Allures des rayons carrés moyens en position (rouge à gauche) et nombre d’onde (bleu à droite) pour un noyau d’étain-120 avec la force Skt5[2.8]

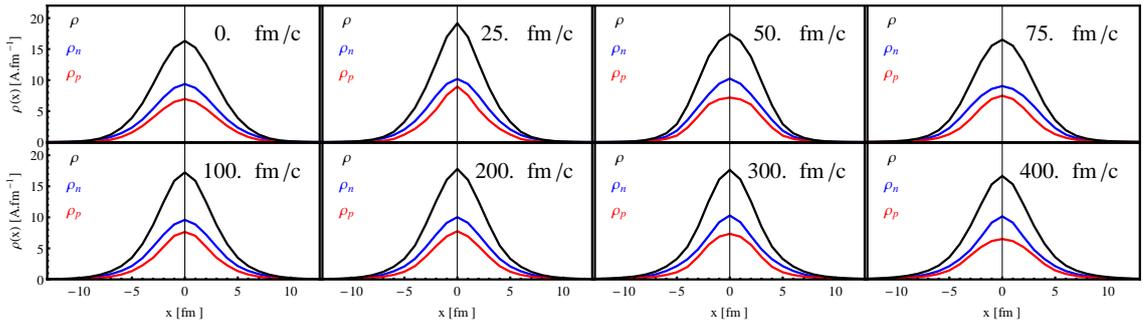


FIGURE 3.6 – Allures des densités totale (noir), proton (rouge) et neutrons (bleu) intégrées (en y et z) pour un noyau d’étain-120 avec la force Skt5[2.8] pour différents temps.

semble avoir trouvé un régime stable.

Le formalisme de TDHF présente néanmoins des limites. D’un point de vue théorique, les équations de TDHF sont réversibles, conservatives et ne peuvent décrire des processus de relaxation. Pour les collisions d’ions à très basse-énergie, les effets dissipatifs sont négligeables, de fait, l’approche TDHF peut être considérée comme suffisante. Mais pour des énergies plus élevées, où les contributions à deux-corps s’accumulent, ces effets deviennent de plus en plus importants et ne sont plus négligeables à long terme. Dans ce cas, le modèle de TDHF devient prédictif uniquement à court terme. L’évolution exacte du système s’éloigne avec le temps de l’évolution donnée par TDHF, laquelle reste toujours un déterminant de Slater. La *durée de vie* d’un déterminant de Slater a été étudiée en référence [LG76] et est estimée à 100 – 150 [fm/c].

3.3. Au delà du champ-moyen

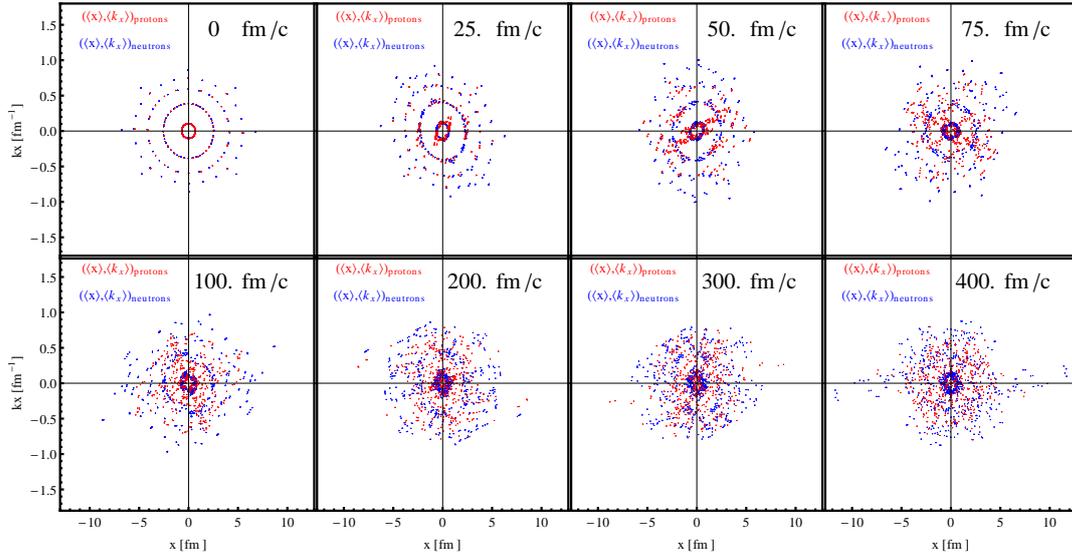


FIGURE 3.7 – Distributions des centroïdes des états-cohérents proton (rouge) et neutrons (bleu) pour un noyau d'étain-120 avec la force Skt5[2.8] pour différents temps.

3.3 Au delà du champ-moyen

L'introduction des effets dissipatifs pour décrire la matière nucléaire lors de collisions d'ions lourds aux énergies intermédiaires est nécessaire, la description en TDHF étant dans l'incapacité de rendre compte de ces effets. Pour aller au-delà du champ moyen, on peut entreprendre de décrire les effets à deux-corps en tronquant à l'ordre supérieur la hiérarchie BBGKY, comme on l'a vu dans le chapitre 1. Dans le cadre de notre approche, nous allons détailler une façon d'introduire ces effets dissipatifs, en considérant l'équation maîtresse des taux d'occupations [WT79; JOU96; DH82].

3.3.1 Équation maîtresse

L'équation maîtresse régit l'évolution du nombre d'occupation d'un niveau nucléaire en fonction du temps. Pour cela, il s'agit de considérer la somme des contributions intermédiaires à deux-corps faisant intervenir le niveau dont on évalue l'évolution :

$$\dot{n}_\mu = \pi \sum_{\kappa\nu\lambda} W(\mu\kappa\nu\lambda) \delta(\epsilon_\mu + \epsilon_\kappa - \epsilon_\nu - \epsilon_\lambda) [\bar{n}_\mu \bar{n}_\kappa n_\nu n_\lambda - n_\mu n_\kappa \bar{n}_\nu \bar{n}_\lambda] \quad (3.23)$$

$$\text{avec :} \quad \bar{n} = 1 - n$$

On nomme n_i les taux d'occupation du niveau i au niveau d'énergie ϵ_i . Et les variations des taux d'occupation se font avec $W(\mu\kappa\nu\lambda)$ qui regroupe les éléments de la matrice d'interaction à deux corps antisymétrisée. L'équation 3.23 est de la forme "gain moins perte" qui caractérise la variation de population d'un niveau. Elle est issue néanmoins de quelques approximations théoriques : les interactions résiduelles sont prises comme des perturbations par rapport au champ-moyen, les effets de mémoire sont négligés (c'est

l'approximation Markovienne) et on ne conserve que les éléments diagonaux de la matrice densité.

Malgré tout, il est impossible (actuellement) de traiter exactement cette équation sur des systèmes réels. Elle nécessite une connaissance exacte à chaque instant de la distribution des niveaux d'énergies accessibles ainsi que leurs occupations. La sommation sur les trois autres niveaux par rapport à μ engendre aussi un nombre colossal de combinaisons possibles. Et enfin, pour estimer les taux de transition, cela nécessite une connaissance complète des interactions résiduelles.

Pour surmonter ces inconvénients, les modèles du types ETDHF font une approximation supplémentaire qui s'insère correctement dans notre problématique des collisions d'ions lourds aux énergies basses et intermédiaires. Elle consiste à considérer que la densité a un comportement local identique à un système homogène infini. De fait, le libre parcours moyen d'un nucléon (et donc l'intervalle de temps entre deux collisions) est grand comparé aux échelles caractéristiques des collisions. Donc on négligera les effets au delà deux-corps. Le comportement infini de la densité implique que les fonctions d'onde deviennent des ondes planes décrites par leur nombre d'onde k dans l'espace des phases. La somme sur les autres états κ, ν et λ sera continue et remplacée par une intégrale sur les impulsions dans l'équation maîtresse 3.23. De plus, dans le cas de la matière infinie, les taux d'occupation seront directement proportionnels à la fonction de distribution :

$$n(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \frac{h}{g} f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \quad (3.24)$$

où h (Constante de Planck) représente le plus petit espace qu'un état puisse occuper et g la dégénérescence de spin et isospin pour un système de fermions. De fait, l'équation maîtresse devient :

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_\mu}{\partial t} = & \frac{\pi}{\hbar} \mathcal{V}^3 \int \frac{dk_\kappa dk_\nu dk_\lambda}{(2\pi)^9} \delta(\epsilon_\mu + \epsilon_\kappa - \epsilon_\nu - \epsilon_\lambda) \\ & \times [(1 - f_\mu)(1 - f_\kappa)f_\nu f_\lambda - f_\mu f_\kappa(1 - f_\nu)(1 - f_\lambda)] |\langle k_\mu k_\kappa | V | k_\nu k_\lambda \rangle|^2 \end{aligned} \quad (3.25)$$

A nouveau, le taux de transition n'est pas aisé à déterminer. L'impossibilité du traitement de l'interaction nue nécessite une modélisation des probabilités de transition. Les diffusions nucléon-nucléon sont alors simulées avec une section efficace différentielle calculée en milieu infini dans l'approximation de Born [TW82].

$$|\langle k_\mu k_\kappa | V | k_\nu k_\lambda \rangle|^2 = \frac{2^7 \pi^5 \hbar^4}{m^2 \mathcal{V}^3} \delta(k_\mu + k_\kappa - k_\nu - k_\lambda) \frac{d\sigma}{d\Omega} \left(\frac{k_\mu - k_\kappa}{2}, \frac{k_\nu - k_\lambda}{2} \right) \quad (3.26)$$

De cette façon, l'équation 3.26 décrit les collisions élastiques nucléon-nucléon. L'équation qui régit les collisions à deux-corps, l'équation de Ueling-Uhlenbeck (UU) s'écrit :

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_\mu}{\partial t} = & \frac{\hbar^3 g}{4\pi^3 m^2} \int dk_\kappa dk_\nu dk_\lambda \delta(\epsilon_\mu + \epsilon_\kappa - \epsilon_\nu - \epsilon_\lambda) \delta(k_\mu + k_\kappa - k_\nu - k_\lambda) \\ & \times \frac{d\sigma}{d\Omega} \left(\frac{k_\mu - k_\kappa}{2}, \frac{k_\nu - k_\lambda}{2} \right) [(1 - f_\mu)(1 - f_\kappa)f_\nu f_\lambda - f_\mu f_\kappa(1 - f_\nu)(1 - f_\lambda)] \end{aligned} \quad (3.27)$$

Cette équation, tout comme l'équation 3.23 est du type perte-gain. Mais l'équation de UU n'est guère plus solvable que l'équation maîtresse. Car elle nécessite aussi une connaissance des niveaux accessibles. Mais elle apporte un axe de compréhension, aidée de l'approche semi-classique Boltzmann, qui va nous donner les ingrédients pour s'approcher au mieux des effets dissipatifs. L'objectif va donc être de **simuler** l'équation à l'aide de méthode de simulation.

Cette approche du terme de collisions est très largement utilisée dans les modèles semi-classique comme BUU, BNV ou LV. Pour plusieurs raisons détaillées dans [LAC99], un véritable traitement ETDHF avec la prise en compte des corrélations à deux-corps (voir chapitre 1) serait plus satisfaisant.

3.3.2 Modélisation

Pour modéliser le terme de collision, face à l'impossibilité de traiter les multiples sommations, nous utiliserons une méthode type Monte-Carlo [SEB86]. L'évaluation de l'intégrale de collision est faite à chaque pas de temps en réalisant des brusques variations lorsque les deux états-cohérent sont suffisamment proches. Le terme de collision est traité de façon statistique en réalisant des collisions élastiques entre états-cohérent, avec une probabilité proportionnelle à la section efficace de collision nucléon-nucléon, mais pondérée par la décomposition en états-cohérents. En effet, étant donné que nous utilisons la section efficace libre nucléon-nucléon pour la probabilité de collision entre deux nucléons, dû à la décomposition en états-cohérents des fonctions d'onde, l'équation maîtresse pour les taux d'occupation des nucléons peut s'écrire en terme des poids des états-cohérents [JOU96]. De fait, on va pondérer la section efficace d'un facteur, en la divisant par le nombre d'états-cohérent par nucléons. Il convient de vérifier pour chaque collision que les propriétés élémentaires sont respectées : conservation de l'énergie et de l'impulsion. De part le caractère quantique des nucléons, chaque collision doit respecter strictement le blocage de Pauli.

Les détails numérique du terme de collision sont détaillés dans l'annexe B.

Comparaison TDHF / ETDHF

Pour illustrer la contribution à la dynamique du terme de collision, nous allons modéliser une collision Nickel(58)-Nickel(58) à 50 [MeV/A] et 3 [fm] de paramètre d'impact. A cette énergie là, on estime que la contribution du terme de collision à la dynamique est significative. Donc on va comparer les résultats de ce système sans (figure 3.8 et 3.9) et avec (figure 3.10 et 3.11) le terme de collision.

Premier constat, le terme de collision n'a d'effet dès lors que les noyaux se touchent, en effet, les collisions sont normalement bloquées au sein d'un noyau à l'état fondamental par le principe de Pauli. Dès que les noyaux s'interpénètrent, les collisions vont mélanger les nucléons et les plus énergétiques vont permettre l'émissions d'états-cohérent en dehors des noyaux, d'où ce nuage d'états-cohérents autour des amas en voie de sortie. De plus, il faut noter que les noyaux en voie de sortie de la dynamique avec collisions sont plus freinés que ceux sans collision. Il s'agit là des effets dissipatifs du terme de collision. Pour quantifier ces effets dissipatifs, on peut par exemple s'intéresser au moment

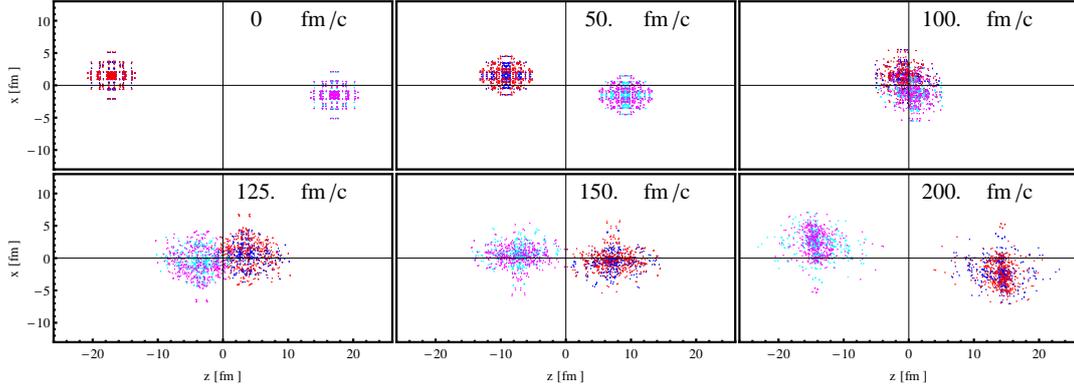


FIGURE 3.8 – Distributions des centroïdes des états-cohérents proton (rouge : projectile, magenta : cible) et neutrons (bleu : projectile, cyan : cible) en x et z avec la force Skt5[2.8] **sans terme de collision** pour différents temps.

$^{58}\text{Ni}(50\text{MeV}/A)+^{58}\text{Ni}$ à $b=3$ [fm] Champ-moyen uniquement

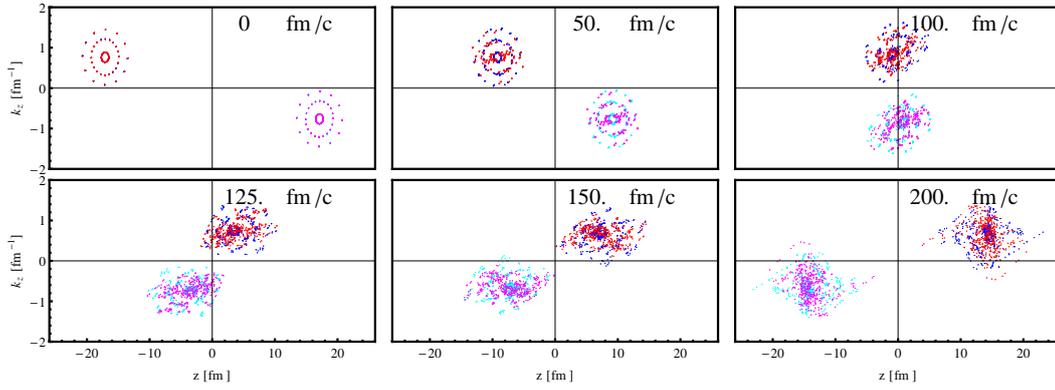


FIGURE 3.9 – Distributions des centroïdes des états-cohérents proton (rouge : projectile, magenta : cible) et neutrons (bleu : projectile, cyan : cible) en z et k_z avec la force Skt5[2.8] **sans terme de collision** pour différents temps.

$^{58}\text{Ni}(50\text{MeV}/A)+^{58}\text{Ni}$ à $b=3$ [fm] Champ-moyen uniquement

quadrupolaire de la distribution en position ou nombre d'onde :

$$\begin{aligned} \langle Q_{zz} \rangle(\mathbf{r}, t) &= (\langle 3z^2 \rangle - \langle \mathbf{r}^2 \rangle) \\ &= \sum_i \omega_i [3(\langle z \rangle_i^2 + \chi_{z,i}) - (\langle x \rangle_i^2 + \langle y \rangle_i^2 + \langle z \rangle_i^2 + \chi_{x,i} + \chi_{y,i} + \chi_{z,i})] \end{aligned} \quad (3.28)$$

$$\begin{aligned} \langle Q_{zz} \rangle(\mathbf{k}, t) &= (\langle 3k_z^2 \rangle - \langle \mathbf{k}^2 \rangle) \\ &= \sum_i \omega_i [3(\langle k_z \rangle_i^2 + \phi_{z,i}) - (\langle k_x \rangle_i^2 + \langle k_y \rangle_i^2 + \langle k_z \rangle_i^2 + \phi_{x,i} + \phi_{y,i} + \phi_{z,i})] \end{aligned} \quad (3.29)$$

Comme on le voit sur la figure 3.12, la différence sur le moment quadrupolaire en position (à gauche) entre dynamique en champ-moyen pur et avec collisions fait écho au comportement moyen des états-cohérents et à leur distribution comme on l'a vu sur la figure 3.10. Concernant le moment quadrupolaire en nombre d'onde, le comportement est

3.3. Au delà du champ-moyen

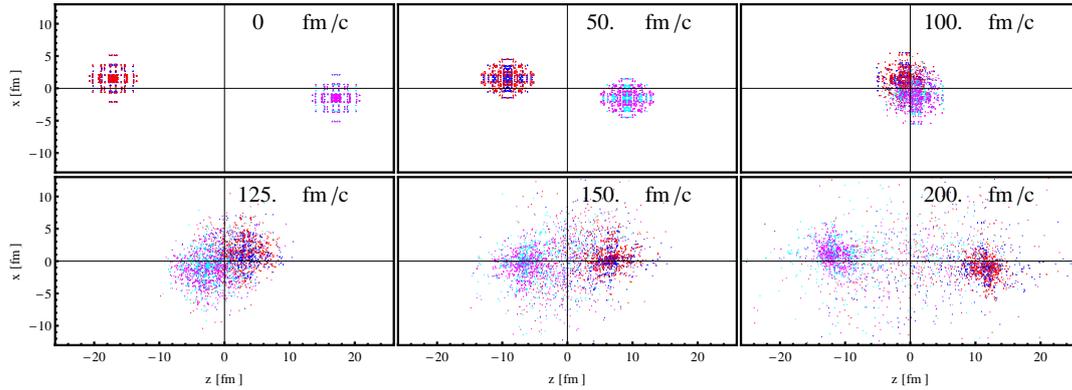


FIGURE 3.10 – Distributions des centroïdes des états-cohérents proton (rouge : projectile, magenta : cible) et neutrons (bleu : projectile, cyan : cible) en x et z avec la force Skt5[2.8] **avec terme de collision** pour différents temps.

$^{58}\text{Ni}(50\text{MeV}/A)+^{58}\text{Ni}$ à $b=3$ [fm] Champ-moyen et Collisions

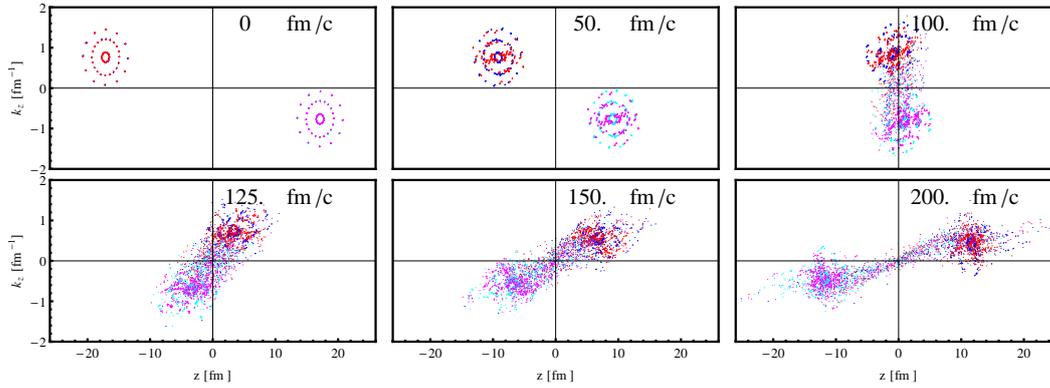


FIGURE 3.11 – Distributions des centroïdes des états-cohérents proton (rouge : projectile, magenta : cible) et neutrons (bleu : projectile, cyan : cible) en z et k_z avec la force Skt5[2.8] **avec terme de collision** pour différents temps.

$^{58}\text{Ni}(50\text{MeV}/A)+^{58}\text{Ni}$ à $b=3$ [fm] Champ-moyen et Collisions

plus intéressant pour distinguer l'effet du terme de collision (figure 3.12 à droite). En effet, pour une dynamique en champ-moyen, on observe une forme d'amortissement mais qui présente une oscillation : le moment quadrupolaire n'est pas encore amorti, contrairement à la dynamique avec collisions, où l'amortissement est clair et net. Dans les deux cas, on observe alors un transfert d'énergie cinétique dans la direction incidente (z) sur les dimensions transverses, mais dans le cas de la dynamique avec collision, ce transfert est plus rapide et plus franc. On voit donc ici clairement le rôle du terme de collision comme "thermalis-ateur" de la distribution.

Si l'on observe maintenant l'espace des phases en z (direction incidente), on observe une parfaite symétrie de comportement des noyaux sur la figure 3.9, ce qui illustre parfaitement le déterminisme et la stabilité du champ-moyen dynamique. Contrairement à la figure 3.11, on voit qu'en champ-moyen il n'existe pas d'échange d'états-cohérents et la zone centrale de l'espace des phases est vide. Avec le terme de collision, on voit très

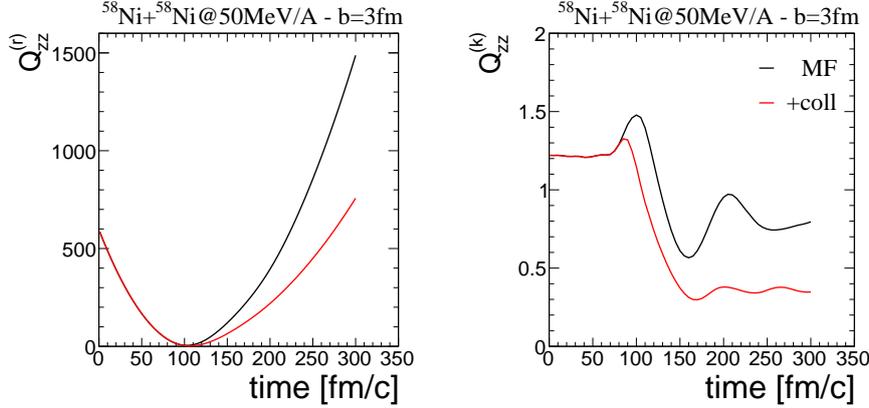


FIGURE 3.12 – Distribution des moments quadrupolaires en position (gauche) et nombre d'onde (droite) en Skt5[2.8] avec (rouge) et sans (noir) terme de collision pour différents temps.

$^{58}\text{Ni}(50\text{MeV}/A)+^{58}\text{Ni}$ à $b=3$ [fm] Champ-moyen et Collisions

clairement une zone centrale et l'axe qui relie les deux noyaux se remplir. Cette zone est remplie d'états-cohérents émis lors de la collision. Cette visualisation de la dynamique de l'espace des phases montre très clairement les échanges et mélanges d'états-cohérents au moment où les noyaux se touchent. On voit l'effet des collisions qui modifient petit à petit la structure des noyaux pour remplir des zones vides de l'espace des phases.

Pour en revenir à la figure 3.10, on notera aussi que la voie de sortie n'est constituée que de deux fragments, les états-cohérents libres sont émis dans toutes les directions sans former *a priori* des fragments.

Cette nuance est importante car les centroides des états-cohérents constituent une information mais pas toute l'information de la distribution. On rappelle que notre distribution est constituée de gaussiennes dont les largeurs évoluent au fil du temps avec le potentiel et la distribution. De fait, pour distinguer la formation de fragments, on devra nécessairement passer par une reconstruction de l'information à N-Corps en reconstruisant les positions des nucléons (voir Chapitre 5).

3.4 Applications à l'astrophysique

Comme nous l'avons énoncé dans le chapitre 1, la dynamique nucléaire ne se limite pas à la description des collisions d'ions lourds aux énergies basses et intermédiaires. Dans l'étude de l'équation d'état de la matière nucléaire, nous pouvons aussi explorer les zones de hautes-densités dans les astres compacts.

Les étoiles à neutrons, de part leurs tailles (un rayon d'une dizaine de kilomètres) avec une masse proche de celle du Soleil (un rayon de l'ordre de $6 \times 10^5 \text{ km}$), sont des astres extrêmement massifs. De plus, ce sont des astres "froids" (de l'ordre de 10^6 K), d'une température 100 fois inférieure à celle du soleil. A cette température, les noyaux peuvent exister à l'état nucléonique. De fait, les hypothèses sur la structure à l'échelle nucléaire des étoiles à neutrons font intervenir la matière nucléaire, d'abord sous sa forme de noyaux (pour les densités les plus basses), jusqu'à un liquide neutronique superfluide pour des

3.4. Applications à l'astrophysique

densités plus élevées.

Comme dans la plupart des objets astronomiques, on découpe la structure de l'étoile à neutrons en plusieurs couches, voire figure 3.13.

A l'extérieur de l'étoile, on a une atmosphère, très fine (de l'ordre de quelques milli-

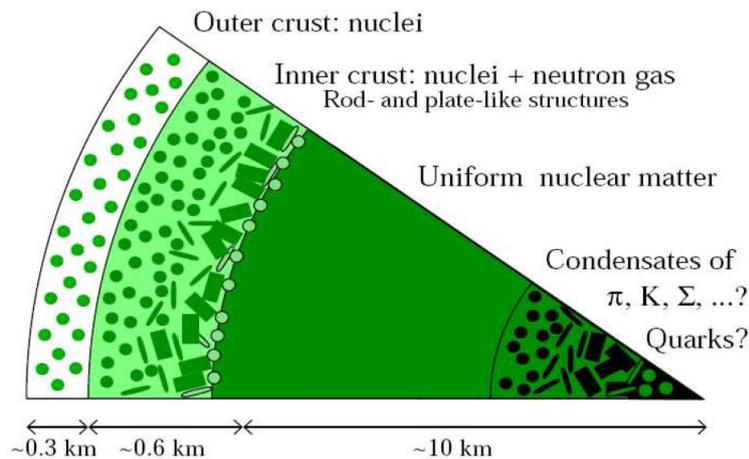


FIGURE 3.13 – Structure en couches des étoiles à neutrons [FIG10].

mètres) constituée d'électrons. La surface d'une étoile à neutrons serait extrêmement lisse (de part la gravité qu'il y règne), les reliefs les plus haut serait de l'ordre de quelques millimètres. La couche la plus externe de l'étoile à neutrons est constitué de noyaux, plutôt riches en neutrons. Plus l'on s'enfonce dans l'étoile, plus la densité augmente et en atteignant le manteau, les noyaux, de part leurs proximité (ce qui crée d'ores et déjà une densité colossale) devraient fusionner pour former des structures, on parle alors de *Pasta phases*. La matière nucléaire adopte des formes exotiques telles que des : spaghetti, tubes, plaques, éponges, ... [FIG10]. Au delà, les structures les plus denses vont fusionner et former de la matière nucléaire uniforme, on parle d'un noyau de quelques kilomètres. Pour les densités les plus élevées (le cœur), il existe beaucoup d'hypothèses. La matière pourrait être déconfinée (sous la forme d'un plasma de Quark et de Gluons), de fait, elle quitte son état nucléonique.

Dans le cadre de la modélisation, les équations de TDHF pourraient décrire la matière lors de ses transitions de structures. Le point déterminant est la condition initiale : quels noyaux, comment les placer? De fait, on peut explorer plusieurs conditions initiales : rapport protonique, maillage des noyaux. Les équations d'évolution seront inchangées. Dans ce contexte, notre approche Hartree-Fock (dans le chapitre 2) permet de constituer les noyaux. Il nous reste à les placer dans un maillage : réseau cubique simple, réseau cubique face centrée, réseau cubique centré [FIG10].

Néanmoins, la matière nucléaire dans les étoiles à neutrons est une approche microscopique de la description de cette matière, de fait, on ne décrit qu'un échantillon. On va donc simuler la structure "infinie" de la matière des étoiles à neutrons en modulant le potentiel (le même qu'en collisions d'ions lourds) avec des conditions périodiques sur notre boîte de simulation. C'est une approximation d'un réseau parfait, des imperfections du

réseau apporterait des fluctuations intéressantes à explorer aussi.

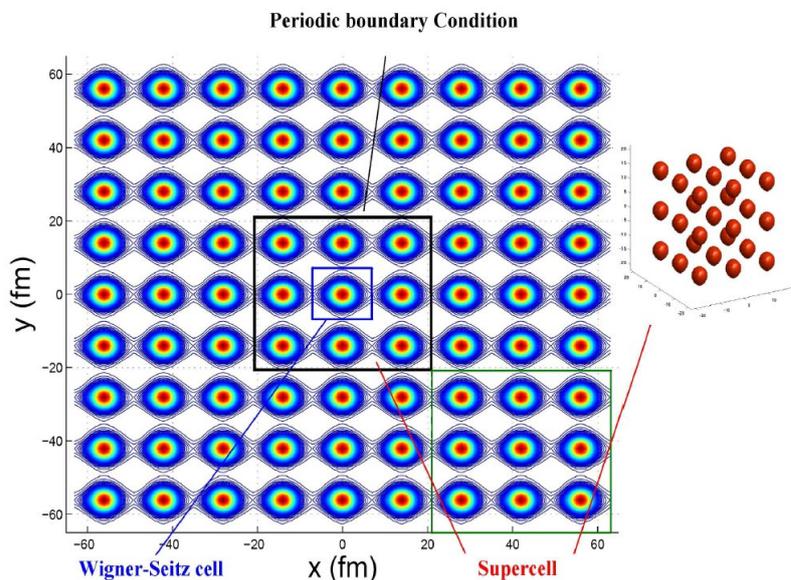


FIGURE 3.14 – Profils en densité 2D (X:Y) du réseau cristallin initial. On impose une périodicité au bord de la super-cellule (noir). A droite, distribution à 3 dimensions de la densité du réseau cristallin dans la super-cellule.

Pour réaliser cette approche microscopique de la matière nucléaire dans un contexte astrophysique, il faut néanmoins savoir quelle force effective on utilise. Pour cela, on pourra s'appuyer sur l'étude de l'équation d'état lors des collisions d'ions lourds, pour lesquelles il existe des nombreuses données expérimentales, afin de faire un choix cohérent de la force. Si le code de simulation de collisions d'ions lourds aux énergies basses et intermédiaires possède un bon potentiel de prédiction, alors la quasi-intégralité de ses ingrédients peuvent être portés sur une code de simulation pour la description de l'écorce des étoiles à neutrons. Bien entendu, un réseau de noyaux (donc plus que deux) implique un coût en temps de calcul beaucoup plus lourds que pour un couple de noyaux qui collisionnent.

3.5 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons abordé la partie dynamique de la simulation des collisions d'ions lourds. Celle-ci constitue le point essentiel de ce travail de thèse. En effet, c'est lors de ces processus dynamiques que nous envisageons d'extraire des informations sur l'équation d'état.

Tout d'abord, nous avons obtenus les équations de TDHF à partir de la hiérarchie BBGKY afin d'en extraire les équations d'évolution qui régissent les paramètres de nos états-cohérents. Ceux-ci, dont la condition initiale a été fixée et expliquée lors du chapitre

précédent, vont se mouvoir dans le temps et vont décrire la dynamique nucléaire.

Mais, la description en champ-moyen pur atteint ses limites très vite sur la description des phénomènes lors des collisions d'ions lourds si l'on augmente l'énergie incidente. En effet, les corrélations à plusieurs corps doivent être prises en compte car elles ne sont plus négligeables, les collisions nucléon-nucléon sont assez énergétiques (elles ne sont plus soumises au blocage de Pauli) et peuvent peupler des niveaux d'énergie plus élevés que le niveau de Fermi. Ces collisions, comme extension au formalisme TDHF ont été introduites dans le modèle DYWAN avec un terme de collision type Uehling-Uhlenbeck et rendent compte des processus qui interviennent pour des énergies de collisions intermédiaires.

De plus, nous avons vu que nous pouvons appliquer notre formalisme et notre modèle sur d'autres systèmes dynamiques. En effet, l'exploration de la matière dans les couches externes et le manteau des étoiles à neutrons constitue aussi un objet d'étude riche. Mais cette description microscopique de la matière nucléaire pour des densités aussi élevées et sa validité dépendent énormément du pouvoir prédictif de l'équation d'état utilisée (ou la paramétrisation de la force que l'on utilise). Cette capacité de prédiction doit être assurée, tout d'abord, par les simulations de collisions d'ions lourds.

Néanmoins, la distribution des fonctions d'onde, ou la densité à 1-Corps ne constituent ni l'une ni l'autre des observables qui sont comparables avec des données expérimentales. La distribution moyenne, issue de la description en ETDHF représente le comportement **moyen** de la collision, pour une énergie, un paramètre d'impact et une paire d'ions donnés. De fait, on doit passer par une reconstruction de l'information à N-Corps. C'est à dire, que nous devons projeter nos états afin de reconstruire les coordonnées (et les propriétés) des nucléons du système. Mais lors de notre évolution dynamique, ces nucléons, décomposés en ondelettes ont formé des fragments, de fait, il faudra aussi passer par une reconstruction des fragments des nucléons. De ces fragments, nous pourrions extraire des informations (masse, charge, vitesse, distribution, ...) qui seront comparées aux données expérimentales.

Extension du modèle et fluctuations

Son projet financé et non financé en même temps, ce physicien spécialiste de la physique quantique se réjouit.
#GorafiESR

@DevilleSy 08 :34 - 1 févr. 2016

4.1 Introduction

Le domaine des énergies de Fermi représente un large domaine d'énergie incidentes, et le traitement quantique de la dynamique nucléaire à plusieurs corps implique un grand nombre de corrélations du grand nombre de degrés de libertés. Nous avons d'abord vu que TDHF constitue le premier niveau de description, en ne considérant pas les corrélations nucléon-nucléon en champ-moyen, cela nous donne le comportement collectif moyen du système. Puis nous avons introduit les corrélations nucléon-nucléon avec un terme de collision qui tente de reproduire au mieux les effets à 2-Corps. L'introduction de ces corrélations ajoute à la description une non-réversibilité de la dynamique, de fait, on dispose d'une approche type ETDHF qui peut décrire le comportement collectif moyen et l'évolution irréversible de la matière nucléaire lors des collisions d'ions lourds aux énergies de Fermi.

Mais pour les modèles du type ETDHF, dans le domaine des collisions aux énergies de Fermi, les dispersions (notables) des observables autour du comportement moyen sont sous-estimées. De plus, on estime que les fluctuations numériques qui induisent des effets sur les observables sont d'amplitudes faibles. Des processus comme la description de fragments ou la multifragmentation mis en évidence expérimentalement lors des collisions nucléaires sont insuffisamment reproduits et on atteint des limites sur la description de la variété des voies de sortie du système. De fait le champ-moyen, prépondérant dans notre formalisme, nécessite l'ajout de fluctuations de grandes amplitudes en incorporant des corrélations (configurations initiales ou interactions résiduelles) non prises en compte dans notre approche champ-moyen étendu. Pour cela, on s'inspirera des différentes méthodes du type stochastiques qui ont été déjà introduites dans des modèles semi-classiques du type Boltzmann-Langevin tout en considérant le caractère quantique de notre description.

4.2 Une première approche des fluctuations

Deux différentes approches ont été développées dans le chapitre 1 : Boltzmann-Langevin et Hartree-Fock dépendent du temps stochastique. Dans notre approche avec un terme de collision type Uehling-Uhlenbeck, les fluctuations sont introduites comme une modification du terme de collision où les corrélations interviennent lors des collisions élastiques. Pour introduire ces corrélations, nous allons reprendre la méthode utilisée dans la référence [BBDG87].

Cette procédure ne consiste plus à faire collisionner deux états-cohérents (ou particules-test dans un modèle semi-classique), mais à faire collisionner directement deux nucléons. De fait, on va introduire des corrélations sur les états-cohérents entre eux, car au lieu de les faire éventuellement collisionner tous indépendamment, une collision dite "maîtresse" va conditionner le changement d'impulsion de tout un groupe d'états-cohérents.

Pour bien comprendre comment on réalise ces collisions, il faut reprendre le processus du terme de collision actuel. Premièrement, si l'on considère que chaque nucléon est décrit comme une superposition d'états-cohérents, la probabilité d'une collision nucléon-nucléon doit être réduite par le nombre d'états-cohérents décrivant un nucléon. Dans les faits, on va donc réduire la section efficace nucléon-nucléon d'un facteur égal au nombre d'états-cohérents constituant les nucléons qui participent à la collision (car on rappelle que le nombre d'états-cohérents par nucléon dépend du noyau et de la condition initiale).

Dans l'idée d'améliorer le terme de collision pour introduire ces fluctuations, on va partir d'une collision état-cohérent/état-cohérent considérée comme "maîtresse" et conserver la procédure de base de la collision. On va reconstruire un nucléon autour de chacun des deux états-cohérents en collision, c'est-à-dire que l'on va construire un "paquet d'états-cohérents" comme nucléon. Les nouvelles impulsions issues de la collision vont être appliquées à l'ensemble des paquets des états-cohérents respectifs, afin de garantir la conservation de l'impulsion. De plus, vu qu'on réalise une collision d'un paquet d'états-cohérents, et non plus un seul état-cohérent, on va réduire à nouveau la section efficace nucléon-nucléon d'un facteur égal au nombre d'états-cohérents par nucléon.

4.3 Application au modèle

L'introduction de ces fluctuations dans notre terme de collision nécessite quelques précisions de formalisme. On rappelle que notre collision *avec fluctuations* est dirigée par la collision *maîtresse*, qui est une collision de deux états-cohérents qui satisfont tous les critères pour que la collision soit effective (voir chapitre 3 et Annexe B).

Fabrication du nucléon

L'objectif étant de créer des corrélations qui vont provoquer des fluctuations : il faut corrélérer "ce qui est corrélable". A partir du moment où un état-cohérent va collisionner (donc que la collision est effective), on doit construire un paquet d'états-cohérents comme nucléon prenant en compte la nature de l'état-cohérent. De fait, on va procéder

à un regroupement par **vraisemblances** des états-cohérents de la **même espèce** : projectile ou cible, isospin (τ), spin(σ), poids (ω_i). L'idée est de retrouver l'ensemble des états-cohérents qui correspondent *au mieux* au nucléon qu'on cherche à retranscrire. Pour ce qui est du critère de vraisemblance, on va regrouper les états-cohérents dont le produit scalaire (équation B.29) avec l'état-cohérent *maître* est le plus élevé. Le produit scalaire prend en compte l'intégralité des propriétés d'un état-cohérent, et le produit scalaire est maximal plus les états-cohérents ont des paramètres (positions, nombres d'ondes, largeurs, ...) proches. Le nombre d'états-cohérents dans un paquet est fixé par la condition sur la somme des poids des états-cohérent qui doit être égale à 1 :

$$\sum_i \omega_i^A(\sigma, \tau, \lambda) = 1 \quad (4.1)$$

Principe de Pauli

Si la collision *maîtresse* a rempli tous les critères car elle est effective, cela implique qu'elle satisfait le principe de Pauli **APRES** que les états-cohérents *maîtres* se sont vus attribuer leurs nouvelles impulsions mais bien **AVANT** l'introduction des corrélations. De fait, il est impératif de vérifier que les paquets d'états-cohérents (ou nucléons) satisfont toujours le principe de Pauli une fois qu'on aura déplacé tous les états-cohérents du nucléon. Donc, une fois que les deux paquets d'états-cohérents se sont vu doter de leurs nouvelles impulsions, on vérifie à nouveau le principe de Pauli de la même façon que dans le terme de collision usuel (détaillé annexe B), c'est-à-dire qu'on va évaluer pour chaque état-cohérent si la diffusion ne viole pas le principe de Pauli sur tout l'espace des phases, en excluant la zone occupée par le nucléon d'appartenance. Cela est justifié par le fait que lors de la formation du paquet, on a groupé des états-cohérents où les produits scalaires sont maximaux, or le principe de Pauli est basé sur la vérification que tous les produits scalaires sont en dessous un seuil. Donc tester le blocage de Pauli d'un état-cohérent avec ses *jumeaux* (du même paquet) bloquera quasi-systématiquement la collision.

D'ailleurs, si un nucléon (son paquet) viole le principe de Pauli lors de cette vérification, alors on annule tout le processus ainsi que la collision *maîtresse*.

Force est de constater que cette méthode des fluctuations, basée uniquement sur les collisions *maîtresses* devient de plus en plus restrictive. Dans un premier temps, on diminue la section efficace d'un facteur égale au nombre d'état-cohérent par nucléon. Mais ceci est compensé par le fait qu'on fait collisionner non pas un seul état-cohérent, mais tout un ensemble. Néanmoins, le fait d'appliquer le principe de Pauli aux deux nucléons, statistiquement, la probabilité pour qu'une collision soit acceptée est réduite. Mais, cette collision devrait être *plus efficace*, au sens où on a créé des corrélations : les états-cohérents d'une même "espèce" se sont vu attribuer des impulsions égales. Au lieu d'avoir une émission d'états-cohérents relativement isotropique (en position, comme on l'a vu dans le chapitre 3), celle-ci sera très dépendante des quelques collisions acceptées.

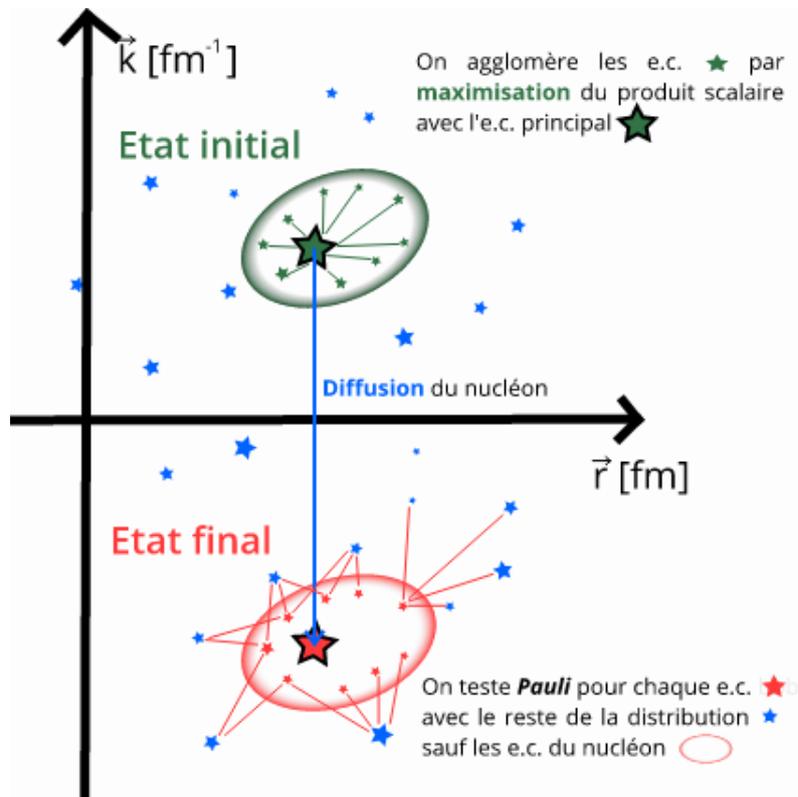


FIGURE 4.1 – Schéma de la diffusion d'un des états-cohérents (e.c.) de l'état initial (vert) vers l'état final (rouge) et la procédure de vérification de Pauli

4.4 Conséquences des fluctuations

Cette procédure pour introduire des fluctuations, implémentée sous l'approche décrite précédemment en est à ses balbutiements. Néanmoins, on peut d'ores et déjà constater l'effet de ces fluctuations sur le comportement globale de la dynamique. Si l'on s'intéresse à la figure 4.2, on retrouve l'image de la distribution de la dynamique avec collisions (figure 3.10). Mais si l'on compare directement les distributions, on observera le fait que avec fluctuations l'émission est beaucoup moins isotrope et que les états-cohérents sont émis en paquets (qui se désagrègent avec le temps). On remarquera aussi le fait qu'il semble y avoir moins d'émission aussi, cela est engendré par le blocage de Pauli appliqué sur les nucléons qui diminue le nombre de collisions effectives, comme on le voit sur la figure 4.4. Un réajustement du blocage de Pauli propre à une dynamique avec fluctuations est nécessaire.

Si l'on porte maintenant notre regard sur l'allure de la distribution dans l'espace des phases de la figure 4.3, on observera sur les images à 100 et 125 [fm/c] que les collisions font déplacer des paquets d'états-cohérents à peu près localisés. A nouveau, on notera qu'il y a moins de collisions que lors du cas du terme de collision sans fluctuation (voir figure 4.4).

4.4. Conséquences des fluctuations

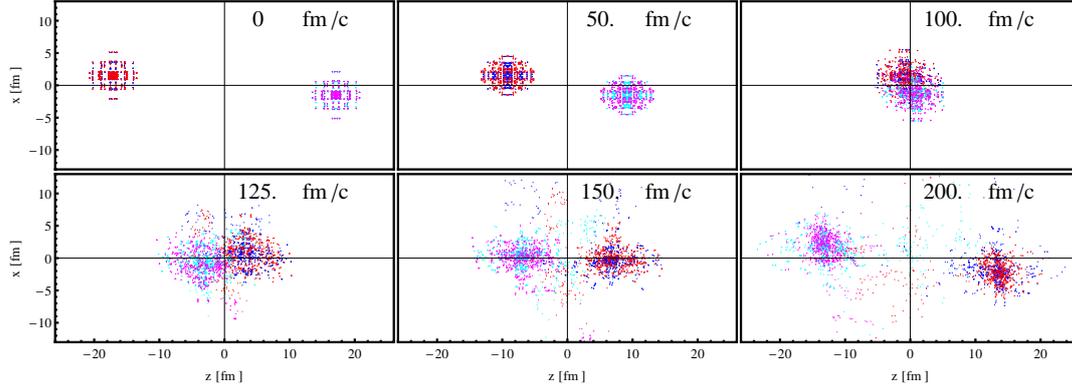


FIGURE 4.2 – Distributions des centroïdes des états-cohérents proton (rouge : projectile, magenta : cible) et neutrons (bleu : projectile, cyan : cible) en x et z avec la force Skt5[2.8] **avec fluctuations** pour différents temps. $^{58}\text{Ni}(50\text{MeV}/A)+^{58}\text{Ni}$ à $b=3$ [fm] Champ-moyen+collisions+fluctuations

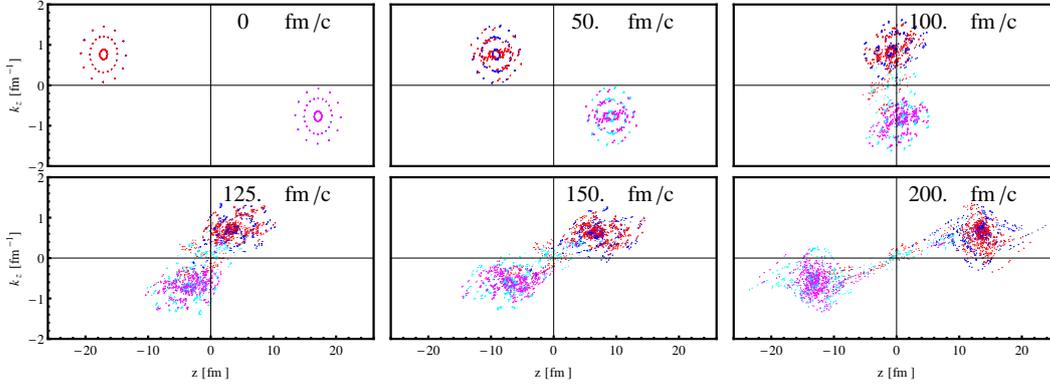


FIGURE 4.3 – Distributions des centroïdes des états-cohérents proton (rouge : projectile, magenta : cible) et neutrons (bleu : projectile, cyan : cible) en z et k_z avec la force Skt5[2.8] **avec fluctuations** pour différents temps. $^{58}\text{Ni}(50\text{MeV}/A)+^{58}\text{Ni}$ à $b=3$ [fm] Champ-moyen+collisions+fluctuations

Dans la même démarche que dans le chapitre 3, nous allons nous intéresser aux moments quadrupolaires en position et nombre d'onde sur la figure 4.5. On constate un comportement "entre-deux", entre la dynamique en champ-moyen pur et la dynamique avec collisions. On y voit ici un effet du nombre réduit de collisions, d'où ce comportement adouci par rapport à la dynamique avec collision. Néanmoins, là où les fluctuations sont visibles sur la figure 4.5 à droite, c'est entre 70 et 120 [fm/c], durée durant laquelle les collisions sont les plus fréquentes. L'effet à noter est la **brusque** variation du moment quadrupolaire, alors qu'il avait l'air de suivre le comportement en champ-moyen pur. Cette brusque variation qui n'existe pas dans les deux autres cas est due au fait qu'une collision d'un paquet d'onde, donc d'un nucléon, représente une variation brusque de l'impulsion d'au moins 2 nucléons sur l'ensemble de la masse du système. Alors que sans fluctuation, ces variations sont douces (à cause du poids d'un seul état-cohérent face au nombre total). On remarquera trois (100, 105 et 115 [fm/c]) décrochements remarquables de ce type dans cette dynamique, la première étant la plus violente. Ceci illustre le fait que si ces collisions sont moins fréquentes, elles sont néanmoins plus efficaces pour

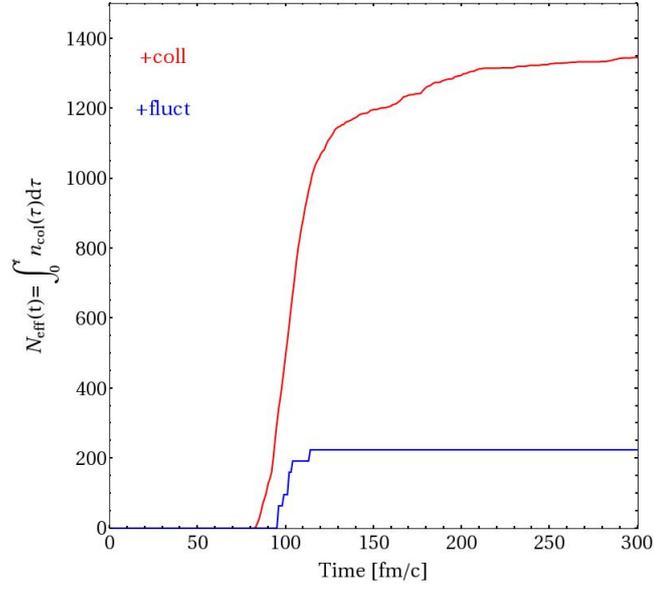


FIGURE 4.4 – Distribution du nombre de collisions intégré (dans le temps) sans (rouge) et avec fluctuations (bleu) pour différents temps. $^{58}\text{Ni}(50\text{MeV}/A)+^{58}\text{Ni}$ à $b=3$ [fm] terme de Collisions et fluctuations Skt5[2.8]

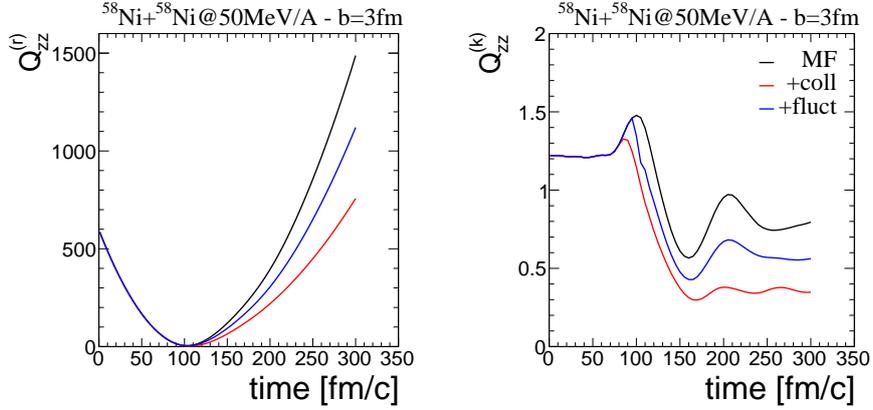


FIGURE 4.5 – Distribution des moments quadrupolaires en position (gauche) et nombre d'onde (droite) en Skt5[2.8] avec (rouge) et sans (noir) terme de collision et avec fluctuations (bleu) pour différents temps. $^{58}\text{Ni}(50\text{MeV}/A)+^{58}\text{Ni}$ à $b=3$ [fm] Champ-moyen, collisions et fluctuations

produire des effets dissipatifs, au sens plus violentes. On se retrouve alors avec des observables (liés à la distribution en nombre d'ondes) qui peuvent développer des brusques variations.

4.5 Conclusion

Bien que l'introduction de ces fluctuations ne représentent pas l'objectif principal de cette thèse, ces travaux préliminaires montrent un comportement cohérent avec la littérature. Cette recherche sera développée dans le cadre du projet **ACME** (Au-delà du **C**hamp **M**oyen **E**tendu) de l'IN2P3 que nous permettra de continuer dans cette optique là sur l'introduction des fluctuations dans ce modèle de champ-moyen étendu. De plus, l'ajout de ces fluctuations semblent être un processus nécessaire dans les descriptions en champ-moyen afin de reproduire des phénomènes physiques comme la multi-fragmentation. La méthode choisie constitue une première approche, basée sur l'évolution du terme de collision actuel. Des travaux actuels sur le terme de collisions permettront d'obtenir des bifurcations des trajectoires dynamiques dans l'espace des phases. On constate les difficultés associées à une telle approche notamment face à la réduction du nombre de collisions de part le principe de Pauli. Néanmoins, ce choix de l'approche des fluctuations va permettre des comparaisons et échanges avec des modèles comme **BLOB** [Nap17] dont la réussite de modélisation des phénomènes cités précédemment repose justement sur le traitement de ces fluctuations.

Production de fragments

Scandale dans les Universités : le classement de Shanghai était fait par Paul le Poulpe #GorafiESR

@chtruchet 09 :19 - 1 févr. 2016

5.1 Introduction

La fonction de distribution issue de la dynamique contient toute l'information à 1-Corps du système au cours du temps. Il s'agit d'un déterminant de Slater dont les fonctions d'onde (à 1-particule) ont été décomposées en ondelettes : les états-cohérents. La fonction de distribution représente le comportement moyen de la collision d'ions lourds à une énergie incidente et un paramètre d'impact donnés. Pour procéder à une comparaison entre la théorie et des données expérimentales, nous allons reconstruire l'information à N-Corps compatible avec les fonctions d'onde nucléoniques qui sont solutions des équations de ETDHF.

Une fois notre distribution en nucléons obtenue, nous allons pouvoir étudier, s'ils existent, la formation de fragments. Ces fragments sont formés dynamiquement, nous allons discuter des quelques observables cinématiques que l'on peut tirer de ces fragments.

Si la fonction de distribution représente le comportement moyen à 1-corps de la dynamique, la reconstruction à N-Corps **exacte** est impossible à retrouver. En prenant un point de vue statistique, nous considérons que l'état à N-Corps du système est un mélange statistiques de déterminants de Slater et la matrice à 1-Corps une superposition de matrices à A états-cohérents. Celles-ci seront considérées comme des distributions de nucléons. De fait, nous allons échantillonner notre distribution en états-cohérents, ce qui va donc générer des fluctuations statistiques dues au tirage. Nous allons voir comment procéder pour simuler la reconstruction approchée de l'information à N-corps exacte. Ensuite, nous expliciterons la méthode utilisée pour l'échantillonnage de la distribution pour reconstruire les distributions en nucléons. Et après, nous étudierons les méthodes possibles pour la reconstruction de fragments. Enfin, nous appliquerons ces procédés sur une distribution pour illustrer les effets sur les observables à 1-Corps et les observables cinématiques.

5.2 Fragments et noyaux chauds

On parle de noyaux chauds quand leur température est de l'ordre de quelques MeV (jusqu'à une dizaine de MeV). Sur le diagramme des phases (figure 1.1), ces températures correspondent à une petite région (sur l'axe des ordonnées) autour de la densité de saturation. En effet, nous allons considérer que les fragments sont des noyaux chauds, c'est-à-dire des noyaux avec une densité plus ou moins proche de la densité de saturation mais qui stockent de l'énergie. Si l'on sait que l'énergie de liaison d'un nucléon est de l'ordre de 8 MeV, une température supérieure à cette valeur provoquera forcément une émission de nucléons du noyau chaud voire sa désagrégation. De fait, les noyaux ont une limite d'existence liée à leur température. Ces températures ont pour origine la nature même de la matière nucléaire. Celle-ci peut être considérée comme visqueuse, de fait lors des collisions d'ions lourds, la matière se frictionne. Ces frictions transforment l'énergie cinétique en énergie "désordonnée", qu'on peut appeler "thermique". Ces frictions sont une image des interactions résiduelles.

Tout d'abord, on va discuter sur cette énergie interne qu'on appelle aussi énergie d'excitation, pourquoi est-elle aussi importante dans la modélisation des collisions d'ions lourds et quels sont les enjeux pour la comparaison avec les données expérimentales. Mais, cette énergie n'est pas aisée à estimer avec les modèles, donc on étudiera aussi quelques observables cinématiques, qui sont simplement comparables avec les résultats expérimentaux.

5.2.1 Énergie d'excitation

Tout d'abord, on va fixer les ordres de grandeur. Pour des énergies d'excitation dans la fraction du MeV, nous sommes dans le régime des excitations collectives, donc des effets à basse-énergie. Pour monter au delà et atteindre 2 ou 3 MeV par nucléon, on réalise les collisions d'ions lourds, avec des énergies incidentes de quelques dizaines de MeV par nucléon. A ces énergies là, les noyaux peuvent se briser et le processus de multi-fragmentation peut se produire. Pour des énergies plus élevées, autour de l'énergie de liaison du nucléon ($8 \text{ MeV}/A$) et au delà, on produit des systèmes qui atteignent leur limite de stabilité. Pour des énergies d'excitation bien plus élevées (la centaine de MeV par nucléon) on entre dans le régime de la matière hadronique. Vu que notre étude se porte sur les **noyaux** chauds, nous nous limiterons à des énergies de faisceaux de quelques dizaines de MeV par nucléons, pour atteindre des énergies d'excitation jusqu'à la dizaine de MeV par nucléon.

Une composante importante sur la discussion des noyaux chauds reste leurs durées de vie. En effet, les noyaux chauds possiblement formés vont se thermaliser en émettant des particules accompagné d'une re-distribution de la densité. La question de la durée de thermalisation est importante pour savoir à quel instant nous devons "capturer" et analyser la distribution en fragments de notre système. Si nous effectuons la recherche de fragments trop tôt, nous sommes peut être encore en phase dynamique, là où les fragments se forment. Ou trop tard, les équations ETDHF avec un système à température non-nulle tendent à étaler la distribution en densité et il est, de fait, impossible de retrouver les fragments si les noyaux chauds sont d'ores-et-déjà trop *étalés* [VTV87]. Donc, il

convient de choisir le juste instant pour capturer la distribution au bon moment.

Pour calculer l'énergie d'excitation E^* d'un fragment A_ZX , on se basera sur l'écart entre son énergie totale E_{tot} à l'instant t et son énergie totale $E_0^{(HF)}$ fondamentale (calculée selon la procédure du chapitre 2).

$$E^* [{}^A_ZX](t) = E_{tot} [{}^A_ZX](t) - E_0^{(HF)} [{}^A_ZX] \quad (5.1)$$

Pour cela, on utilisera notre code qui prépare les noyaux dans leurs états fondamentaux sur un large ensemble des noyaux connus (expression A.53).

La connaissance de l'énergie d'excitation des fragments est une information importante si l'on veut prendre en compte leurs désexcitations dans la comparaison avec les données expérimentales. Cette phase asymptotique peut être effectuée par des modèles statistiques qui supposent que la distribution de fragments n'est plus affectée par la dynamique et l'interaction nucléaire. Par exemple le code SIMON [Dur92] traite en simultanée cette phase de désexcitation secondaire (émission de particules, cassure, ...) et les trajectoires coulombiennes (modification des vecteurs impulsions à des temps asymptotiques).

Pour la suite, au chapitre 6 relatif à l'étude sur le pouvoir d'arrêt, nous ne prendrons en compte que les effets de la prolongation coulombienne, la désexcitation secondaire n'étant pas prise en compte.

5.2.2 Pouvoir d'arrêt

Nous pouvons nous intéresser aux différents travaux [Lop+14a; BEM16a] qui portent sur le **pouvoir d'arrêt** (ou *stopping*). Cette observable se définit comme le rapport (isotrope) de l'énergie cinétique perpendiculaire E_i^\perp sur l'énergie longitudinale E_i^\parallel (axe du faisceau) de la particule i dans le centre de masse de la réaction.

$$R_E = \frac{1}{2} \frac{\sum_i E_i^\perp}{\sum_i E_i^\parallel} \quad (5.2)$$

Cette observable traduit la dissipation et le freinage subi par les noyaux en collision et son utilisation se porte surtout sur les collisions centrales aux énergies intermédiaires, là où les effets de champ-moyen et des interactions résiduelles sont en compétition. On peut estimer que le *stopping* varie entre deux valeurs limites, celles-ci peut-être estimée avec un modèle simple de deux sphères de Fermi (\mathcal{V}_1 et \mathcal{V}_2) (de même rayon p_F) et séparées de l'impulsion incidente p_{inc} :

$$\begin{aligned}
 R_E &= \frac{1}{2} \frac{E^\perp}{E^\parallel} \\
 &= \frac{1}{2} \frac{\int_{\mathcal{V}_1 \cup \mathcal{V}_2} \left(\frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} \right) d\mathcal{V}}{\int_{\mathcal{V}_1 \cup \mathcal{V}_2} \left(\frac{p_z^2}{2m} \right) d\mathcal{V}} \\
 &= \frac{1}{2} \frac{2 \times \int_0^{p_F} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} (p \sin\theta \cos\phi)^2 p^2 \sin\theta dr d\theta d\phi + 2 \times \int_0^{p_F} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} (p \sin\theta \sin\phi)^2 p^2 \sin\theta dr d\theta d\phi}{\int_0^{p_F} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} (p \cos\theta - \frac{p_{inc}}{2})^2 p^2 \sin\theta dr d\theta d\phi + \int_0^{p_F} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} (p \cos\theta + \frac{p_{inc}}{2})^2 p^2 \sin\theta dr d\theta d\phi} \\
 &= \frac{\frac{8\pi p_F^5}{15}}{2 \times \frac{1}{15} p_F^3 \pi (4p_F^2 + 5p_{inc}^2)} \\
 &= \frac{1}{1 + \frac{5}{4} \frac{E_{inc}}{E_F}} \tag{5.3}
 \end{aligned}$$

On introduit un facteur α qui varie en 0 et 1 qui va définir le minimum de *stopping* ($\alpha = 1$) ou la transparence totale (aucune dissipation de la voie d'entrée) et le maximum de *stopping* ($\alpha = 0$) qui traduit l'arrêt totale (dissipation complète et superposition des sphères de Fermi). Ainsi que $x = E_{inc}/E_F$ (où $E_F = 38$ MeV).

$$R_E(\alpha) = \frac{1}{1 + \frac{5\alpha x}{4}} \tag{5.4}$$

Le *stopping* est une observable indirecte, au sens où c'est une mesure directe sous réserve d'une bonne sélection en centralité. Dans le cadre de notre approche, nous pouvons estimer le *stopping* dans plusieurs cas :

- Calculer le *stopping* sur les états-cohérents libres, c'est-à-dire émis lors de la phase dynamique, comme dans la référence [BEM16a].
- Procéder à une *clusterisation*, c'est-à-dire utiliser un algorithme de reconnaissance d'agrégats et calculer le *stopping* sur les fragments chargés émis lors de la phase dynamique et/ou après la phase de désexcitation, comme pour les références [Lop+14a; Leh+10].

Les possibilités de comparaisons de notre approche avec les modèles ou les résultats expérimentaux sont larges.

5.3 Recherche de fragments au sein du modèle

5.3.1 Échantillonnage en déterminants de Slater

Le but ici est de proposer une méthode afin de reconstruire l'information à N-Corps la moins biaisée. Dans la théorie de TDHF, il y a une correspondance biunivoque entre un déterminant de Slater des fonctions d'ondes à 1-Corps et l'opérateur densité à 1-Corps. Cette propriété est néanmoins perdue avec des collisions. Mais un déterminant de Slater ne peut pas être solution du problème à 1-Corps complet (c'est à dire avec corrélations). De fait, il faut inclure la possibilité qu'il existe des transitions entre déterminants de Slater, ce qui implique aussi que la fonction d'onde à N-Corps $|\Psi^N\rangle$ est une combinaison

linéaire de déterminants de Slater (équation 5.5). Devant l'impossibilité de connaître les poids en fonction du temps, nous aurons recours à un traitement statistique. Ce qui implique une superposition incohérente de déterminants de Slater. Chacun de ceux-ci est décrit comme il suit.

Notre point de départ est de considérer que notre fonction d'onde à N-Corps peut être exprimée comme un déterminant de Slater de fonctions d'ondes à 1-particule (équation 5.5) [WT79; WM77]. Dans notre approche, chaque fonction d'onde à 1-particule est décomposée en une somme d'ondelettes (les états-cohérents) dont le nombre dépend du niveau d'énergie nucléonique auquel il contribue (équation 5.7). De fait, notre déterminant de Slater est un déterminant où chaque élément s'écrit comme une sommation d'état-cohérent (où le nombre varie). Donc, on peut aussi écrire que celui-ci peut s'exprimer comme l'ensemble des combinaisons possibles des déterminants de Slater des ondelettes (équation 5.8). Ces multiples sommations présentent un nombre de possibilités important. De fait, on va regrouper la totalité des possibilités de déterminants de Slater d'ondelettes sous une unique sommation, dont la dimension est $\Omega(M)$ (équation 5.9).

$$|\Psi^N\rangle = \mathcal{A} \left\{ \prod_{i=1}^N |\phi_i\rangle \right\} \quad (5.5)$$

$$= \mathcal{A} \left\{ |\phi_1\rangle \otimes |\phi_2\rangle \otimes \cdots \otimes |\phi_N\rangle \right\} \quad (5.6)$$

$$= \mathcal{A} \left\{ \left(\sum_{i=1}^{\lambda(1)} c_i^{(1)} |\alpha_i^{(1)}\rangle \right) \otimes \left(\sum_{i=1}^{\lambda(2)} c_i^{(2)} |\alpha_i^{(2)}\rangle \right) \otimes \cdots \otimes \left(\sum_{i=1}^{\lambda(N)} c_i^{(N)} |\alpha_i^{(N)}\rangle \right) \right\} \quad (5.7)$$

$$= \sum_{i_1}^{\lambda(1)} \sum_{i_2}^{\lambda(2)} \cdots \sum_{i_M}^{\lambda(M)} \left(\prod_{k=1}^N c_k^{(i_1, i_2, \dots, i_M)} \right) \mathcal{A} \left\{ \prod_{l=1}^N |\alpha_l^{(i_1, i_2, \dots, i_M)}\rangle \right\} \quad (5.8)$$

$$= \sum_{k=1}^{\Omega(N)} C_k \mathcal{A} \left\{ \prod_{l=1}^N |\alpha_l\rangle \right\}_k \quad (5.9)$$

Face à l'impossibilité de reconstruire *exactement* le déterminant de Slater à N-Corps, nous procéderons à un échantillonnage en déterminant de Slater d'ondelettes. Avec un nombre de tirage assez grand, nous nous rapprocherons de l'information complète. Les fluctuations engendrées par cette procédure sont des fluctuations purement statistiques de la distribution et ont pour valeur moyenne le comportement moyen de la distribution (en ondelettes) ou le comportement complet d'une reconstruction complète du déterminant de Slater à N-Corps.

Un déterminant de Slater d'ondelette constituera une distribution en nucléons, cette distribution représente une projection de notre distribution en fonction d'onde, autrement dit : *un événement*. Vu le grand nombre de possibilités de tirage en déterminants de Slater, notre distribution contient une quantité (finie) colossale d'événements possibles, dont le comportement moyen sera toujours proche du comportement de la distribution complète en ondelettes.

A nouveau, le tirage en déterminant de Slater des ondelettes est **nécessaire** pour reconstruire une informations en nucléons. Afin de construire (s'il y en a) des fragments et pouvoir faire des comparaisons avec des données expérimentales. La procédure est détaillée en annexe C.

5.3.2 Reconnaissance de fragments

Une fois qu'on dispose de notre distribution de nucléons, reste à savoir si ceux-ci sont libres ou s'ils constituent des fragments. Pour cela, on va utiliser des procédures d'**agrégation** (ou *clusterisation*). Certaines méthodes d'agrégation seront développées en annexe D.

La démarche semi-classique consiste à supposer que les nucléons sont localisés sur les centroïdes des gaussiennes qui leur correspond. Pour ce genre d'approche, on utilise alors une méthode de **percolation** ou de **plus proches voisins**. Ces méthodes sont simples et rapides, bien adaptées pour les descriptions semi-classiques et de dynamiques moléculaires.

Mais dans notre formalisme, les états-cohérents ont des extensions, en position et impulsion. Ces extensions affectent la densité et traduisent l'incertitude de la position et de l'impulsion de l'état-cohérent. De fait, si l'on veut exploiter au mieux notre formalisme et ces degrés de libertés supplémentaires [les extensions] par rapport à des approches semi-classiques, on doit les prendre en compte. Deux approches existent :

- Les extensions sont perçues comme une incertitude de la position ou de l'impulsion, donc pour chaque déterminant de Slater d'états-cohérents, on tire aléatoirement une position/impulsion du nucléon dans sa fonction de distribution $f(x, p)$ (qui prend en compte la corrélation entre les largeurs). Cette méthode peut augmenter considérablement le nombre d'événements possibles. De fait, pour chaque distribution de position/impulsion de nucléon, on peut agréger avec une méthode de percolation (voir Annexe D) ou de coalescence (détaillée juste après) par exemple, il s'agit là d'utiliser un **critère de distance**. On introduit alors des fluctuations statistiques qui peuvent être considérés comme physiques de part la correspondance quantique des largeurs.
- Les extensions sont prises comme étalement de la fonction d'onde **du nucléon**, de fait, on calcule la distribution en densité $\rho(x, y, z)$ de notre distribution de nucléons et on procède à une recherche de fragments avec un **critère en densité**. C'est cette méthode que nous allons décrire. Elle s'articule en deux étapes : **détection et reconstruction**.

Critère de distance

La première étape consiste à tirer une position et une impulsion pour chacun de nos nucléons. Pour cela, on va procéder à un tirage aléatoire dans les extensions de la fonction de distribution $f(x, p)$ de chaque nucléon.

5.3. Recherche de fragments au sein du modèle

Ensuite, on calcule toutes les distances relatives entre les positions et impulsions des nucléons. On ne garde sous forme de paire que celles qui satisfont un critère en position et impulsion relative. Suite à cela, on réunit les différentes paires dans un seul fragment si au moins un nucléon est lié à un autre (d'une paire différente). C'est la méthode du *Minimum Spanning Trees* (ou arbres recouvrants).

Les critères de distances et impulsions relatives ont été tirés de la référence [Zha+12]. Pour les paires neutron-neutron ou neutron-proton on a : $\Delta r^{nn} = \Delta r^{np} = 3.0[\text{fm}]$ et pour proton-proton on a : $\Delta r^{pp} = 6.0[\text{fm}]$. Concernant le critère d'impulsion relative on prendra : $\Delta p = 250 [\text{MeV}/c]$ ou $\Delta k = 1.27 [\text{fm}^{-1}]$.

Force est de constater que cette méthode n'est autre qu'une Classification Ascendante Hiérarchique (voir Annexe D) avec un critère de lien minimal et une coupure en distance euclidienne (position et impulsion) relative, sans pondération (tous les nucléons ont le même poids).

Critère de densité

Tout d'abord, on va chercher à **détecter** nos fragments. Pour cela, on calcule la distribution en densité de tous les nucléons dans une boîte finie :

$$\rho(x, y, z) = \sum_{i=1}^{A_{cible} + A_{proj}} \underbrace{(1)}_{\omega_i=1} \frac{\text{Exp} \left[-\frac{(x-x_i)^2}{2\chi_{x,i}} \right]}{\sqrt{2\pi\chi_{x,i}}} \frac{\text{Exp} \left[-\frac{(y-y_i)^2}{2\chi_{y,i}} \right]}{\sqrt{2\pi\chi_{y,i}}} \frac{\text{Exp} \left[-\frac{(z-z_i)^2}{2\chi_{z,i}} \right]}{\sqrt{2\pi\chi_{z,i}}} \quad (5.10)$$

Ensuite, sur ce réseau on va sélectionner les cellules qui remplissent le critère en densité $\rho(x, y, z) \geq \rho_{min} = 0.03[\text{nuc.fm}^{-3}] (= \rho_0/5)$ [Bon+14]. Puis ces cellules sont agrégées comme fragments par vérification de cellules voisines. Cette méthode est suffisante pour obtenir une première distribution en fragments. Mais il s'avère qu'un critère en densité minimale sur une distribution *infinie* (vu que ce sont des gaussiennes) tend à tronquer la distribution et fait "perdre" de la masse aux fragments. C'est pour cela que nous utilisons un deuxième procédé.

Une fois nos fragments connus, avec les cellules de densité qui les composent, pour la **reconstruction**, on va procéder à un comptage des centroïdes dans les cellules du fragment. Le profil gaussien d'un nucléon assure que la valeur de densité au centroïde est maximale et de fait il participe à la densité du fragment. Donc pour chaque fragment, on va sélectionner les centroïdes qui participent à celui-ci. Chaque fragment est maintenant défini comme une famille de gaussiennes et non-plus comme des amas de cellules de densités. Cette méthode permet de pallier aux pertes de densités associées à la coupure.

Maintenant qu'on connaît quelles gaussiennes participent à quel fragment, on peut calculer toutes les propriétés d'un fragment à partir des gaussiennes : position, impulsion, rayon, masse et charge. L'avantage de cette méthode consiste à avoir accès également aux énergies d'excitation (formule 5.1) et aux densités des fragments explicitement à l'aide des outils et formules utilisés sur les états-cohérents. La procédure est résumée sur la figure 5.1.

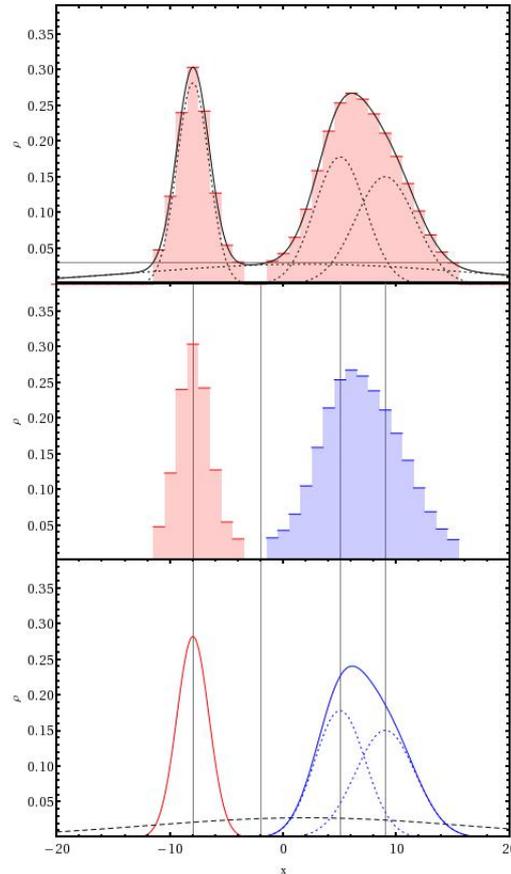


FIGURE 5.1 – En haut : calcul de la densité totale (noir plein) sur réseau (rouge) à partir des nucléons (tirets noirs), seuil de densité minimale à $\rho_{min} = 0.03[\text{nuc.fm}^{-3}]$.

Au milieu : séparation des fragments trouvés (amas des cellules qui satisfont le critère en densité). Analyse de la position des centroïdes des nucléons par rapport aux fragments (traits noirs verticaux).

En bas : reconstruction des fragments à partir des nucléons détectés au sein du cluster. Calcul de la densité à partir des nucléons détectés. Exclusion des nucléons qui n'appartiennent pas aux fragments : particules libres (tirets noirs).

5.4 Application à un système

Nous allons illustrer premièrement les effets de l'échantillonnage en déterminants de Slater. Secondement, nous montrerons les fluctuations sur une observable induite par la méthode d'agrégations de nucléons.

Sur la figure 5.2, nous avons affiché les trois niveaux de description possibles du modèle en s'aidant de l'observable équation 5.2 afin d'illustrer l'effet de ces niveaux sur cette observable.

Premièrement, nous avons calculé le *stopping* à partir de la densité à 1-corps (figure

5.4. Application à un système

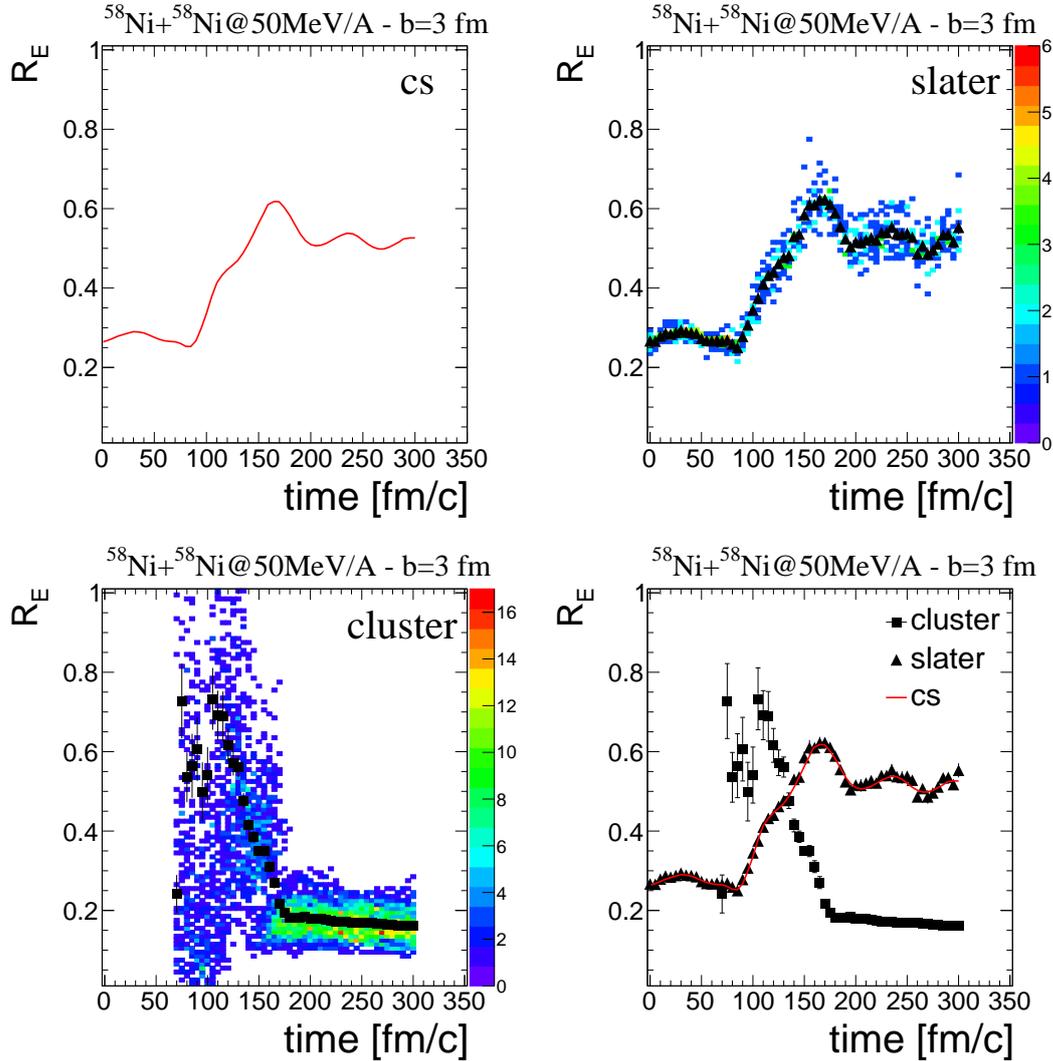


FIGURE 5.2 – En haut à gauche (HG) : allure du *stopping* à partir des états-cohérents en fonction du temps. En HD : *stopping* en fonction du temps pour chaque événement en déterminants de Slater. En BG : *stopping* en fonction du temps pour chaque événement après agrégation. En BD : comparaison du *stopping* en fonction du temps pour les trois cas : états-cohérents (rouge), déterminants de Slater (triangles noirs et barres d'erreurs) et fragments (carrés noirs et barres d'erreurs)
 $^{58}\text{Ni}(50\text{MeV}/A)+^{58}\text{Ni}$ à $b=3$ [fm] ETDHF

5.2 en HG). Pour chaque pas de temps, cette valeur est exacte et prend en compte l'intégralité de la distribution. Ceci correspond à la *valeur moyenne* du *stopping* pour cette réaction là en fonction du temps. On remarque une augmentation du *stopping* au cours du temps avec un plateau. On constate un transfert d'énergie cinétique longitudinale (faisceau) sur les dimensions transversales. Celui se stabilise assez vite après la rencontre des deux noyaux.

Deuxièmement, nous avons procédé à un échantillonnage en déterminants de Slater de la distribution avec 100 déterminants par pas de temps, chacun desquels pouvant être identifiés comme un événement. Puis pour chaque événement, nous avons calculé le *stopping* sur la distribution en nucléons telle que nous l'avons définie dans le paragraphe 5.3.1. La valeur moyenne est représentée (HD) en triangles noirs. Les fluctuations engendrées par l'échantillonnage en déterminants de Slater sont statistiques. Comme on le voit sur la figure 5.2 (BD), la valeur du *stopping* calculée avec la densité complètes (états-cohérents) et la valeur moyenne du *stopping* après échantillonnage concordent parfaitement. Les fluctuations statistiques sont représentées par les barres d'erreurs.

Enfin, nous avons procédé à l'agrégation des nucléons en fragments et calculer le *stopping* pour chaque événement dans la figure 5.2 (BG), on remarque que le *stopping* n'est calculé qu'à partir de 70 [fm/c], avant ce temps-là, les noyaux ne se sont pas encore inter-pénétrés et le transfert d'énergie cinétique de la direction longitudinale vers la transverse est nulle, donnant un *stopping* nul. La différence notable durant ce régime est que pour les états-cohérents ou les nucléons (des déterminants de Slater) on calcule le *stopping* à partir des éléments individuels; pour les fragments, on ne considère pas les caractéristiques des constituants, seule l'impulsion du fragment compte. Cette fois-ci, le *stopping* admet un maximum entre 70 et 120 [fm/c], ce qui correspond à une distribution des énergies presque isotrope bien que plus axée longitudinale. Celui-ci se stabilise à partir de 200 [fm/c], l'émission dynamique est terminée, les fragments sont émis, la distribution se stabilise et il n'y a plus de transfert d'énergie.

Si l'on compare les trois étapes sur le comportement du *stopping*, on constate bien que l'échantillonnage en déterminants de Slater redonne bien en moyenne l'information des états-cohérents. L'échantillonnage introduit des fluctuations statistiques autour de la moyenne qui est très proche du comportement moyen en états-cohérents. Cependant, si l'on introduit la procédure d'agrégation des nucléons, la valeur moyenne est complètement changée. De plus, on remarque des grandes fluctuations durant la phase dynamique. Les résultats entre la distribution en états-cohérents ou en déterminants et les résultats en fragments sont très différents. Après agrégation, ici, on a considéré le mélange de nos fragments, entre quasi-cible, quasi-projectile et toute l'émission de particules légères. L'étape d'agrégation est déterminante pour une éventuelle comparaison entre résultats de simulations et résultats expérimentaux.

5.5 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons abordé les différents points qui constituent la reconstruction de l'information à N-Corps de notre distribution en fonction d'onde à 1-Corps solution des équations de Hartree-Fock dépendante du temps. Cette procédure passe tout d'abord par la reconstruction en déterminants de Slater. Ces déterminants sont décrits en fonction d'onde à 1-corps, elles-mêmes définies en combinaison linéaire d'états-cohérents. De fait, notre déterminant de Slater va s'écrire comme une combinaison linéaire de déterminants de Slater d'états-cohérents. Mais cette sommation est très importante et impossible à reproduire numériquement face au grand nombre de possibilités. Donc on va échantillonner cette somme avec un nombre suffisant d'échantillons pour

être représentatifs et se rapprocher au mieux de l'information complète.

Une fois qu'on a nos distributions d'ondelettes, celles-ci sont définies comme fonctions d'onde à 1-corps d'un nucléon, de fait, on dispose d'une distribution de nucléons qui va permettre de reconstruire des fragments. Pour chaque déterminant de Slater d'ondelettes, ou chaque distribution de nucléons, on va utiliser une méthode d'agrégation de nucléons afin de former les fragments. La méthode détaillée dans ce chapitre s'appuie sur la distribution en densité avec un seuil de détection. Ces fragments, incomplets au sens où la coupure en densité fait nécessairement perdre de "la masse", vont être reconstruits avec les positions des nucléons qui vont être rattachés à leur fragment d'appartenance. Ainsi, pour chaque fragment, on dispose de sa composition en nucléons, de fait, on va pouvoir calculer les informations qui le compose : masse, charge, position, énergie d'excitation, etc.

Pour chaque distribution de fragment, on va calculer des observables cinématiques qu'on va pouvoir comparer avec des données expérimentales, par exemple le *pouvoir d'arrêt*, les distributions en vitesses, ou les distributions charges-vitesses. En effet, pour une comparaison correcte, cela nécessite de passer notre distribution de fragment par une méthode de prolongation coulombienne (diffusion des fragments entre eux asymptotiquement) et une procédure de désexcitation (afin de traiter la thermalisation et l'émission de particules des fragments chauds formés lors de la dynamique). De plus, on peut aussi utiliser un programme comme **PanForte** [Nap+10] qui prend en compte les effets des détecteurs comme INDRA [Pou+95], FAZIA [Col] ou CHIMERA [Pag+04].

Études autour du pouvoir d'arrêt en réactions centrales pour le système $^{129}\text{Xe}+^{119}\text{Sn}$ aux énergies intermédiaires.

Elle décide d'appeler toutes ses variables n pour simplifier son article
#GorafiesR

@chtruchet 06 :29 - 1 févr. 2016

6.1 Introduction

Le *pouvoir d'arrêt* (alias *stopping*) a été étudié de nombreuses fois autant sur le plan expérimental que théorique. Des travaux ont été produits à des énergies incidentes élevées [Rei+97] (de 150 à 400 AMeV) sur des systèmes Au+Au. Mais aussi à plus basse-énergie, domaine qui nous intéresse plus particulièrement, de 10 à 100 AMeV sur des systèmes plus ou moins lourds (Au+Au, Xe+Sn, Ni+Ni ou Ar+KCL) [Leh+10; Lop+14b; BEM16b]. Le *stopping*, dont il a été question dans le chapitre 5, est très étudié dans les réactions centrales afin de sonder des éventuels effets de milieu qui pourraient survenir.

Avec notre modèle, nous allons porter notre étude sur le système $^{129}\text{Xe}+^{119}\text{Sn}$ pour des énergies incidentes telles que 32, 50, 65 et 100 MeV/A. A ces énergies-là, on pourra observer les contributions à la dynamique des effets collectifs prédominants de champ-moyen à 32 MeV/A laissant de plus en plus place aux effets d'ordres supérieurs comme les collisions à deux-corps où celles-ci seront prédominantes à 100 MeV/A. Pour cela, nous nous focaliserons sur les collisions les plus centrales où l'interpénétration des deux noyaux donne une bonne visibilité des effets de milieu. Ces effets de milieu contiennent premièrement des informations sur la section efficace nucléon-nucléon ainsi que sur le blocage de Pauli au sein de la dynamique nucléaire.

6.2 Formalisme

Dans le chapitre 3, nous avons discuté du formalisme utilisé dans notre code, nous avons d'une part le traitement du champ-moyen et d'une autre part les effets dissipatifs

introduits à l'aide du "terme de collision". Les paramètres qui interviennent directement dans le champ-moyen sont ceux de la force effective utilisée. Dans notre cas, il s'agit de la force de Skyrme avec la paramétrisation **SkT5**[Ton+84]. Le choix de cette force se justifie par son bon accord avec des observables macroscopiques sur les noyaux à l'état-fondamental (voir Chapitre 2) et sa stabilité en dynamique (voir Chapitre 3).

Concernant le terme de collision, celui-ci fait intervenir deux principes, premièrement la section efficace. Pour l'intégralité des calculs effectués pas la suite, nous avons opté pour la section efficace constante à 40 mb, afin de s'affranchir des fortes valeurs de section efficace aux basses énergies. Des travaux autour du choix de la section efficace peuvent être envisagées.

Deuxièmement, un des principes fondamentaux de la matière nucléaire aux énergies de Fermi reste le principe de Pauli. La méthode dont il est traité est détaillée en fin d'Annexe B, mais nous allons procéder à un rappel pour bien en cerner les conséquences et la problématique.

Le principe d'exclusion de Pauli exige que deux fermions ne peuvent coexister dans un même état. De fait, nous devons imposer à nos états-cohérents qu'ils ne peuvent occuper un même état, c'est-à-dire une même : position, impulsion, spin et isospin. Mais nos états-cohérents ne sont pas localisés (ils ont une extension en position et impulsion), de fait, comment estimer que deux états-cohérents occupent une même position ou impulsion ? Dans les descriptions semi-classiques, le principe de Pauli s'applique en évaluant le taux d'occupation. Mais nos nucléons ne sont pas ici représentés par des particules-test, nos nucléons sont représentés en fonctions d'ondes qui sont elles-mêmes décomposées en ondelettes. De fait, nous pouvons utiliser les propriétés d'orthogonalité des fonctions d'ondes en Mécanique Quantique. Ainsi, un produit scalaire maximal entre deux états-cohérents indique une très forte corrélation voire une similarité complète. Alors qu'un produit scalaire minimal montre l'orthogonalité de deux états-cohérents.

Mais il s'avère que le produit scalaire entre deux états-cohérents n'est pas binaire (voir Annexe E et formule B.29), mais celui-ci prend des valeurs réelles entre 0 et 1. Il est actuellement impossible de déterminer un seuil de "vraisemblance" entre deux états-cohérents analytiquement qui nous indiquerait alors en quoi deux états-cohérents peuvent être considérés comme orthogonaux ou non.

Dans notre approche, précisément dans le terme de collision, notre blocage de Pauli est testé pour chaque état-cohérent en train de subir une diffusion. Pour ce faire, nous testons l'état-final d'un état-cohérent de la paire (en train de diffuser) avec l'intégralité des états-cohérents de la distribution susceptible de faire intervenir le blocage de Pauli (même spin et isospin). C'est-à-dire que l'on va calculer tous les produits scalaires d'un état-cohérent (dans son état final) avec le reste de la distribution (de même spin et isospin). On estime alors que si un seul produit scalaire est trop élevé, selon un seuil sur lequel nous allons revenir longuement, la collision est rejetée car elle violerait le principe d'exclusion de Pauli.

6.3 Blocage de Pauli

Fixer le **seuil de Pauli** uniquement à partir du formalisme semble impossible, de fait, nous avons choisi de faire une étude de l'influence de ce seuil sur la dynamique de collision. On sait néanmoins que ce seuil varie entre 0 et 1. La valeur minimale du seuil de Pauli correspond à un blocage total des collisions car tous les produits scalaires seront supérieurs à ce seuil, cela revient à bloquer le terme de collisions, les effets dissipatifs : c'est du champ-moyen pur. Au contraire, si le seuil est à sa valeur maximale, alors, toutes les collisions sont acceptées, le blocage de Pauli est simplement désactivé.

6.3.1 Comportement moyen et seuil de Pauli

Tout d'abord, nous allons porter un regard global sur les effets de la variation du seuil de Pauli. Sur la figure 6.1, on peut voir l'effet très fort sur le comportement moyen de la dynamique.

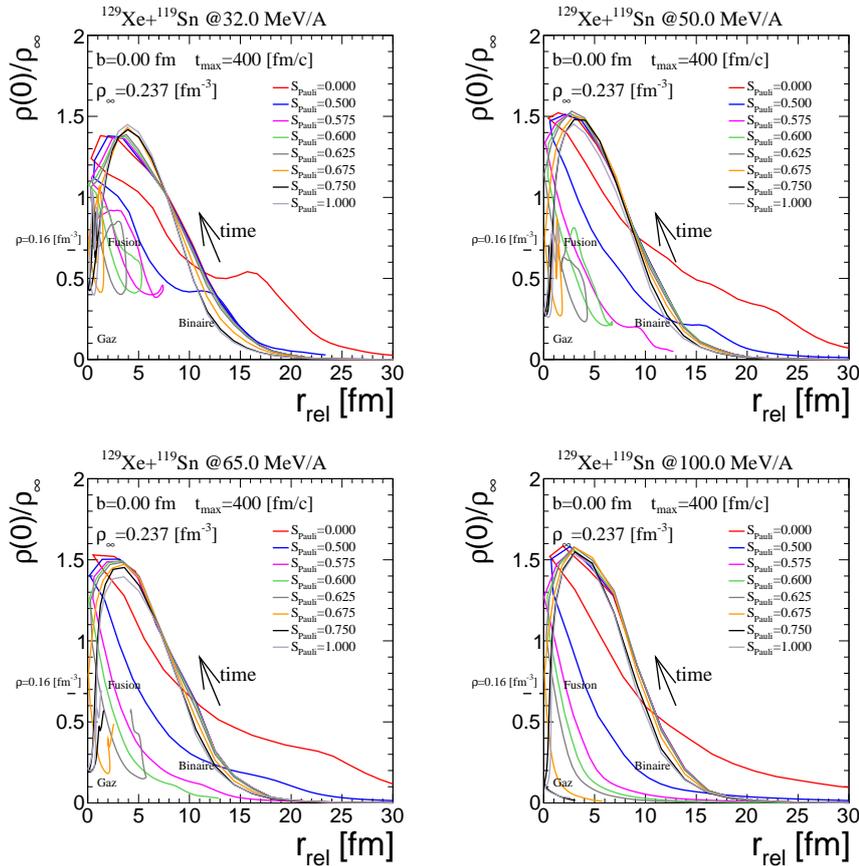


FIGURE 6.1 – Représentation paramétrique temporelle du comportement moyen avec la distance relative projectile/cible r_{rel} et la densité centrale (centre de masse) pour 32, 50, 65 et 100 MeV/A et différents seuils de Pauli pour $b = 0\text{fm}$.

ρ_∞ est calculé à partir de la condition initiale (voir Chapitre 2).

Notamment pour 32, 50 et 65 MeV, on voit qu'en dessous d'un certain seuil, on décrit un comportement qui se rapproche d'un résidu de fusion (faible distance relative et densité proche de la densité de saturation $\rho_\infty = 0.16\text{fm}^{-3}$), alors qu'au-dessus, on se rapproche d'un comportement binaire. Pour 100 MeV, le cas est différent, la violence de la réaction fait que la quasi-totalité des comportements moyens finissent binaires ou éventuellement en une phase gazeuse pour les seuils les plus hauts.

Globalement, on voit qu'avec des faibles variations du seuil, on peut changer de comportement moyen radicalement. De même, plusieurs seuils vont donner un même comportement moyen. De fait, on voit qu'une approche globale n'est pas satisfaisante pour fixer ce seuil. Donc ce seuil de Pauli est très sensible et surtout déterminant quant à une description convenable au sein de notre modèle.

6.3.2 Efficacité de Pauli

Afin de quantifier les effets du choix d'un seuil de Pauli, on a représenté l'efficacité du blocage de Pauli sur la figure 6.2. La permissivité du blocage est définie comme le rapport des collisions qui satisfont les conditions de libre-parcours moyen N_{MFP}^{coll} sur le nombre de collisions permises après blocage de Pauli N_{eff}^{coll} .

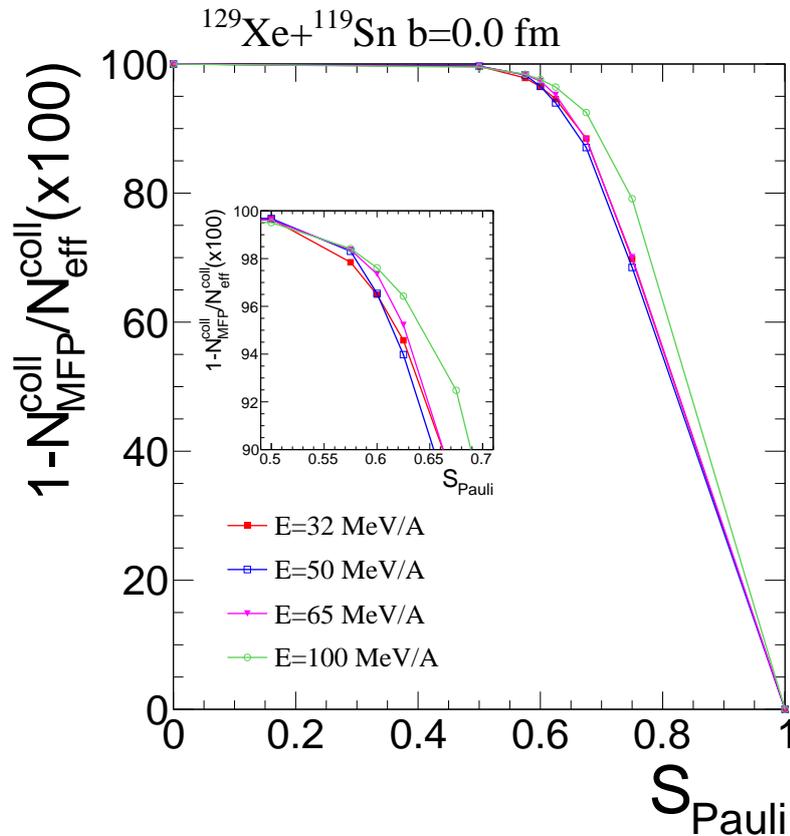


FIGURE 6.2 – Efficacité du blocage de Pauli en fonction du seuil de Pauli 32, 50, 65 et 100 MeV/A et différents seuil de Pauli pour $b = 0\text{fm}$.

De fait, pour avoir l'efficacité de blocage de Pauli, on calcule l'unité moins la permisivité (le résultat peut aussi être exprimé en pourcentages). Dès lors, on observe bien une efficacité de plus en plus grande en fonction du seuil. De plus, pour des seuils inférieurs à 0.625, on remarque encore plus de 95% d'efficacité.

6.4 Contexte

Pour la suite de ce chapitre, nous avons opté pour un calibrage à partir des données expérimentales dans les références [Leh+10; Lop+14b]. Notre observable d'étude est le pouvoir d'arrêt. Nous mènerons cette étude parallèlement sur l'émission de protons (conformément à la référence [Lop+14b]) et sur l'émission de particules chargées (selon la référence [Leh+10]). Nous ne réaliserons pas d'étude comparative avec d'autres codes dans ce chapitre, nous avons opté pour une démarche en se basant uniquement sur des données expérimentales. De fait, nous détaillerons les différentes étapes pour arriver à une comparaison possible.

6.4.1 Condition de la simulation

Dans les deux références citées précédemment, on s'intéresse aux réactions centrales du système Xe+Sn aux énergies de Fermi. La liste de simulations est résumée dans le tableau 6.1 ci-dessous :

TABLE 6.1 – Liste des paramètres de simulation

Système	$^{129}\text{Xe}+^{119}\text{Sn}$
Paramétrisation de Skyrme	SkT5
Section efficace NN [mb]	40
Energies [MeV/A]	32, 50, 65, 100
Paramètres d'impact [fm]	0.0, 0.5, 1.0, 1.5, 2.0, 2.5, 3.0, 3.5, 4.0
Distance relative initiale [fm]	35
Temps de simulation [fm/c]	400
Seuils de Pauli	0.000, 0.500, 0.575, 0.600, 0.625, 0.675, 0.750, 1.000

Nous nous sommes restreints pour des paramètres d'impact jusqu'à 4 fm, en considérant que les sélections expérimentales de centralité n'excèdent pas cette valeur de paramètre d'impact. Concernant les énergies, nous avons choisi une gamme où les données sont disponibles et bien connues. Le temps de simulation maximal a été fixé à 400 fm/c afin de bien couvrir la phase dynamique de la réaction tout en prenant en compte la phase d'approche des deux noyaux en voies d'entrée (distance relative initiale de 35 fm).

6.4.2 Échantillonnages et fragments

Conformément au chapitre 5, nous procéderons à un échantillonnage en déterminants de Slater afin de reconstruire l'information à N-Corps, dont la distribution en fragments. Tout d'abord, il faut fixer l'instant auquel on va échantillonner. On sait que la description en ETDHF ne se suffit pas à elle-même pour que le comportement moyen décrive la

formation spontanée de fragments (multi-fragmentation). De fait, on ne peut se baser sur la distribution en fragments du comportement moyen et son éventuel équilibre asymptotique. Ainsi, on va s'appuyer sur la thermalisation de la distribution complète avec le moment quadrupolaire en z , l'axe du faisceau. Sur la figure 6.3, on peut observer une thermalisation du système de plus en plus rapide avec l'énergie. Et de plus, il existe ce même effet pour des seuils de plus en plus élevés. Seules les dynamiques en *champ-moyen pur* ($S_{\text{Pauli}} = 0.000$) ne se thermalisent pas vraiment.

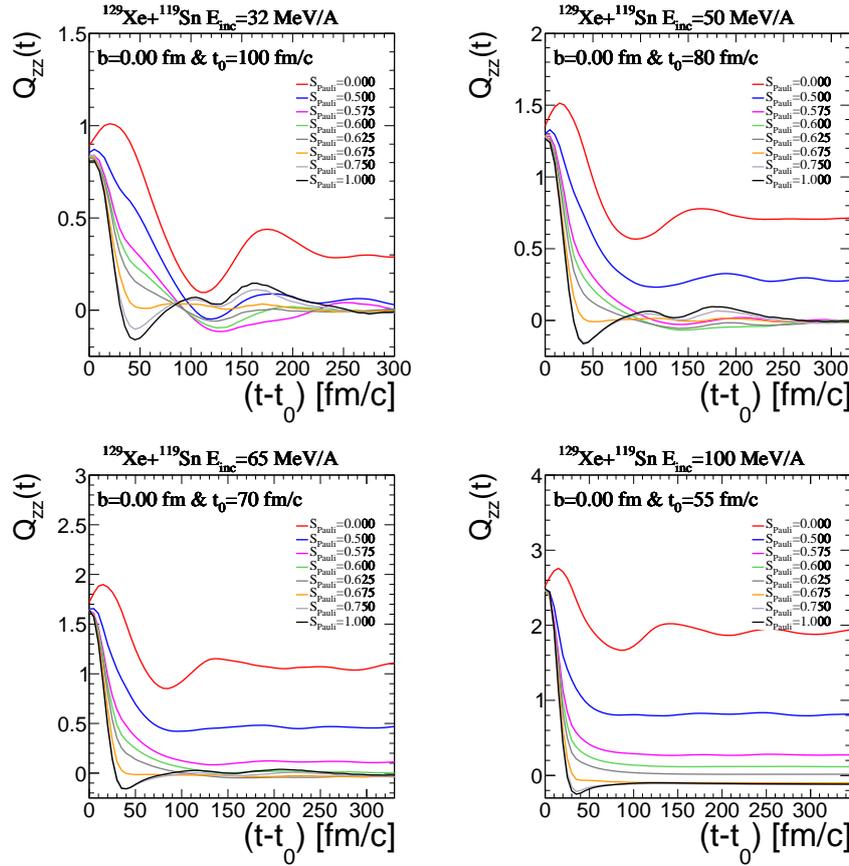


FIGURE 6.3 – Evolution temporelle du moment quadrupolaire en z pour $b=0$ fm pour 32, 50, 65 et 100 MeV/A.

Afin d'apporter un temps fixe d'échantillonnage pour les différentes énergies, nous avons opté pour $t = 300$ [fm/c] (temps absolu). Cela correspond à un temps de thermalisation convenable pour tous les systèmes.

Concernant l'échantillonnage, nous avons procédé à un tirage de **1000 déterminants de Slater** par dynamique. Chaque échantillonnage correspond à un événement, une distribution de nucléons. Dès lors, nous allons utiliser un algorithme de formation de fragments comme introduit dans le chapitre 5. Nous disposons actuellement de deux méthodes : une première qui repose sur la détection de fragments avec un critère de densité et une deuxième qui ne se base que sur des considérations géométriques (voir Chapitre

5). Le fait est qu'avec une détection de fragments basée sur la densité avec nos simulations, on ne détecte que **les plus gros fragments**, le reste des nucléons est considéré **comme libre**. A nouveau, notre description souffrant de l'incapacité de décrire des fragments réalistes en dehors des plus gros en comportement moyen fait qu'on ne peut pas plus les former après échantillonnage. De fait, l'utilisation de cette méthode est incompatible avec l'étude que l'on souhaite faire, car on s'appuie sur l'émission de protons et de particules chargées. Cette méthode aura nécessairement tendance à surestimer la multiplicité de protons et de réduire le spectre en particules chargées à celui des protons. Donc nous opterons pour la seconde méthode avec le critère de distance (évoquée aussi dans le chapitre 5). Pour cette méthode géométrique [Zha+12] ("*Minimum Spanning Trees*") de recherche de fragments, nous procédons à un tirage aléatoire de la position du nucléon dans sa distribution gaussienne, puis une coalescence des nucléons entre eux. Les critères de distances et impulsions relatives sont au Chapitre 5. Et enfin, nous avons procédé à **une prolongation coulombienne des fragments de 10^3 [fm/c]**.

6.4.3 Sélection des événements

Dans le cadre d'une expérience, le paramètre d'impact est une variable aléatoire. La centralité de la réaction est estimée à partir d'hypothèses et de modèles. Dans le cadre de notre modèle, le paramètre d'impact est une variable que l'on va choisir. De fait, on va chercher à couvrir l'ensemble des paramètres d'impact possible, mais cela se fait nécessairement par échantillonnage (les valeurs sont résumées dans le tableau 6.1).

Pour la suite de ce chapitre, nous avons réalisé 3 sélections différentes :

Événements centraux

La première sélection consiste à ne prendre en compte que **les événements à paramètre d'impact nul**. Ce cas d'une probabilité infime expérimentalement est réalisable dans le modèle et consiste en le scénario le plus central possible.

Tous les événements

La deuxième sélection va prendre en compte toutes les simulations à différents paramètres d'impact. Cependant, la distribution en paramètre d'impact n'est pas équiprobable, il faut donc prendre en compte ces probabilités, on réalisera alors une pondération des événements. Celle-ci sera faite via la section efficace de réaction associée au paramètre d'impact :

$$\sigma_{rec}(b)[\text{mb}] = 10[\text{mb}\cdot\text{fm}^{-1}]2\pi \int_{b-0.25}^{b+0.25} \beta d\beta = 10\pi b[\text{fm}] \quad (6.1)$$

La variation de b à ± 0.25 a été choisie car les paramètres d'impact ont été échantillonnés tous les $0.5[\text{fm}]$ (voir tableau 6.1). Les valeurs de pondérations sont résumées dans le tableau 6.2.

TABLE 6.2 – Valeurs de sections efficaces en fonction du paramètre d'impact

b [fm]	$\sigma_{rec}(b)$ [mb]	$\sigma_{rec}(0.0 \rightarrow b)$ [mb]
0.5*	17.671	17.671
1.0	31.416	49.087
1.5	47.124	96.211
2.0	62.832	159.043
2.5	78.540	237.583
3.0	94.248	331.831
3.5	109.956	441.786
4.0	125.664	567.450

On notera l'anomalie numérique(*) pour $b = 0.5$ [fm] où nous avons étendu le domaine d'intégration en intégrant de -0.5 à $+0.25$, de façon à prendre en compte les événements de $b = 0$ [fm].

Dans le cas de cette sélection, chaque observable (pouvoir d'arrêt, multiplicité, ...) sera calculée comme la moyenne pondérée du mélange des événements :

$$P(X) = \frac{\sum_{i=1}^N \sigma_{rec}(b_i) P(X)_{b_i}}{\sigma_{rec}(0.0 \rightarrow b_N)} \quad (6.2)$$

TABLE 6.3 – Tableau des sections efficaces de réactions [Kox+87] par énergie incidentes et les paramètres d'impact associés

E_{inc} [MeV/A]	$\sigma_{rec}^{tot}(b)$	b_{max} [fm]
32	5.876	13.677
50	5.992	13.811
65	5.932	13.741
100	5.625	13.381

De même, on peut estimer très rapidement qu'avec nos simulations qui vont de 0 à 4 [fm] de paramètres d'impact, cela représente pas loin de 10% de la section efficace totale de réaction.

Sélection en centralité

Et enfin, la troisième sélection se porte sur le tirage des événements les plus centraux. Pour cela, on va partir de notre sélection détaillé précédemment, avec nos événements de 0 à 4 fm. Pour réaliser la sélection en centralité, nous allons nous appuyer sur les hypothèses expérimentales. Dans les références [Leh+10; Lop+14b], la coupure en multiplicité est réalisée dès lors que le pouvoir d'arrêt semble saturer pour les plus hautes multiplicités. Comme on le voit sur la figure 6.4, ce n'est pas notre cas. Dès lors, expérimentalement la coupure en multiplicité conserve 1 à 2% des événements totaux détectés (donc tous paramètres d'impact confondus). Pour réaliser notre sélection, nous nous sommes appuyés

6.4. Contexte

alors sur ces deux éléments : nous ne conservons que les valeurs de plus hautes multiplicités jusqu'à ce qu'on recense 2% de la section efficace totale (soit environ un cinquième de nos événements de simulations), soit à peu près 120[mb] (ce qui représente des paramètres d'impact compris entre 0 et 1.50 [fm], ce qui est largement dans notre spectre de simulation).

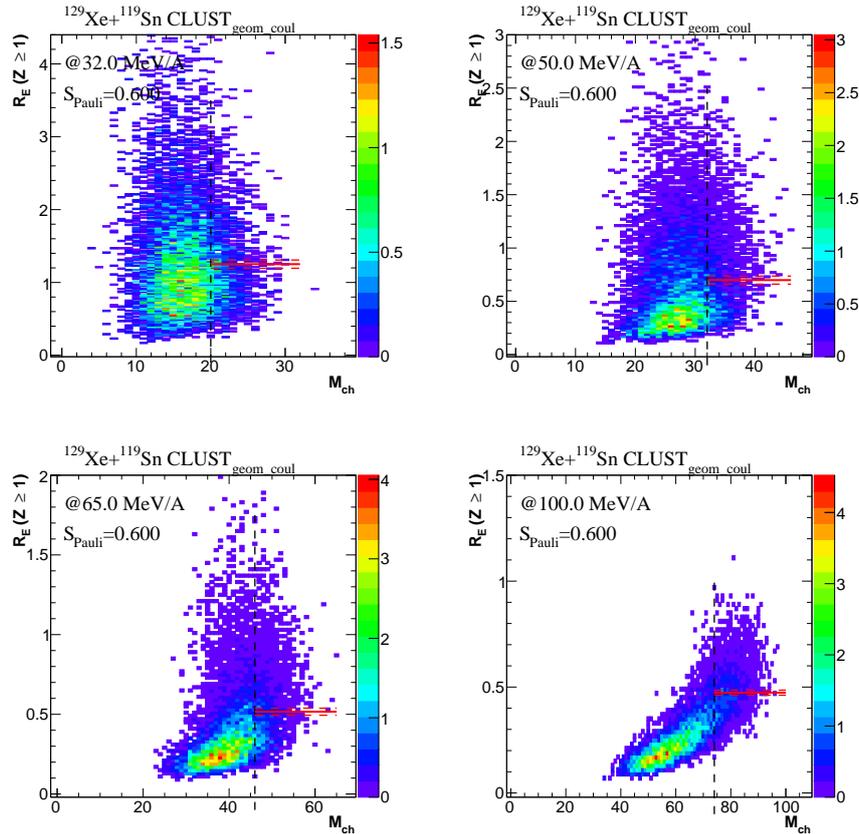


FIGURE 6.4 – Pouvoir d'arrêt en fonction de la multiplicité totale (particules chargées) de Xe+Sn pour 32, 50, 65 et 100 [MeV/A] (seuil de Pauli à 0.600). Le trait noir vertical représente la coupure en multiplicité. Le trait rouge horizontal représente la valeur moyenne du pouvoir d'arrêt, les traits rouges horizontaux en tirets représente les barres d'erreurs statistiques.

On remarque sur la figure 6.4 que la région des faibles multiplicités est vide contrairement aux valeurs expérimentales des références citées précédemment, cela est très certainement lié au fait que nous ne disposons pas de simulations pour les collisions périphériques. Néanmoins, on peut supposer que cela n'affecte pas notre région d'intérêt. On peut aussi s'intéresser à l'effet du seuil de Pauli sur cette coupure en multiplicité. Comme on le voit sur la figure 6.5, nos coupures sont en dessous des coupures expérimentales et le seuil de Pauli affecte peu nos valeurs pour les basses énergies (sauf pour 0.000 et 0.500, où on est proche du cas champ-moyen pur). Cette sous-estimation peut être due au fait qu'on ne prenne pas en compte la contribution des particules émises lors de la désexcitation secondaire.

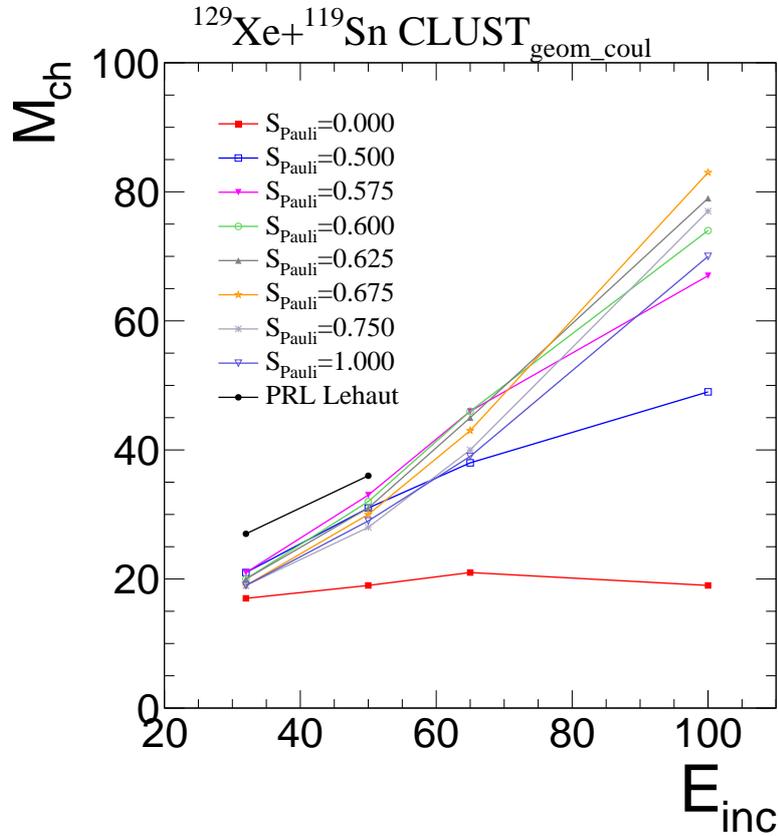


FIGURE 6.5 – Coupure en multiplicité totale (particules chargées) en fonction de l'énergie incidente de la collision Xe+Sn pour différents seuils de Pauli. En noir, les valeurs expérimentales de coupure en multiplicité de la référence [Leh+10].

6.5 Comparaison simulations-expérience

Dans cette partie, nous allons comparer les effets des différentes sélections sur le pouvoir d'arrêt, en gardant l'objectif de pouvoir extraire un seuil de Pauli satisfaisant pour notre modèle. Tout d'abord, nous allons regarder de façon globale l'effet du seuil de Pauli et la sélection sur le pouvoir d'arrêt. On rappelle que nous disposons de deux bases de comparaisons, l'un en relation avec la référence [Leh+10], où l'on s'intéresse au pouvoir d'arrêt sur les particules chargées. Et l'autre axe en lien avec la référence [Lop+14b], où l'on se restreint uniquement sur l'émission de protons. On abordera ces deux approches successivement.

6.5.1 Comportement du pouvoir d'arrêt en fonction de l'énergie incidente

Sur l'émission de particules chargées

Nous allons ici nous intéresser à l'allure du pouvoir d'arrêt des particules chargées émises en fonction de l'énergie incidente de réaction. Sur la figure 6.6, on a affiché le résultats pour les trois sélections.

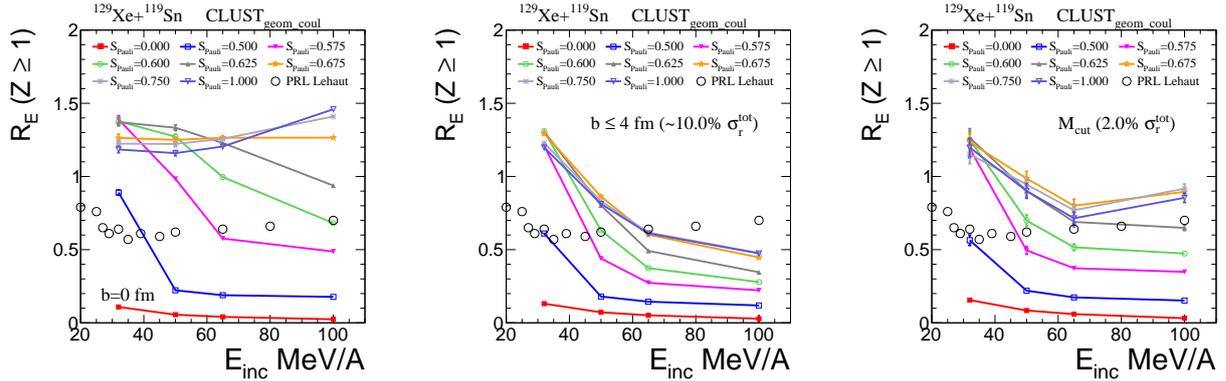


FIGURE 6.6 – Pouvoir d'arrêt des particules chargées émises en fonction de l'énergie incidente du système Xe+Sn pour différents seuils de Pauli et valeurs expérimentales [Leh+10]. A gauche : paramètre d'impact nul. Au milieu : mélange de paramètres d'impact de $b=0$ à $b=4$ [fm]. A droite : sélection en centralité par critère de plus haute multiplicité (2% de la section efficace de réaction).

Si l'on regarde sur la figure de gauche, où n'est retenu que le scénario où $b = 0.0$ [fm], on ne voit pas de net accord entre les données expérimentales et les différents seuils affichés. Pour ce qui est des seuils les plus hauts ($S_{Pauli} \geq 0.675$), on observe une certaine constance, quelle que soit l'énergie, voire une remontée du pouvoir d'arrêt pour les deux plus hauts seuils (0.750 et 1.000). Pour 32 [MeV/A], la formation d'un noyau de fusion est présente pour tous les seuils sauf 0.500 et 0.000 (champ-moyen pur). Mis à part pour les seuils 0.575 et 0.600, il semble que le scénario de paramètre d'impact nul ne soit pas compatible avec les données expérimentales.

Si l'on s'intéresse à la sélection des paramètres d'impact inférieurs à 4[fm] (figure 6.6 au centre), les effets des différents seuils de Pauli semblent s'atténuer et tous convergent vers un même comportement décroissant. Qui plus est, même avec le seuil le plus élevé (qui revient à enlever le blocage de Pauli), on sous-estime le pouvoir d'arrêt dès 65 [MeV/A]. A nouveau on retrouve la description de la fusion pour 32 [MeV/A] les seuils les plus élevés et cela malgré le mélange de paramètre d'impact. Dans le cas de cette sélection, aucun seuil ne semble pouvoir décrire correctement les valeurs de pouvoir d'arrêt sur le domaine d'énergie complet. Ce résultat est prévisible, car ici, les données théoriques sont quasi-périphériques jusqu'à centrales, de fait les événements les plus périphériques viennent "polluer" l'information.

En effet, si l'on porte notre intérêt sur notre sélection en centralité (figure 6.6 à droite), conforme avec la méthode expérimentale, on remarque un bien meilleur accord avec un

seuil donné. Si l'on exclu les points à 32 [MeV/A], on remarque que le seuil 0.625 est pleinement compatible avec les données expérimentales. On observe cependant que celui-ci n'affiche pas une remontée comme le suggère l'expérience. Au delà de ça, les différents seuils inférieurs ont un comportement plus régulier que pour le cas $b = 0$ [fm] (à gauche) et plus contrasté que pour le mélange de paramètres d'impact (au centre).

D'un point de vue global, on remarque que pour les seuils 0.000 et 0.500, le comportement diffère très peu en fonction de la sélection. On peut supposer que justement, pour cet intervalle de seuil, les effets du terme de collisions sont très faibles pour les énergies supérieures à 50[MeV/A]. A juste titre, car il y a très peu voire pas d'émission de particules pour les simulations en champ-moyen pur. Les particules chargées détectées sont le projectile et la cible, peu altérés de la voie d'entrée, de fait le pouvoir d'arrêt est globalement faible à cause du manque de transfert énergétique dans la direction transverse.

Sur l'émission de protons

On s'intéresse toujours à la même observable, mais cette fois-ci uniquement sur l'émission de protons. Dans ce cas là, on se dispense des effets du quasi-projectile et de la quasi-cible en voie de sortie des cas binaires. On ne s'intéresse qu'aux protons émis pendant la phase dynamique. De la même façon que précédemment, on a affiché l'effet des trois sélections sur la figure 6.7. A nouveau, on va regarder chaque graphique (chaque sélection) de gauche à droite.

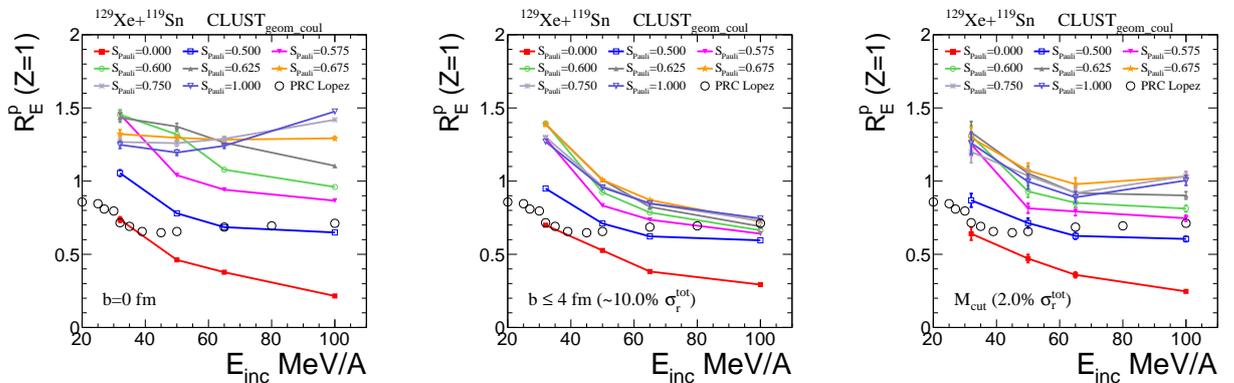


FIGURE 6.7 – Pouvoir d'arrêt des protons émis en fonction de l'énergie incidente du système Xe+Sn pour différents seuils de Pauli et valeurs expérimentales [Lop+14b]. A gauche : paramètre d'impact nul. Au milieu : mélange de paramètres d'impact de $b=0$ à $f=4$ [fm]. A droite : sélection en centralité par critère de plus haute multiplicité (2% de la section efficace de réaction).

Pour ce qui est du cas central, on remarque un bon accord entre les données expérimentales et le seuil 0.500 à partir de 50 [MeV/A]. Pour 32 [MeV/A], le champ-moyen pur reproduit plutôt bien la valeur expérimentale. Pour les seuils les plus élevés, on remarquera qu'il y a peu de différence avec la figure 6.6, ce qui laisse entendre que pour ces seuils, l'émission de particules chargées est majoritairement constituée de protons.

6.5. Comparaison simulations-expérience

Pour le mélange de paramètres d'impact, on a à nouveau ce comportement peu contrasté entre les seuils de Pauli, mais qui s'est accentué. On remarque une quasi-convergence vers une valeur de pouvoir d'arrêt quel que soit le seuil. De fait à partir de 65 [MeV/A], les valeurs expérimentales coupent plusieurs seuils de Pauli.

Et enfin, pour la sélection en centralité, on a à nouveau un bon accord comportemental pour les seuils intermédiaires. Le seuil 0.500 semble être un candidat moyen capable de reproduire les données expérimentales sur la plus grande gamme en énergie incidente. C'est à nouveau le seul seuil (avec le champ-moyen pur) qui soit capable de donner une valeur de pouvoir d'arrêt inférieur à 1.

Pour conclure, on remarque que la sélection en centralité dans le cas des particules chargées ou des protons émis reste le cas le plus satisfaisant pour la reproduction des données expérimentales. Cela sous-entend que notre méthode de sélection paraît conforme avec la méthode de sélection expérimentale utilisée. En effet, bien que les deux méthodes ne convergent pas directement vers un seuil donné dans le deux cas, on remarque des résultats comparables et plus satisfaisants dans ce cas là. Le cas central n'est pas pour autant à exclure systématiquement, car en effet, pour les seuils intermédiaires (de 0.000 à 0.575), le comportement du cas central est compatible avec la sélection en centralité. Ce qui indique une cohérence quant à la méthode de sélection en centralité basée sur la multiplicité.

6.5.2 Comportement du pouvoir d'arrêt en fonction du seuil de Pauli

L'objectif initial reste de trouver une unique valeur de seuil de Pauli convenable pour décrire les données expérimentales de pouvoir d'arrêt, et il ne peut y en avoir qu'un. Donc nous allons nous intéresser à la dépendance en seuil de Pauli du pouvoir d'arrêt pour les différentes énergies. Nous allons conserver le même schéma que le paragraphe précédent.

Sur l'émission de particules chargées

On présente l'évolution du pouvoir d'arrêt pour les particules chargées pour les différentes énergies incidentes mais en fonction du seuil de Pauli sur la figure 6.8.

Pour la figure de gauche (paramètre d'impact nul), on observe un comportement très proche entre 50, 65 et 100 [MeV/A] pour les seuils bas et intermédiaires, alors que pour les seuils élevés, 32, 50 et 65 convergent vers la même valeur de pouvoir d'arrêt. Cela s'explique par la voie de sortie. Pour les seuils élevés à 100 [MeV/A], le système explose et se vaporise à cause du grand nombre de collisions. Alors que pour les énergies inférieures à ces seuils-là, on tend vers une fusion. Et pour 32 [MeV/A] pour les seuils bas, on peut émettre l'hypothèse qu'il manque des points entre 0.000 et 0.500 pour décrire correctement le comportement de transition qu'on observe sur les autres énergies. On remarque que pour 50, 65 et 100 [MeV/A], les valeurs expérimentales donnent des valeurs de seuils de Pauli relativement proches, ce qui est un bon indicateur. Pour 32 [MeV/A],

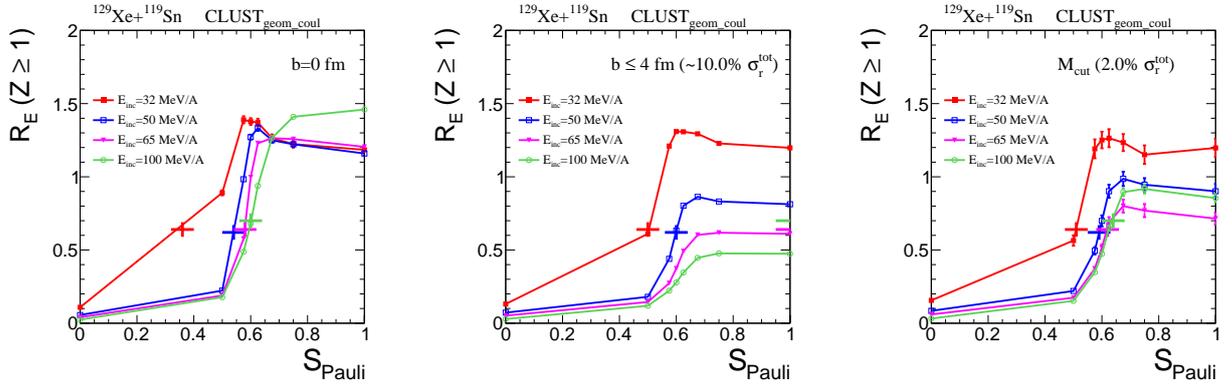


FIGURE 6.8 – Pouvoir d'arrêt des particules chargées émises en fonction du seuil de Pauli du système Xe+Sn pour différentes énergies incidentes. A gauche : paramètre d'impact nul. Au milieu : mélange de paramètres d'impact de $b=0$ à $b=4$ [fm]. A droite : sélection en centralité par critère de plus haute multiplicité (2% de la section efficace de réaction). Les croix représentent l'intersection entre la valeur de pouvoir d'arrêt expérimentale [Leh+10] et les valeurs théoriques pour une énergie donnée.

le seuil de Pauli tiré de la valeur expérimentale est bien plus bas, à nouveau, cela est certainement causé par un manque de valeurs entre 0.000 et 0.500.

Pour la figure au centre (mélange de paramètres d'impact de 0 à 4 [fm]), le comportement est bien contrasté et les différentes énergies possèdent toutes le même comportement. On remarque que pour 32 [MeV/A], le manque de valeurs entre 0.000 et 0.500 durcit un peu le comportement alors que pour les autres énergies, celui-ci est décrit de façon claire. Concernant les valeurs expérimentales, on retrouve le problème qu'aucun seuil ne peut décrire correctement les valeurs pour 65 et 100 [MeV/A], les valeurs de pouvoirs d'arrêt sont trop basses. On explique cela par le fait que cette sélection comporte des simulations quasi-périphériques avec des voies de sortie binaires, qui ont tendance à sous-estimer le pouvoir d'arrêt. Malgré cela, on observe bien le comportement de transition de façon similaire au cas central.

Et pour la figure de droite (sélection en centralité), on observe un comportement proche entre les trois énergies, ce qui est à nouveau un bon indicateur, que l'énergie n'influence pas la valeur de seuil de Pauli à choisir. On remarque encore le manque de résultat entre 0.000 et 0.500 pour 32 [MeV/A]. Les valeurs de seuil de Pauli tirées à partir des valeurs expérimentales se retrouvent dans un intervalle très serré, ce qui est très satisfaisant. A nouveau, on rappelle que cette sélection d'événements reste la plus cohérente et la plus comparable avec les données expérimentales. D'une manière générale, les barres d'erreurs sont notables pour 32 [MeV/A], principalement à cause de la faible émission de particules et au large intervalle de valeurs de pouvoir d'arrêt (voir figure 6.4).

Sur l'émission de protons

Les résultats précédents sont très satisfaisants, mais nous souhaitons fixer ce seuil de Pauli de façon à ce qu'il soit acceptable dans tous les cas, indépendamment de la sélection ou de l'énergie. De la même façon que précédemment, on a tracé l'évolution du pouvoir

6.5. Comparaison simulations-expérience

d'arrêt en fonction du seuil de Pauli pour les différentes énergies et sélections sur la figure 6.9.

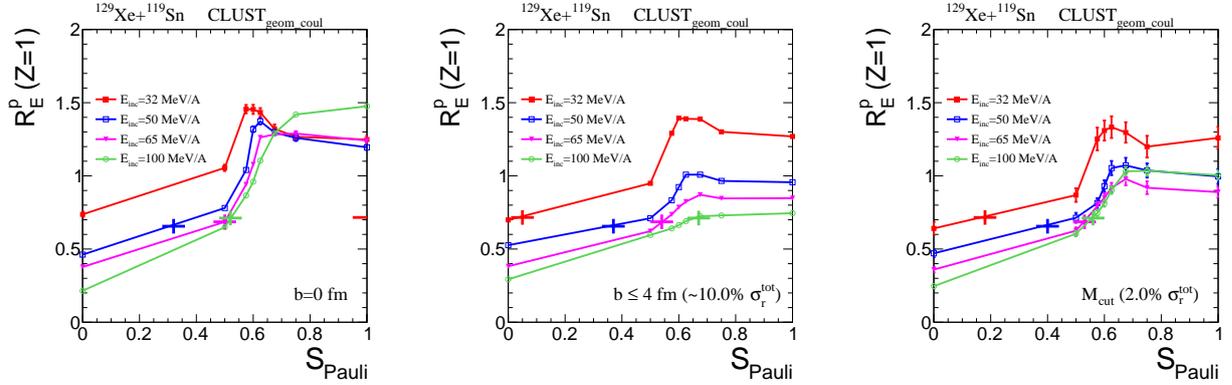


FIGURE 6.9 – Pouvoir d'arrêt des protons émis en fonction du seuil de Pauli du système Xe+Sn pour différentes énergies incidentes. A gauche : paramètre d'impact nul. Au milieu : mélange de paramètres d'impact de $b=0$ à $f=4$ [fm]. A droite : sélection en centralité par critère de plus haute multiplicité (2% de la section efficace de réaction). Les croix représentent l'intersection entre la valeur de pouvoir d'arrêt expérimentale [Lop+14b] et les valeurs théoriques pour une énergie donnée.

Dans le cas des protons émis du cas central (figure de gauche), le comportement est similaire à celui des particules chargées émises. On retrouve un comportement assez proche pour 50, 65 et 100 [MeV/A] pour les seuils bas et intermédiaires, et un autre assez semblable pour 32, 50 et 65 pour les seuils élevés. On remarquera l'impossibilité pour la courbe à 32 [MeV/A] de se rapprocher de la valeur expérimentale, alors que les autres valeurs sont groupées, et 65 et 100 [MeV/A] sont très voisines. Globalement, les seuils trouvés sont inférieurs au cas des particules chargées émises.

Intéressons-nous au cas du mélange de paramètres d'impact. Contrairement au cas des particules chargées, cette fois-ci, on peut extraire des valeurs à partir des valeurs expérimentales, mais on remarque une gamme de valeurs en fonction de l'énergie, de 0.05 à 0.650. Encore une fois, le manque de valeur entre 0.000 et 0.500 pour 32 [MeV/A] a une tendance à sous-estimer la valeur de seuil trouvée.

Et enfin, pour le cas de la sélection en centralité, on retrouve un comportement où les seuils tirés des valeurs expérimentales pour 50, 65 et 100 [MeV/A] sont assez proches. La valeur pour 32 [MeV/A] semblerait encore sous-estimée à cause du manque de valeurs en 0.000 et 0.500. On remarquera que les comportements pour 50 et 100 [MeV/A] sont très proches, voire confondus pour les hauts seuils, alors que celui pour 65 [MeV/A] est un peu en dessous. Cette inversion pour les hauts-seuils n'est pas expliquée. Pour la même raison que dans le cas précédent (particules chargées émises), on retrouve des barres d'erreurs notables pour 32 [MeV/A].

6.5.3 Valeurs de seuils déduites

On rappelle que l'objectif est de trouver un seul et unique seuil pour toutes les énergies. Pour cela, on a synthétisé toutes les valeurs de seuils extraites à partir des points expérimentaux pour les deux études (particules chargées d'une part et protons uniquement d'autre part) dans la figure 6.10.

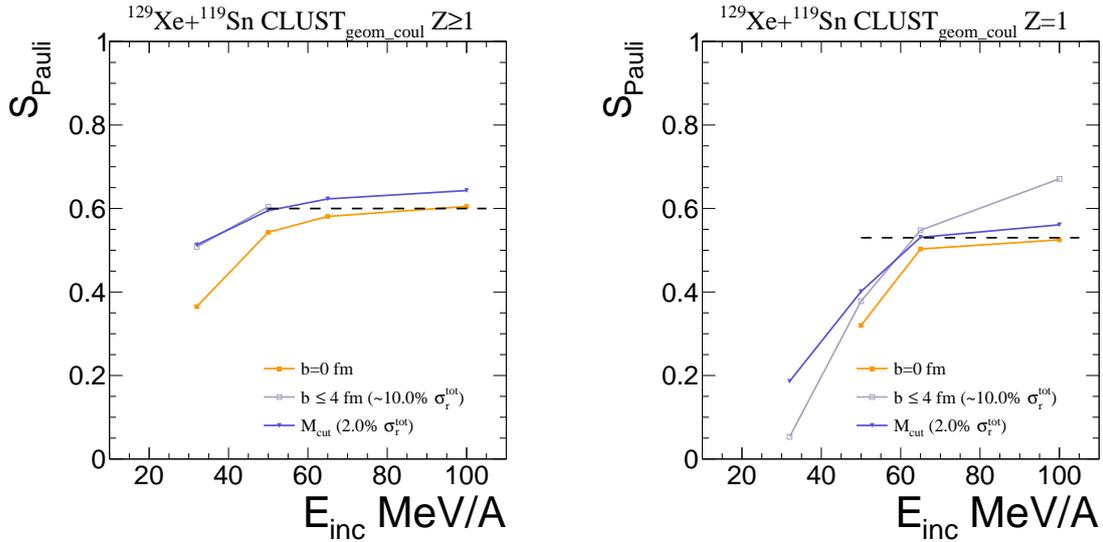


FIGURE 6.10 – Valeurs de seuils de Pauli déduites par énergie incidente et par méthode de sélection à partir des valeurs expérimentales. En orange le cas central, en gris le mélange de paramètres d'impact (de 0 à 4[fm]). En bleu, la sélection en centralité. A gauche, le cas des particules chargées émises [Leh+10]. A droite, le cas des protons émis [Lop+14b].

Premier constat, pour la méthode en mélange de paramètres d'impact, soit nous n'avons pas obtenu de points car les valeurs de pouvoir d'arrêt ne correspondaient pas, soit les valeurs varient beaucoup avec l'énergie, ce qui n'est pas compatible avec l'objectif initial. Rappelons que cette méthode n'est pas en phase avec la sélection expérimentale, il est donc tout à fait normal que ces résultats soient peu satisfaisants. Néanmoins, si la dépendance en énergie est grande, les points décrivent un comportement qui se rapproche de la méthode de sélection en centralité. Cela laisse supposer que pour certaines énergies, les événements semi-périphériques polluent peu les données.

Deuxième constat, le cas le plus central ($b = 0$ [fm]) et la sélection en centralité admettent des comportements très proches, si ce n'est un léger décalage (où le cas central sous estime la sélection en centralité) à peu près constant avec l'énergie. On peut donc supposer aisément que la méthode de sélection (théorique et expérimentale) est satisfaisante pour ne garder que les événements les plus centraux, dont le comportement extrême est le cas central. Les seuils de Pauli du cas central sont inférieurs au cas de la méthode en centralité. Cela est causé par le fait que le cas central est le plus propice aux effets dissipatifs qui vont traduire l'émission des particules. Dans l'autre cas, on prend aussi en compte des collisions quasi-centrales, où la périphéricité induit des réactions de dissipations moindres, d'où un seuil de Pauli un peu plus élevé nécessaire pour décrire

les mêmes valeurs de pouvoirs d'arrêt.

Troisième constat, les valeurs de seuils de Pauli varient moins en fonction de l'énergie pour le cas des particules chargées. Alors que dans l'autre cas, la variation en seuil de Pauli est bien plus grande, sauf pour 65 et 100 [MeV/A]. Au regard de ces résultats, nous pouvons en déduire un intervalle restreint de valeurs de seuils de Pauli satisfaisantes. Dans le cas des particules chargées, la valeur $S_{Pauli} = 0.600$ (représentées en tirets noirs) est retenue. Dans le cas des protons libres, la valeur $S_{Pauli} = 0.525$ est retenue. Dans les deux cas, ces valeurs ont été retenues car elles moyennent les valeurs qui admettent une faible variation en fonction de l'énergie. Car on ne peut admettre qu'un seul seuil quelle que soit l'énergie et l'observable regardée.

Dans l'hypothèse où il existe une variation des effets de milieu en fonction de l'énergie, cela ne doit pas passer par une variation du seuil de Pauli dans le cadre de notre formalisme. L'implémentation de ce seuil correspond au principe du blocage de Pauli qui est une propriété intrinsèque de fermions, ici caractérisés par nos états-cohérents, il n'est pas envisageable de faire varier les effets de ce blocage en fonction de l'énergie incidente de la réaction.

Pour la suite, nous allons alors introduire des effets de milieu comme suggéré dans la référence [Lop+14b] avec l'introduction d'un facteur F multiplicatif de la section efficace nucléon-nucléon. Dans cette même référence, il est proposé une relation entre ce facteur F et l'énergie incidente, de fait, c'est un moyen beaucoup plus satisfaisant pour introduire des effets de milieu dans notre modèle plutôt que par une variation du blocage de Pauli.

6.5.4 Effets de milieu

Nous allons restreindre notre étude au cas des particules chargées avec le seuil choisi précédemment à $S_{Pauli} = 0.600$. Dans ce cas là, on a vu que le cas central était plutôt en accord avec la sélection en centralité, donc nous allons aussi nous restreindre sur le cas central à $b = 0.0$ [fm], de plus, le cas central est le plus propice pour sonder les effets de milieu. Et enfin, dernière restriction, comme on le voit sur les figures 6.10 et 6.6, la valeur à 32 [MeV/A] est moins bien décrite pour le seuil de Pauli choisi, donc on se limitera pour des énergies entre 50 et 100 [MeV/A].

Contributions aux effets de milieu

Tout d'abord, nous allons entreprendre de doser les effets de l'introduction du facteur F multiplicatif de la section efficace nucléon-nucléon.

$$\sigma_{NN}^{milieu} = F \times \sigma_{NN} \quad (6.3)$$

Donc en conservant la valeur de seuil que nous avons déterminée précédemment à $S_{Pauli} = 0.600$, nous allons faire varier ce facteur F de 0.5 à 1.5. Comme on le voit sur la figure 6.11, la diminution du facteur F par rapport à 1 tend à faire diminuer la valeur du pouvoir d'arrêt. Alors qu'augmenter la valeur au delà de 1 provoque une augmentation de la valeur du pouvoir d'arrêt. Ce qui implique que diminuer les effets de milieu avec ce facteur, diminue la valeur de pouvoir d'arrêt comme le ferait une diminution de la

valeur du seuil de Pauli. De même façon que si l'on augmente les effets de milieu, avec un seuil supérieur à 1, la valeur de pouvoir d'arrêt augmente comme le ferait aussi une augmentation du seuil de Pauli.

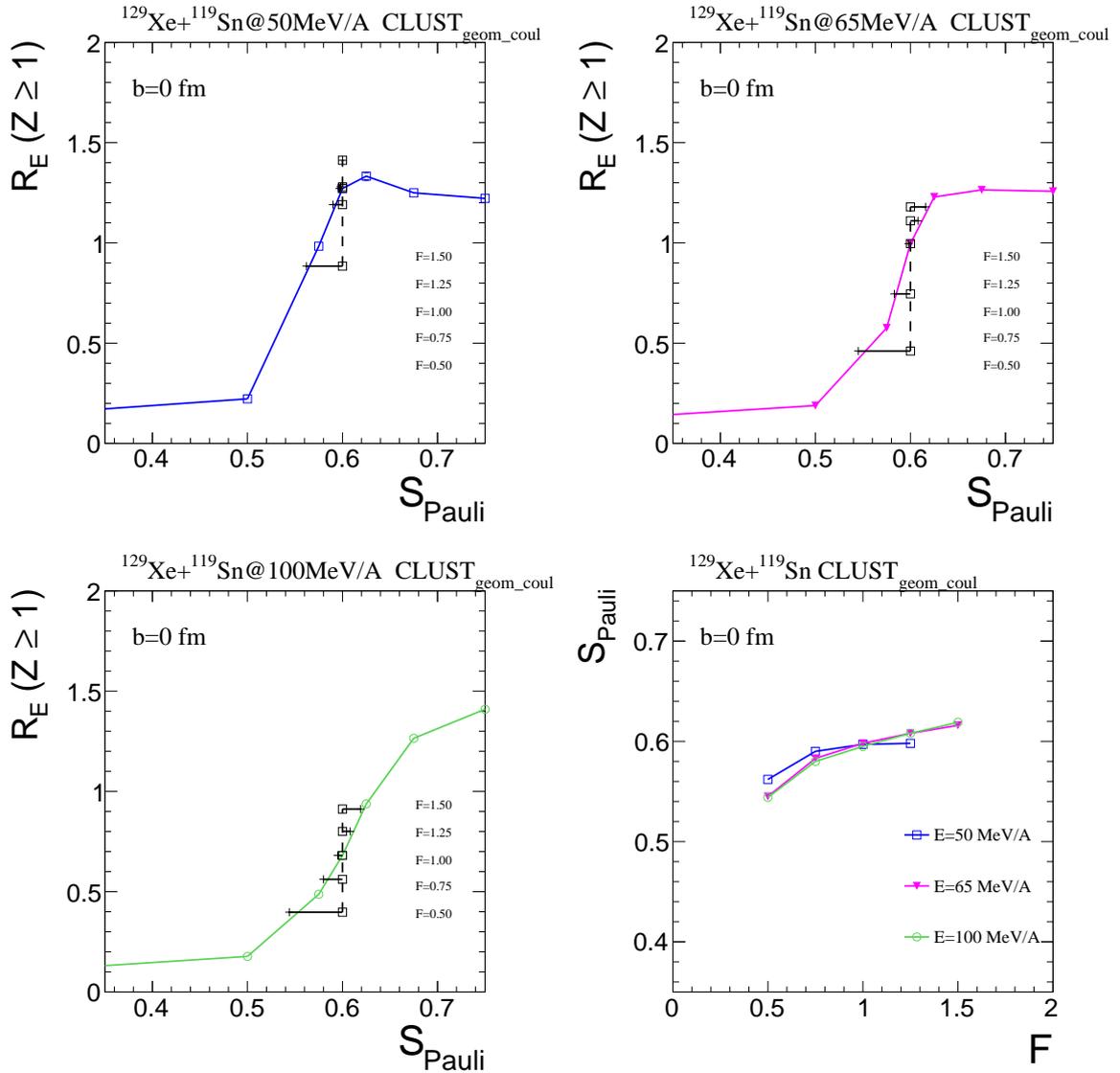


FIGURE 6.11 – Évolution du pouvoir d'arrêt en fonction du seuil de Pauli pour le système Xe+Sn à 50, 65 et 100 [MeV/A]. En noir vertical : valeurs du pouvoir d'arrêt en fonction du facteur multiplicatif F pour $S_{\text{Pauli}} = 0.600$. En noir horizontal : valeurs de seuils de Pauli associées à la variation de valeur du pouvoir d'arrêt pour différentes valeurs de F . En bas à droite, corrélation entre le facteur F et S_{Pauli} .

Ce qui indique que le seuil de Pauli et le facteur F jouent un même rôle sur le pouvoir d'arrêt. Pour les trois figures (de la figure 6.11) correspondant à différentes énergies (haut et bas-gauche), on a cherché les valeurs de seuils de Pauli qui correspondent à la variation de la valeur du pouvoir d'arrêt après une variation de F pour le seuil de référence à 0.600.

6.6. Conclusion

Cette corrélation est tracée en bas à droite de la figure 6.11. Avec un ajustement affine, on peut en déduire que :

$$\delta S_{Pauli} = 7.08 \cdot 10^{-2} \delta F \quad (6.4)$$

Donc on peut estimer que pour une variation de 10% de F , on va avoir une variation de 0.71% en S_{Pauli} . De là, si S_{Pauli} représente un paramètre de réglages "grossiers", c'est-à-dire où une faible variation de S_{Pauli} provoque une grande variation de pouvoir d'arrêt (surtout si on regarde la forte transition de comportement entre $S_{Pauli} = 0.500$ et $S_{Pauli} = 0.700$); le facteur F lui représente un réglage plus fin. Toujours sur la figure 6.11 en bas à droite, on peut remarquer que la corrélation entre S_{Pauli} et F est indépendante de l'énergie. Éventuellement pour 50 [MeV/A], on voit une légère différence, en effet si l'on regarde la courbe en haut à gauche, on peut voir que le choix du point fixe ($S_{Pauli} = 0.600$; $F = 1$) est assez haut par rapport à la transition de comportement du pouvoir d'arrêt. Alors que pour 65 et 100 [MeV/A], ce point fixe est clairement au centre de la transition et la variation de F sonde bien cette transition.

Effets de F sur le pouvoir d'arrêt

On va désormais s'intéresser à la variation de F en fonction de l'énergie incidente. Pour cela, on va comparer les valeurs de pouvoir d'arrêt en fonction de l'énergie pour les différentes valeurs de F , tracées sur la figure 6.12.

Sur cette figure, on retrouve le comportement décrit précédemment, on voit que les valeurs de pouvoir d'arrêt en fonction de l'énergie augmentent avec l'augmentation du facteur F . De fait, en comparant les courbes théoriques avec les valeurs expérimentales, on peut extraire des points et en déduire une dépendance de F en fonction de l'énergie incidente. Cela est tracé en haut à droite de la figure 6.12. On voit qu'avec notre choix de facteur de Pauli $S_{Pauli} = 0.600$, notre paramétrisation de F trouve une valeur de 1 pour 100 [MeV/A] et 0.5 pour 58 [MeV/A]. On admet que cette dépendance est très fortement liée à la valeur choisie de S_{Pauli} . Néanmoins ce comportement est cohérent avec les résultats de la publication [Lop+14b], bien que notre étude porte ici sur l'émission des fragments chargés (avec des données expérimentales tirées de [Leh+10]) et pas uniquement des protons. Donc avec une méthodologie différente, on arrive au même constat que les effets de milieu semblent corrélés avec l'énergie incidente comme suggéré dans la référence citée précédemment.

6.6 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons insisté sur le réglage d'un paramètre de notre code de simulation : le seuil de Pauli. Ce seuil traduit le blocage de Pauli en acceptant ou rejetant des collisions qui satisfont cette condition comme quoi les ondelettes décrivent ou non un même état (en plus du spin et de l'isospin). Comme on l'a vu, ce seuil est un paramètre crucial quant à l'implémentation des effets dissipatifs dans notre programme et ses effets sont d'autant plus importants avec l'énergie incidente, et une faible variation de ce seuil peut mener à des voies de sortie de réaction totalement différentes. Or, il semble impossible de fixer ce seuil uniquement à partir du formalisme, nous avons alors opté pour le

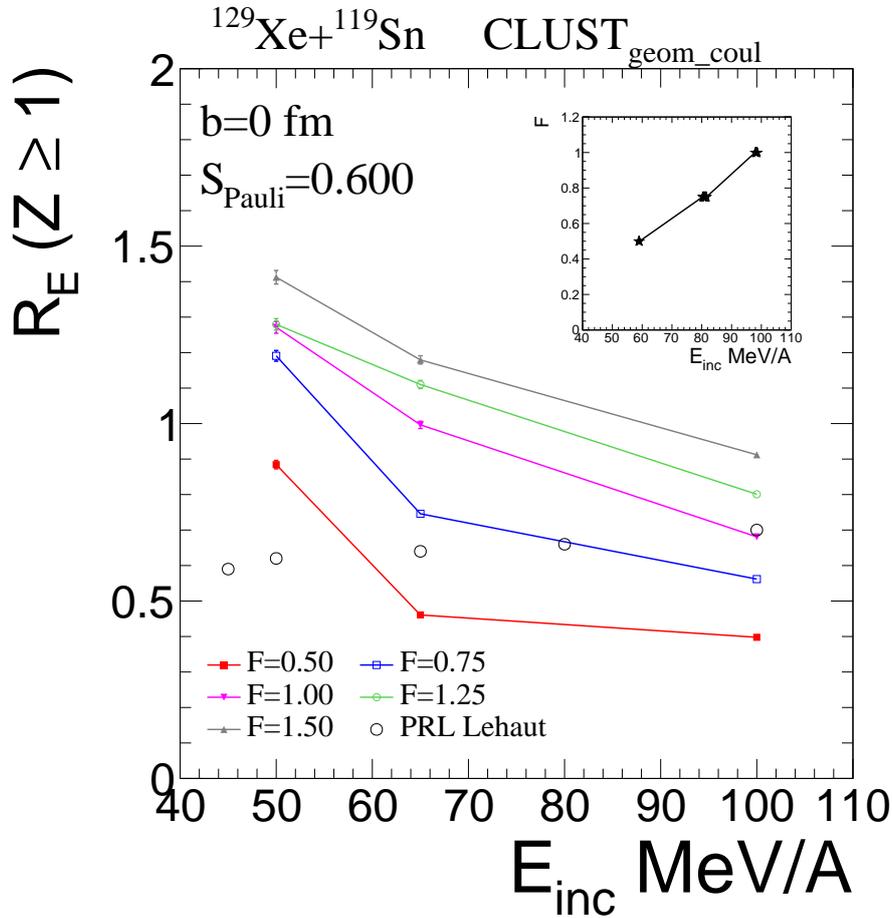


FIGURE 6.12 – Évolution du pouvoir d'arrêt en fonction de l'énergie incidente pour le système Xe+Sn pour différentes valeurs de $F=[0.5 : 1.5]$ pour le cas central ($b=0[\text{fm}]$) avec $S_{\text{Pauli}} = 0.600$. En haut à droite : corrélation entre F et E_{inc} extraites à partir des intersections des courbes pour les différents F et les valeurs expérimentales.

choix de fixer ce seuil de Pauli à partir d'une comparaison avec des données expérimentales.

Nous avons alors choisi le système $^{129}\text{Xe} + ^{119}\text{Sn}$ pour des énergies allant de 32 à 100 [MeV/A]. Cependant, une comparaison des résultats de simulation directement avec les données expérimentales est impossible. Nous avons procédé alors à une reconstruction de fragments à l'aide d'un algorithme d'agrégation et ces fragments ont été diffusés par prolongation coulombienne afin de se rapprocher au mieux d'une distribution qui pourrait être observée expérimentalement (on suppose que l'étape de désexcitation influence peu les résultats de pouvoir d'arrêt, mais il serait intéressant de tester ces effets).

Avec ces distributions en fragments, qu'on appellera "événements", nous avons procédé à trois types de sélection d'événements en fonction des paramètres d'impact. La première est un cas qui est propre à la modélisation : le cas central, avec un paramètre

d'impact nul. Cette sélection traduit le scénario le plus central où les effets de milieu sont les plus présents. C'est un cas extrême et singulier. La deuxième sélection prend en compte toutes nos simulations, dont les paramètres d'impact vont de 0 à 4 [fm]. De fait, nous avons pondéré nos événements avec les sections efficaces de réaction estimées à partir de nos paramètres d'impact. Au regard de la section efficace totale de réaction, notre base de données de simulations représente un échantillon d'environ 10% de la section efficace totale de réaction. Et enfin, notre troisième sélection est réalisée avec une méthodologie commune aux données expérimentales. Nous nous sommes focalisés sur les événements de plus haute multiplicité, qui sont susceptibles de correspondre aux réactions les plus centrales, en ne retenant que l'équivalent de 2% de la section efficace totale de réaction. Ces trois sélections seront utilisées par la suite et nos comparaisons porteront d'une part sur l'ensemble des produits chargés émis, et d'autre part uniquement sur les protons émis.

Ensuite, dans un premier temps, nous avons observé de façon globale l'effet du seuil sur le pouvoir d'arrêt, observable dont nous avons déjà parlé dans le chapitre 5. On remarque alors que seuls les seuils intermédiaires semblent compatibles avec les données expérimentales. De plus, les valeurs tirées à partir du mélange de paramètres d'impact ne semblent pas pouvoir décrire les résultats expérimentaux, ce qui est normal d'une part car ces résultats se focalisent sur les réactions les plus centrales, et non semi-périphériques. De fait, notre cas central et notre sélection en centralité semblent plus compatibles avec les résultats expérimentaux.

De plus, pour vérifier notre hypothèse sur les seuils de Pauli intermédiaires, nous avons regardé l'évolution du pouvoir d'arrêt en fonction de ce paramètre. On observe alors une véritable transition de comportement entre les seuils minimaux et maximaux et cette phase de transition intervient justement sur nos seuils intermédiaires. Suite à une comparaison avec les données, on observe qu'à nouveau, le cas central et la sélection en centralité sont à même de concorder avec les valeurs expérimentales. De fait, on retiendra la valeur $S_{Pauli} = 0.600$ pour le cas des produits chargés émis, et une valeur inférieure, $S_{Pauli} = 0.525$ pour le cas des protons émis. Néanmoins, le comportement du premier cas étant plus satisfaisant avec la condition d'un seuil unique, on conservera la valeur $S_{Pauli} = 0.600$.

Mais on observe que ce seuil ne peut décrire à lui tout seul les effets de milieu et les différentes valeurs de pouvoir d'arrêt en fonction de l'énergie incidente. De fait, on introduit un facteur multiplicatif de la section efficace nucléon-nucléon comme suggéré dans la référence [Lop+14b]. Ce facteur F agit alors dans le même sens que notre seuil de Pauli mais de façon plus fine. Le seuil de Pauli est à la vis macroscopique ce que le facteur F est au réglage micrométrique. Ensuite, pour différentes valeurs de F , nous avons tracé l'évolution du pouvoir d'arrêt en fonction de l'énergie incidente. On en tire alors une dépendance de ce facteur multiplicatif en fonction de l'énergie incidente. Cette dépendance indique que les effets de milieu semblent réduits pour des énergies intermédiaires comme 50 [MeV/A] et pour les énergies plus élevées, comme 100 [MeV/A], cette diminution est moindre, ce qui est cohérent avec les résultats présentés dans la référence [Lop+14b].

Néanmoins, cette conclusion est soumise à différentes sélections et restrictions. En

effet, ce dernier travail ne prend en compte que le cas central, des travaux doivent être engagés pour prendre en compte les réactions quasi-centrales avec le critère de sélection en centralité. De plus, nous nous sommes focalisés sur le cas des particules chargées émises, le cas des protons émis doit être étudié avec un seuil de Pauli réduit. Et enfin, se pose le problème du cas à 32 [MeV/A], il semble très difficile de reproduire les valeurs expérimentales de pouvoir d'arrêt à cette énergie-là et peut-être que le modèle à lui-seul ne peut y décrire correctement l'émission des particules chargées, en effet, rappelons que nous ne prenons pas en compte l'émission de particules chargées causée par la désexcitation secondaire. On peut aussi questionner la méthode de sélection. A cette énergie-là, la corrélation entre centralité et hautes valeurs de multiplicité semble moins explicite de part le faible nombre de fragments et les grandes fluctuations de valeur de pouvoir d'arrêt [Lop+14b]. Une étude approfondie devrait être envisagée à cette énergie-là avec une couverture plus large en paramètres d'impact et un traitement complet de la phase asymptotique.

Conclusion

Tout au long de ce manuscrit, nous avons décrit le formalisme, l'implémentation et les résultats de notre approche pour décrire les collisions d'ions lourds aux énergies intermédiaires. Au cours du premier chapitre, nous avons posé le contexte et la problématique de la simulation de la dynamique nucléaire aux énergies intermédiaires. Nous avons vu que l'exploration et la compréhension de l'équation d'état de la matière nucléaire nous est accessible avec notre approche. De fait, notre description de la matière nucléaire se fait lors des collisions d'ions lourds aux énergies de Fermi et pour ce processus, nous avons décrit les quelques voies de sorties attendues afin de dresser un bestiaire des comportements observés en simulation. De plus, nous avons listé de façon non-exhaustive les différentes approches de simulation en se focalisant sur les codes de transports. D'une part quant à la description de l'état fondamental des noyaux et d'autre part sur leur évolution dynamique lors de la collision. Notre formalisme repose premièrement sur la résolution de l'équation de Hartree-Fock pour la description des noyaux à l'état fondamental et deuxièmement sur les équations du type Hartree-Fock Dépendant du Temps Étendues pour la partie dynamique.

Dans un second chapitre, nous nous sommes concentrés sur la théorie du champ-moyen, théorie fondamentale pour les approches du type Hartree-Fock. Dans un premier temps, nous avons exploré les différents ingrédients nécessaires à la résolution de l'équation de Hartree-Fock, notamment l'introduction d'un potentiel effectif du type Skyrme et la condition initiale nécessaire à la résolution itérative de cette équation qui est auto-cohérente. Dans un second temps, nous avons porté notre intérêt sur le formalisme mathématique utilisé pour la description des fonctions d'onde de notre résolution : la théorie des ondelettes et précisément l'utilisation des états-cohérents, mais aussi sur l'approximation de l'oscillateur harmonique quantique, couramment utilisée pour la description de l'état-fondamental des noyaux. L'utilisation de la théorie des ondelettes et notamment des états-cohérents fait la particularité de notre approche qui est du type quantique. En effet, contrairement à une approche particules-test fréquemment utilisée dans les codes de transport du type Boltzmann, nos nucléons sont décrits par leurs fonctions d'onde, elles-mêmes décomposées en états-cohérents. Et enfin, nous avons présenté quelques résultats de notre approche sur des observables macroscopiques comme le rayon ou l'énergie de liaison des noyaux, d'abord sur un grand nombre de noyaux pour voir la réponse du programme ; et ensuite sur des noyaux précis où nous avons exploré leurs différents isotopes pour voir des effets plus fins. On remarque que le programme reproduit bien les énergies de liaisons sur une grande variété de noyaux et plus précisément sur les plus lourds, mais au prix d'une description des rayons un peu dégradée. On remarquera aussi une bonne cohérence avec les énergies de liaisons en fonction de l'asymétrie en isospin pour les noyaux les plus lourds (ici l'étain).

Puis, dans un troisième chapitre, nous nous sommes intéressés à la description dynamique des noyaux. D'abord, nous avons établi le système d'équations d'évolution pour

nos états-cohérents, ces équations décrivent le comportement dynamique de nos ondes dans le cadre de la description en champ-moyen. D'ailleurs, on remarque une assez bonne stabilité temporelle de nos noyaux (issus des calculs Hartree-Fock) avec les équations d'évolution en champ-moyen. Mais celles-ci ne sont pas suffisantes pour une description aux énergies intermédiaires. En effet, des effets dissipatifs doivent être pris en compte, ils sont issus des interactions à deux-corps, négligés dans les équations de champ-moyen (qui sont une description à 1-Corps). Avec une énergie incidente croissante, ces effets ne sont plus négligeables et leurs effets entrent en compétition avec le champ-moyen jusqu'à devenir prédominants pour des énergies incidentes très élevées (au-delà de notre description). Nous avons introduits ces effets à l'aide d'un terme dit "de collision", dans lequel nous reproduisons les effets à deux-corps à l'aide de collisions élastiques entre états-cohérents judicieusement traitées. En effet, ce terme de collision prend en compte la section efficace nucléon-nucléon, mais aussi le blocage de Pauli. Mais notre approche n'est pas restreinte à la description des collisions d'ions lourds, en effet, nous pouvons aussi porter notre étude sur la simulation de la matière nucléaire à haute-densité, notamment dans les couches externes des étoiles à neutrons.

Dans le quatrième chapitre, nous avons discuté autour des limites de la description de champ-moyen étendu. En effet, ce formalisme se retrouve limité quant à la description de certains phénomènes comme la multi-fragmentation. De fait, il faut aller au-delà du champ-moyen, car la dissipation engendrée par le terme de collisions ne suffit pas à créer des dispersions notables des observables autour du comportement moyen. On doit donc ajouter des fluctuations conséquentes à notre modèle, pour cela, nous nous sommes inspirés des approches type Boltzmann-Langevin tout en conservant le caractère quantique propre à notre description. Ce travail préliminaire constitue néanmoins la première approche de ce type à notre connaissance et nécessitent de plus amples travaux.

Mais la description en états-cohérents peut se montrer contraignante pour une éventuelle comparaison avec les données expérimentales. De fait, dans le cinquième chapitre, nous nous sommes intéressés à la reconstruction de l'information à N-Corps compatible avec la description en champ-moyen étendu, autrement dit à la reconstruction de l'information de nos nucléons. Dans un premier temps, nous avons discuté autour des noyaux chauds et fragments, qui se forment pendant la phase dynamique de la collision d'ions lourds. Puis, autour de quelques observables intéressantes pour discuter sur le comportement de la matière nucléaire, précisément sur le pouvoir d'arrêt qui est une observable qui a été largement étudiée autant expérimentalement que théoriquement. Puis dans un second temps, nous avons formalisé la reconstruction de l'information à N-Corps à partir de notre distribution en états-cohérents. Suite à cette reconstruction, qui nous fournit les positions et impulsions des nucléons, nous procédons à une agrégation des nucléons pour obtenir la distribution en fragments issue de la collision. Cette étape est nécessaire pour une éventuelle comparaison avec les données expérimentales, car on ne peut se satisfaire d'une distribution en états-cohérent qui décrit le comportement moyen de la collision et qui n'a pas d'écho expérimentalement.

Et enfin, dans un dernier chapitre, nous avons cherché à confronter notre approche à des données expérimentales. Nous avons choisi de réaliser des simulations du système $^{129}\text{Xe} + ^{119}\text{Sn}$ pour des énergies allant de 32 à 100 MeV/A en se focalisant sur les collisions centrales. Mais, il s'avère que notre description repose sur le calibrage d'un

paramètre du terme de collision, qui n'est autre que le seuil introduit pour définir le blocage de Pauli et la sensibilité du comportement moyen à ce paramètre est très notable. De fait, nous avons réalisé une étude approfondie en parcourant les valeurs possibles de ce paramètre et nous avons opté pour un calibrage à partir des données expérimentales. Pour cela, nous nous sommes appuyés sur le comportement du pouvoir d'arrêt à différentes énergies incidentes pour d'une part l'émission de particules chargées, d'autre part sur l'émission de protons. Afin de se coller au mieux à la démarche expérimentale, nous avons réalisé un échantillonnage et une agrégation de notre distribution pour différents paramètres d'impact. Suite à cela, nous avons réalisé 3 sélections différentes : une première où l'on décrit le cas le plus central, le paramètre d'impact nul; une deuxième où l'on a mélangé nos événements pour tous les paramètres d'impact disponibles en y affectant une pondération liée au paramètre d'impact; et enfin une troisième dans la démarche proposée par les références [Leh+10; Lop+14b] où le critère de centralité de la réaction repose sur l'hypothèse de la plus grande multiplicité et d'une saturation du pouvoir d'arrêt. Suite à différentes comparaisons, nous en sommes arrivés à la conclusion qu'il est possible de converger sur une valeur unique de ce paramètre, sous condition de ne se baser sur la première et la troisième sélection. On a remarqué par ailleurs que pour des énergies incidentes à partir de 50 MeV/A, les résultats du cas central étaient pleinement compatibles avec la sélection en centralité.

Ce travail de thèse se présente comme une revue complète de notre approche pour la modélisation des collisions d'ions lourds aux énergies intermédiaires. Il présente autant les bases de la théorie et des formalismes employés que les méthodes numériques. Notre modèle fait partie des quelques approches quantiques en développement et nécessite de faire encore de nombreuses améliorations pour une meilleure description.

Premièrement, la description des noyaux à l'état-fondamental est satisfaisante mais des points comme le pavage de l'espace des phases ou la décomposition des fonctions d'ondes peuvent être révisés. Si l'approximation harmonique semble inévitable, il faut néanmoins réussir à en palier les problèmes, notamment une très forte attractivité qui tend à surévaluer la densité centrale et celle-ci peut être aussi engendrée par la force effective utilisée, l'utilisation de nouvelles forces est un travail en cours.

Secondement, les perspectives autour de la dynamique doivent se porter premièrement sur des tests autour de la force effective et sur le terme de collision (le choix de la section efficace nucléon-nucléon et une meilleure maîtrise du blocage de Pauli). Qui plus est, un grand boulevard de travaux s'offrent avec l'introduction des fluctuations au sein de notre modèle quantique, ce qui semble être une piste très prometteuse pour la description de la matière nucléaire au regard des résultats de modèles types Boltzmann-Langevin comme BLOB [Nap17].

Et troisièmement, des travaux doivent être portés sur les méthodes de recherche de fragments, si la percolation ou la recherche de fragments via un critère de densité sont satisfaisantes, celles-ci restent des approches géométriques, des idées ont été amenées dans l'annexe D.

En définitive, le modèle constitue une approche solide et fonctionnelle pour la description des collisions d'ions lourds aux énergies intermédiaires. Des opportunités se présentent autour de l'ajout des fluctuations. Et ces travaux peuvent être étendus à d'autres déclinaisons du modèle comme la description de la matière infinie ou la croûte des étoiles à neutrons.

Explications sur le code "STATIQUE"

Cette partie s'inscrit dans la démarche d'éclaircir les différentes méthodes utilisées pour mettre en œuvre le formalisme choisi dans la description des noyaux dans leur état fondamental. Cette description s'appuie sur les équations explicitées dans le Chapitre 2.

A.1 Introduction

Le problème général que l'on cherche à résoudre est l'équation de Hartree-Fock. Ce problème est auto-cohérent car les solutions de l'équation sont aussi constituantes de l'équation. Ce genre de problème se résout très fréquemment avec une méthode itérative. Nous utiliserons donc ce genre de méthode.

La méthode itérative implique deux conditions. La première c'est la condition initiale, il nous faut une solution "test" pour amorcer la boucle itérative. La deuxième c'est la convergence. En effet, la boucle doit être interrompue par un critère qui conditionne la convergence. Ce critère peut prendre plusieurs formes : un nombre d'itération maximale, un seuil sur une observable qui varie de moins en moins, etc.

A.2 Description du code

A.2.1 Calcul des niveaux accessibles

La première étape du programme consiste à déterminer le nombre de niveau, dans le contexte du modèle en couche, à remplir avec des nucléons. Pour cela on se base sur cette formule :

$$G_N = g_N \frac{(N+1)(N+2)}{2} \quad (\text{A.1})$$

Pour un niveau N donné, on a G_N neutrons ou protons. Le facteur de dégénérescence $g_N = 2$ correspond aux deux états de spin accessibles pour un type de fermion. Ce qui donne le remplissage suivant :

N	0	1	2	3	4	5	6	7
G_N	2	6	12	20	30	42	56	72
$\Sigma^N G_N$	2	8	20	40	70	112	168	240

Ainsi, pour des noyaux qui contiennent $\Sigma^N G_N$ d'un type de nucléon (proton ou neutron), la couche N est remplie pour ce type de nucléon.

Algorithmique : Pour chaque type de nucléon, on utilise une boucle **Tant que** sur le nombre de nucléons en remplissant les couches N de la plus petite à la plus grande. Le dernier nucléon placé indique la couche maximale

A.2.2 Condition initiale du processus itératif

Comme condition initiale, on prend un potentiel nucléaire de type Woods-Saxon assez réputée en physique nucléaire (Chapitre 2 - [RS80]).

$$V^{W.S.}(r) = -V_0 \left[1 + \exp\left(\frac{r - R_0}{a}\right) \right]^{-1} \quad (\text{A.2})$$

avec :

$$V_0 = 53 [MeV]; \quad a = 0.66 [fm]; \quad R_0 = r_0 A^{\frac{1}{3}}; \quad r_0 = 1.3 [fm] \quad (\text{A.3})$$

Le potentiel s'adapte à la masse du noyau afin de correspondre au mieux à sa description. Ceci ne constitue que la partie "nucléaire", il faut ajouter à cela un potentiel coulombien aux protons. On prendra l'approximation d'un potentiel coulombien avec une sphère chargée de rayon R_0 avec Z protons.

$$V^{CB}(r) = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \begin{cases} \frac{1}{R_0} \left[\frac{3}{2} - \frac{1}{2} \left(\frac{|r|}{R_0} \right)^2 \right] & |r| < R_0 \\ \frac{1}{|r|} & |r| > R_0 \end{cases}$$

A.2.3 Processus itératif

La condition initiale posée, la suite du traitement est la même pour la première itération ou les suivantes. La première étape consiste à calculer les fonctions d'onde :

Ajustement du potentiel

Pour utiliser des fonctions d'onde analytique, on utilisera l'approximation harmonique. C'est-à-dire que notre potentiel nucléaire sera approximé par un oscillateur harmonique. Les fonctions d'onde étant exactes, on pourra les calculer analytiquement.

Numérique : On lissera le fond du puits de potentiel sur la valeur minimale, afin d'assurer l'ajustement par une parabole (l'oscillateur harmonique). En effet, l'ajustement utilisé ([Lib71]) peut présenter des erreurs si le puits de potentiel présente des grosses aspérités ou oscillations.

De plus, on contraint l'ajustement à 80% de la hauteur du puits, car si le potentiel réel tend vers zéro à ses extrémités, ce n'est pas le cas d'une parabole.

Si l'on nomme ω_0 la courbure après ajustement, on a alors :

$$V_{harmo}(r) = V_{nuc}(0) + \Omega r^2 = V_{nuc}(0) + \frac{1}{2} m \omega^2 r^2 \quad (\text{A.4})$$

Avec V_{nuc} qui peut être le potentiel type Woods-Saxon $V^{W.S.}$ à la première itération, ou le potentiel calculé à partir de la densité à partir des itérations suivantes. Le potentiel

A.2. Description du code

est symétrique, donc on prend la valeur centrale du potentiel nucléaire comme "fond" du puits de potentiel approché. (Voir figure A.1)

Dans le cadre du modèle de l'oscillateur harmonique, nos niveaux sont discrets et prennent

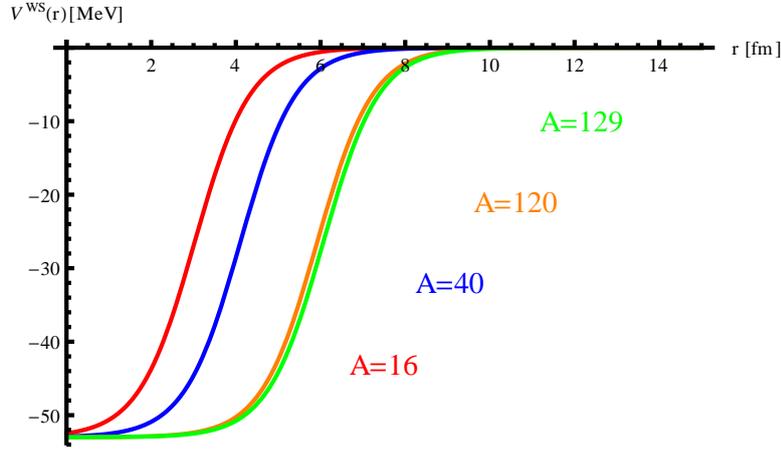


FIGURE A.1 – Allures d'un potentiel type Woods-Saxon pour différentes masses (16,40,120,129).

pour valeurs d'énergie :

$$E_N = \left(N + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega + V_{min} \quad (\text{A.5})$$

Avec V_{min} la valeur minimale du potentiel nucléaire.

En effet, le puits peut présenter des variations pour les valeurs les plus basses. De fait, la valeur minimale du puits n'est pas nécessairement la valeur centrale. Mais pour les énergies des niveaux de l'oscillateur harmonique, on prendra les valeurs les plus basses possibles, donc la valeur minimale du potentiel.

On définira les énergies de Fermi pour chaque type de nucléon, en prenant le N_{max} calculé grâce à la méthode explicitée précédemment et on a :

$$E_{Fermi} = E_{N_{max}} = \left(N_{max} + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega + V_{min} \quad (\text{A.6})$$

L'énergie de Fermi constituera le critère de convergence du programme. En effet, on considérera que le noyau est "stable" quand la variation totale -d'une itération à la suivante- des énergies de Fermi pour les protons et neutrons est très faible.

Calcul des fonctions d'onde

Dans cette partie, nous allons calculer les fonctions d'onde d'un oscillateur harmonique quantique, en prenant en compte la "dilatation" ou la "courbure" du potentiel. Cette courbure β est directement reliée à la pulsation de l'oscillateur ω .

$$\beta = \left(\frac{2\Omega m}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{4}} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \quad (\text{A.7})$$

Dans le cadre d'un oscillateur harmonique quantique, l'hamiltonien (à une dimension) du problème prend cette forme :

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \quad (\text{A.8})$$

Et la forme générale que prennent les fonctions d'onde de l'oscillateur harmonique quantique :

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{m\omega}{\pi \hbar} \right)^{\frac{1}{4}} H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right) \quad (\text{A.9})$$

Et en introduisant la courbure β , cela donne :

$$\psi_n(x) = \left(\frac{\beta^2}{\pi} \right)^{\frac{1}{4}} \frac{e^{\left(-\beta^2 \frac{x^2}{2}\right)}}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\beta x) \quad (\text{A.10})$$

Figure pour illustrer les fonctions d'onde

Avec $H_n(x)$ les polynômes d'Hermite d'ordre n en forme "dite physique" :

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2} \quad (\text{A.11})$$

On ne calcule que les fonctions d'onde en position. La projection et la dépendance en impulsion sera générée par une transformée de Wigner qu'on détaillera plus loin.

Décomposition des fonctions d'onde

Cette partie a pour but de découper les fonctions d'onde calculées précédemment avec les états cohérents. On va extraire pour chaque fonction de niveau n , des informations nécessaires pour la décomposition en états cohérents.

Première chose, si l'on considère la valeur absolue des fonctions d'ondes, celles-ci sont symétriques¹. Donc on limite notre décomposition qu'à un coté du domaine la fonction. Plus précisément, on ne s'intéresse qu'au premier maximum de la fonction. Il s'agit du lobe "semi-classique". La superposition de fonctions d'onde détruit les lobes centraux, donc il n'est pas nécessaire de les décrire avec les états cohérents ([JOU96]).

Pour $n = 0$

La fonction d'onde pour $n = 0$ correspond au niveau fondamental (le niveau le plus bas). La fonction d'onde se résume à une gaussienne. Donc on sait que la fonction est positionnée en zéro donc $X_0 = 0$. Pour ajuster la largeur, on prend la largeur à mi-hauteur et on en déduit la largeur χ_0 de la gaussienne.

Numérique : Nous avons procédé à une manipulation sur le fondamental. En effet, pour la description complète, il suffirait d'un seul état-cohérent (gaussienne) pour décrire le niveau fondamental (une gaussienne pour décrire une gaussienne). Cependant, pour augmenter le nombre d'états-cohérents global du noyau qu'on cherche à décrire, on va en fait

1. Les fonctions sont paires pour n pair et impaires pour n impair.

utiliser deux gaussiennes pour décrire le fondamental. On utilise deux gaussiennes symétriques équivalentes dont la somme décrit exactement la fonction d'onde pour $n = 0$.

Pour $n > 0$

Pour trouver la position, qu'on nomme X_0 , du premier lobe, on fait une recherche de premier maximum. Donc, il existera une position X_0 pour chaque fonction d'onde nécessaire.

Ensuite, on cherche à estimer la "largeur" de ce lobe. Dans le domaine des x négatifs, le premier lobe a un profil gaussien pour les x décroissants². Cependant, on ajuste ce lobe par une gaussienne, on va donc procéder à un ajustement en utilisant la "largeur à mi-hauteur" vers le profil gaussien du lobe (donc vers les x décroissants). De part le profil asymétrique des lobes, on tronquera la largeur χ_0 de la gaussienne, extraite par la "largeur à mi-hauteur", d'un facteur 0.45^3 . A nouveau, on aura une largeur χ_0 pour chaque fonction d'onde nécessaire.

Pour décrire l'espace des phases et chaque fonction d'onde (projetée dans l'espace des phases avec une transformée de Wigner), on attribuera un nombre fini d'état cohérent par fonction d'onde.

Remplissage de l'espace des phases

Cette partie consiste à décrire comment on place les états cohérents dans l'espace des phases. On tente de remplir au mieux l'espace des phases, c'est à dire à avoir le moins de trous, pour éviter au maximum la superposition de fonctions d'onde afin de satisfaire le principe d'exclusion de Pauli.

Parcours des niveaux

Pour placer les états cohérents, on va parcourir les N niveaux disponibles. Avec l'approche type oscillateur harmonique quantique à 3-dimensions, on va parcourir toutes les combinaisons possibles telles que :

$$N = n_x + n_y + n_z \quad (\text{A.12})$$

A chaque sous-niveau n_q sera associé la fonction d'onde à une dimension correspondante q au niveau n . De fait, pour un niveau N , on aura un ensemble de combinaisons n_x, n_y, n_z , dont chaque combinaison représentera un ensemble d'états cohérents. En effet, chaque sous-niveau n_q est une fonction d'onde qui nécessite plusieurs états cohérents. Afin de calculer le nombre d'état cohérent nécessaire, il suffit de faire la somme (sur toutes les combinaisons accessibles) du produit du nombre d'état cohérent du sous niveau n_q des 3 dimensions.

Le parcours des combinaisons possibles n'est pas anodin. En effet, si une couche (un niveau) n'est pas rempli, le nombre de nucléons sur cette couche ne permettra pas de parcourir toutes les combinaisons de nombre quantique n_q . Au cours de notre parcours, on prendra soin de vérifier à chaque combinaison s'il reste des "nucléons" à placer. Car si l'on ne place pas directement les nucléons, on place des états cohérent, dont la somme des

2. Inversement, il a un profil gaussien vers les x croissants pour le domaine des $x > 0$.

3. Seuil fixé après tests sur une correspondance entre résultats de STAWAN et expérimentaux sur plusieurs noyaux, seuil sujet à modification.

poinds statistiques ω_i est égale à la masse du noyau. Donc, pendant le parcours des combinaisons, on vérifiera à chaque combinaison qu'on ne dépasse pas la masse du noyau que l'on cherche à former.

De fait, sur une couche non-remplie, on va utiliser des combinaisons et pas d'autres, ce qui crée inévitablement une anisotropie entre les dimensions. Par conséquent, on peut parcourir les combinaisons de plusieurs méthodes. Actuellement, on peut utiliser deux méthodes différentes : la méthode procédurale et la méthode de proximité.

Disposition des états cohérents

Une combinaison n_x, n_y, n_z va donc déterminer un "niveau". Pour ce niveau, on va donc parcourir le nombre d'états-cohérents nécessaires dans chaque dimensions x, y et z . Ce qui, mathématiquement, donnera le produit du nombre d'états-cohérents dans chaque dimension comme nombre total d'états-cohérents pour cette combinaison.

Un état cohérent est placé dans l'espace des phase directement. Pour cela, pour une dimension cartésienne donnée, on découpe l'espace des phases en fonction du nombre d'états cohérents. C'est à dire qu'on va placer périodiquement sur l'angle de révolution (2π) en fonction du nombre d'états à placer. A un angle donné α , la position x et l'impulsion k sont données par :

$$x = X_0 \cos(\alpha) \quad (\text{A.13})$$

$$k = Y_0 \sin(\alpha) \quad (\text{A.14})$$

La trajectoire formée par le placement des états cohérents dans le cas d'un oscillateur harmonique est une ellipse, avec comme demi-grand axe X_0 , qui est donné par la position de la première (et dernière) oscillation des fonctions d'onde à un N donné. Concernant le demi-petit axe, il s'agit de Y_0 qui est donné par la transformée de Wigner des fonctions d'ondes :

$$Y_0^{(n)} = X_0^{(n)} \beta^2 \quad (\text{A.15})$$

Il est important de préciser que les états cohérents ne sont pas placés à même l'ellipse. En effet, ils sont bel et bien sur l'ellipse mais sont en fait placés dans un espace adimensionnel. Car les positions indiquées précédemment ne décrivent pas le placement d'un objet sur une ellipse à un angle α donné. Donc, nos positions sont plutôt :

$$\bar{x} = \beta x = \beta X_0 \cos(\alpha) = \sqrt{X_0 Y_0} \cos(\alpha) \quad (\text{A.16})$$

$$\bar{k} = \frac{k}{\beta} = \frac{Y_0}{\beta} \sin(\alpha) = \sqrt{X_0 Y_0} \sin(\alpha) \quad (\text{A.17})$$

$$(\text{A.18})$$

Ce système d'équation décrit le placement d'un objet sur un cercle. En effet, dans cet espace des phases adimensionnel, l'ellipse est un cercle de rayon $\sqrt{X_0 Y_0}$. Ce placement est nécessaire pour la conservation de l'énergie du système dans le cadre d'un oscillateur harmonique. De plus, le placement dans l'espace des phases sans dimension simplifie le calcul quant à la disposition de l'état. En effet, quand l'état est placé, c'est à dire quand son centroïde est placé (vu que l'état cohérent est une gaussienne), il reste à disposer ses

A.2. Description du code

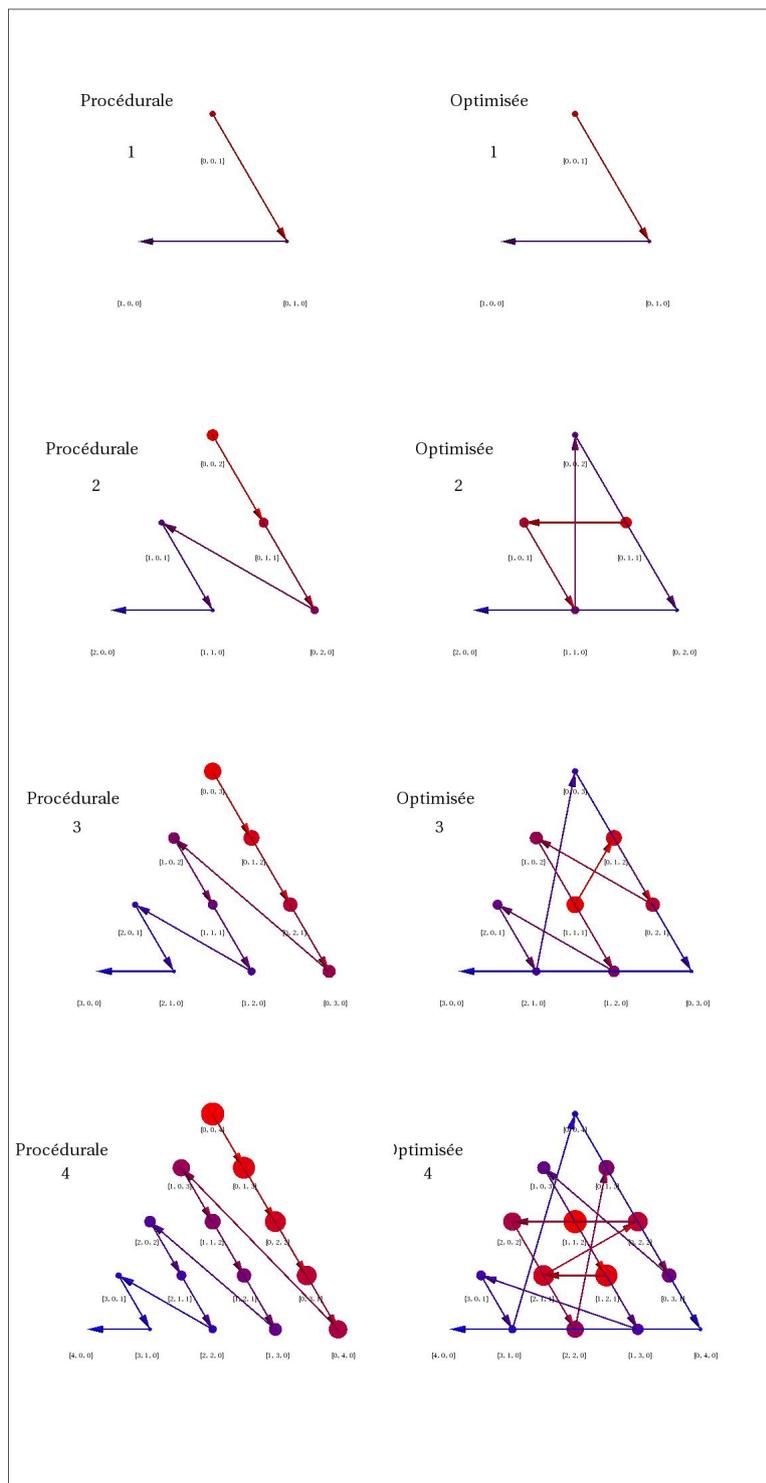


FIGURE A.2 – Parcours des combinaisons (n_x, n_y, n_z) par niveau N de 1 à 4. A gauche pour la méthode procédurale, à droite la méthode optimisée (de proximité). L'ordre va du plus rouge (ou point le plus gros) au plus bleu (point le plus petit).

extensions (en position et impulsion).

Dans le formalisme des états-cohérents, celui ci peut être corrélé ou dé-corrélé. Tout dépend du produit de ses extensions. On introduira σ qui quantifiera la corrélation :

$$\chi\phi - \sigma^2 = \frac{1}{4} \quad (\text{A.19})$$

Avec χ et ϕ les extensions en position et impulsion respectivement. Le facteur $\frac{1}{4}$ provient de la relation d'incertitude d'Heisenberg. Les états cohérents sont des états quantique qui minimisent la relation d'incertitude. Pour un état dé-corrélé, $\sigma = 0$, on a donc :

$$\chi\phi = \frac{1}{4} \quad (\text{A.20})$$

$$\phi = \frac{1}{4\chi} \quad (\text{A.21})$$

Dans l'espace des phases, il existe 4 positions pour un état cohérent dé-corrélé $x = \pm X_0$ et $k = \pm Y_0$. Cependant, seul un état cohérent placé en $x = \pm X_0$ se verra attribué comme extension χ , la "largeur" obtenue sur les fonctions d'ondes $\chi_0^{(N)}$, car la fonction d'onde en x correspond à une projection de l'espace des phases pour $k = 0$. Pour les autres positions, que l'état cohérent soit dé-corrélé en $k = \pm Y_0$ ou corrélé à n'importe quelle autre position, on aura pour extension en position et impulsion :

$$\chi = \chi_0^{(N)} \cos^2(\alpha) + \frac{\phi_0^{(N)}}{\beta^4} \sin^2(\alpha) \quad (\text{A.22})$$

$$\phi = \phi_0^{(N)} \cos^2(\alpha) + \chi_0^{(N)} \beta^4 \sin^2(\alpha) \quad (\text{A.23})$$

$$\text{avec } \phi_0^{(N)} = \frac{1}{4\chi_0^{(N)}} \quad (\text{A.24})$$

Calcul du potentiel nucléaire

Dans la partie précédente, on a vu comment remplir l'espace des phases. Une fois cette étape effectuée, on dispose d'un ensemble d'état cohérent. La fonction de distribution de notre système est la somme des fonctions de distribution de chaque état cohérent (qui est aussi la transformé de Wigner d'un état cohérent) :

$$f(x, k) = \sum_i f^{(i)}(x, k) \quad (\text{A.25})$$

$$= \sum_i \frac{\omega_i}{2\pi\sqrt{\Delta}} \exp \left[-\frac{1}{2\Delta} (\phi_i(x - x_i)^2 + \chi_i(k - k_i)^2 - 2\sigma_i(x - x_i)(k - k_i)) \right] \quad (\text{A.26})$$

Avec $\Delta = \phi\chi - \sigma^2 = \frac{1}{4}$.

A.2. Description du code

Pour obtenir l'expression de la densité dans un espace (des configurations ou des vecteurs d'ondes), il suffit d'intégrer sur l'autre espace :

$$\rho(x) = \int f(x, k) dk = \sum_i \omega_i \frac{e^{-\frac{(x-x_i)^2}{2\chi_i}}}{\sqrt{2\pi\chi_i}} \quad (\text{A.27})$$

$$\rho(k) = \int f(x, k) dx = \sum_i \omega_i \frac{e^{-\frac{(k-k_i)^2}{2\phi_i}}}{\sqrt{2\pi\phi_i}} \quad (\text{A.28})$$

On peut généraliser l'expression à 3-dimensions :

$$\rho(x, y, z) = \sum_i \omega_i \frac{e^{-\frac{(x-x_i)^2}{2\chi_{x,i}}}}{\sqrt{2\pi\chi_{x,i}}} \frac{e^{-\frac{(y-y_i)^2}{2\chi_{y,i}}}}{\sqrt{2\pi\chi_{y,i}}} \frac{e^{-\frac{(z-z_i)^2}{2\chi_{z,i}}}}{\sqrt{2\pi\chi_{z,i}}} \quad (\text{A.29})$$

Le potentiel, de type Skyrme, que l'on utilise s'exprime en fonction de la densité isoscalaire $\rho = \rho_n + \rho_p$ (soit la densité totale) et de la densité isovectorielle $\xi = \rho_n - \rho_p$ (ou asymétrie en densité). Avec ρ_n la densité de neutron et ρ_p la densité de proton.

$$U^{(p,n)} = \frac{3}{4}t_0\rho + \frac{(\sigma+2)}{16}t_3\rho^{\sigma+1} \quad \text{termes principaux} \quad (\text{A.B})$$

$$- \frac{\sigma t_3}{24} \left(x_3 + \frac{1}{2} \right) \rho^{\sigma-1} \xi^2 \quad \text{termes asymétrie en isospin} \quad (\text{C})$$

$$- \tau_{(p,n)} \frac{t_3}{12} \left(x_3 + \frac{1}{2} \right) \rho^\sigma \xi - \tau_{(p,n)} \frac{1}{2} t_0 \left(x_0 + \frac{1}{2} \right) \xi \quad (\text{D.E})$$

$$- \frac{1}{8} \left[\frac{9}{4}t_1 - t_2 \left(x_2 + \frac{5}{4} \right) \right] \Delta\rho \quad \text{termes de surface} \quad (\text{F})$$

$$+ \tau_{(p,n)} \frac{1}{16} \left[3t_1 \left(x_1 + \frac{1}{2} \right) + t_2 \left(x_2 + \frac{1}{2} \right) \right] \Delta\xi \quad (\text{G})$$

Les paramètres à ajuster de la force sont : $t_0, t_1, t_2, t_3, x_0, x_1, x_2, x_3$ et σ . On remarquera aussi la dépendance en isospin du potentiel, proton ou neutron : (p, n) . On utilisera un facteur d'isospin $\tau_{(p,n)}$:

$$\begin{aligned} \tau_n &= \frac{\partial \xi}{\partial \rho_n} = +1 && \text{neutrons} \\ \tau_p &= \frac{\partial \xi}{\partial \rho_p} = -1 && \text{protons} \end{aligned} \quad (\text{A.30})$$

Dans le cadre du code, on utilise un potentiel à une dimension vu qu'on utilise ajustement harmonique à une dimension. Pour ρ on reprendra l'expression vu précédemment,

valable pour les protons ou les neutrons. Telle que :

$$\rho = \rho(x, 0, 0) = \sum_i \omega_i \frac{e^{-\frac{(x-x_i)^2}{2\chi_{x,i}}} e^{-\frac{y_i^2}{2\chi_{y,i}}} e^{-\frac{z_i^2}{2\chi_{z,i}}}}{\sqrt{2\pi\chi_{x,i}} \sqrt{2\pi\chi_{y,i}} \sqrt{2\pi\chi_{z,i}}} \quad (\text{A.31})$$

et

$$\Delta\rho = \Delta\rho(x, 0, 0) = \frac{\partial\rho(x, 0, 0)^2}{\partial x^2} + \frac{\partial\rho(x, 0, 0)^2}{\partial y^2} + \frac{\partial\rho(x, 0, 0)^2}{\partial z^2} \quad (\text{A.32})$$

$$\begin{aligned} &= \sum_i \omega_i \left[\frac{1}{\chi_{x,i}} \left(\frac{x_i^2}{\chi_{x,i}} - 1 \right) + \frac{1}{\chi_{y,i}} \left(\frac{y_i^2}{\chi_{y,i}} - 1 \right) \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{\chi_{z,i}} \left(\frac{z_i^2}{\chi_{z,i}} - 1 \right) \right] \frac{e^{-\frac{(x-x_i)^2}{2\chi_{x,i}}} e^{-\frac{y_i^2}{2\chi_{y,i}}} e^{-\frac{z_i^2}{2\chi_{z,i}}}}{\sqrt{2\pi\chi_{x,i}} \sqrt{2\pi\chi_{y,i}} \sqrt{2\pi\chi_{z,i}}} \end{aligned} \quad (\text{A.33})$$

Calcul du potentiel coulombien

Pour calculer le potentiel coulombien de façon classique mais la plus exacte possible, on part d'une formule assez générale :

$$V_{cb}(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \iiint \frac{\rho_p(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3\mathbf{r}' \quad (\text{A.34})$$

On retrouve l'expression de la densité de protons :

$$\rho_p(x, y, z) = \sum_{i \in CS(Z)} \omega_i \frac{e^{-\frac{(x-x_i)^2}{2\chi_{x,i}}} e^{-\frac{(y-y_i)^2}{2\chi_{y,i}}} e^{-\frac{(z-z_i)^2}{2\chi_{z,i}}}}{\sqrt{2\pi\chi_{x,i}} \sqrt{2\pi\chi_{y,i}} \sqrt{2\pi\chi_{z,i}}} \quad (\text{A.35})$$

Avec $CS(Z)$ l'ensemble des états cohérents correspondant aux protons. On peut calculer ce potentiel en utilisant la méthode des rectangles : $\int f(x)dx = \sum_i f(x_i)\Delta x$, mais à 3-dimensions, cela peut représenter un temps de calcul énorme. Du coup, on fera une approximation en introduisant : $\bar{\chi} = \sqrt[3]{\chi_x\chi_y\chi_z}$, après simplifications, le potentiel coulombien devient :

$$V_{cb}(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i \in CS(Z)} \omega_i \frac{\text{Erf} \left(\frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|}{\sqrt{2\bar{\chi}_i}} \right)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|} \quad (\text{A.36})$$

Comme indiqué précédemment, on ajuste les potentiels à une dimension, le potentiel coulombien devient alors :

$$V_{cb} = V_{cb}(x, 0, 0) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i \in CS(Z)} \omega_i \frac{\text{Erf} \left(\frac{\sqrt{(x-x_i)^2 + y_i^2 + z_i^2}}{\sqrt{2\bar{\chi}_i}} \right)}{\sqrt{(x-x_i)^2 + y_i^2 + z_i^2}} \quad (\text{A.37})$$

On somme nos potentiels respectivement :

$$\begin{aligned} V_{neutrons} &= U^{(n)} \\ V_{protons} &= U^{(p)} + V_{cb} \end{aligned} \quad (\text{A.38})$$

Une fois les potentiels calculés, on procède à l'ajustement harmonique, et le processus itératif reprend.

A.2.4 Convergence du code

Le critère de convergence du code est fixé par apport à la variation des énergies de Fermi des protons et neutrons d'une itération précédente à celle en cours.

$$\text{conv}_i = \left| E_F^{\text{neutrons}}(i) - E_F^{\text{neutrons}}(i-1) \right| + \left| E_F^{\text{protons}}(i) - E_F^{\text{protons}}(i-1) \right| \quad (\text{A.39})$$

Et on compare cette variation à un seuil, fixé à 0.5 MeV dans le code, il faut que la variation soit inférieure à ce seuil.

A.2.5 Calcul des observables

Une fois la convergence atteinte, on peut calculer des observables. Celles-ci sont calculées à la fin car non-nécessaire au processus itératif et sont, pour la plupart, plus lourdes en temps de calcul.

Calcul du rayon

Pour estimer le rayon du noyau modélisé, on peut procéder au rayon carré moyen :

$$\text{RMS}_{\vec{r}} = \sqrt{\frac{\langle r^2 \rangle}{A}} \quad (\text{A.40})$$

$$= \sqrt{\frac{\langle x^2 \rangle + \langle y^2 \rangle + \langle z^2 \rangle}{\sum_i \omega_i}} \quad (\text{A.41})$$

$$= \sqrt{\frac{\sum_i \omega_i (x_i^2 + y_i^2 + z_i^2 + \chi_{x,i} + \chi_{y,i} + \chi_{z,i})}{\sum_i \omega_i}} \quad (\text{A.42})$$

$$(\text{A.43})$$

De la même façon, on peut estimer le rayon de la sphère de Fermi.

$$\text{RMS}_{\vec{k}} = \sqrt{\frac{\sum_i \omega_i (kx_i^2 + ky_i^2 + kz_i^2 + \phi_{x,i} + \phi_{y,i} + \phi_{z,i})}{\sum_i \omega_i}} \quad (\text{A.44})$$

Calcul de l'énergie cinétique

L'énergie cinétique totale s'exprime ainsi :

$$E_{cin} = \frac{\hbar^2 \langle k^2 \rangle}{2m} \quad (A.45)$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \omega_i (kx_i^2 + ky_i^2 + kz_i^2 + \phi_{x,i} + \phi_{y,i} + \phi_{z,i}) \quad (A.46)$$

On peut de la même façon, calculer l'énergie cinétique dans chaque dimension de façon analogue.

Calcul de l'énergie potentielle

L'énergie potentielle totale peut être définie comme l'intégrale sur tout le système de la densité d'énergie potentielle.

$$E_{pot} = \int H_{pot}(\mathbf{r}) d^3r = \sum_{x,y,z} H_{pot}(x, y, z) \Delta x \Delta y \Delta z \quad (A.47)$$

$$H_{pot} = H_0 + H_3 + H_{surf} \quad (A.48)$$

avec :

$$\begin{aligned} H_0 &= \frac{3}{8} t_0 \rho^2 - \frac{1}{2} \left[\frac{1}{2} t_0 \left(x_0 + \frac{1}{2} \right) \right] \xi^2 \\ H_3 &= \frac{1}{16} t_3 \rho^{\sigma+2} - \frac{1}{2} \left[\frac{1}{12} t_3 \left(x_3 + \frac{1}{2} \right) \right] \rho^\sigma \xi^2 \\ H_{surf} &= \frac{1}{16} \left[\frac{9}{4} t_1 - t_2 \left(x_2 + \frac{5}{4} \right) \right] (\nabla \rho)^2 - \frac{1}{32} \left[3t_1 \left(x_1 + \frac{1}{2} \right) + t_2 \left(x_2 + \frac{1}{2} \right) \right] (\nabla \xi)^2 \end{aligned} \quad (A.49)$$

Les densités totales sont définies comme précédemment.

Calcul de l'énergie coulombienne

Pour calculer l'énergie coulombienne, on va intégrer le potentiel sur tout l'espace :

$$E_{cb} = \frac{1}{2} \iiint \rho_p(\mathbf{r}) V_{cb}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \quad (A.50)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_i \sum_j \omega_i \omega_j \iiint \frac{e^{-\frac{(\mathbf{r}-\mathbf{r}_j)^2}{2\bar{\chi}_j}}}{(2\pi\bar{\chi}_j)^{\frac{3}{2}}} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{\text{Erf} \left(\frac{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_i|}{\sqrt{2\bar{\chi}_i}} \right)}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_i|} d^3\mathbf{r} \quad (A.51)$$

Après simplifications, on a :

$$E_{cb} = \frac{1}{2} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i,j} \frac{\omega_i \omega_j}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| \sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} du e^{-u^2} \text{Erf} \left(\sqrt{\frac{\bar{\chi}_i}{\bar{\chi}_j}} u + \frac{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}{\sqrt{2\bar{\chi}_i}} \right) \quad (A.52)$$

Calcul de l'énergie totale

L'énergie totale correspond à la somme des différentes contributions décrites précédemment.

$$E_{totale} = E_{cintique} + E_{potentielle} + E_{Coulombienne} \quad (\text{A.53})$$

Une fois rapportée au nombre de nucléons, on obtient l'énergie de liaison :

$$E/A = \frac{E_{totale}}{A} \quad (\text{A.54})$$

Explications sur le code "DYNAMIQUE"

Cette deuxième partie a pour but de décrire comment le programme chargé de la propagation des états cohérents fonctionne. Cette description s'appuie aussi sur le chapitre 3.

B.1 Introduction

Cette fois-ci on cherche à résoudre l'équation de Hartree-Fock mais dépendante du temps. Comme nos objets d'études sont les états-cohérents, au lieu de résoudre l'équation de Hartree-Fock à chaque pas de temps, nous allons déterminer les équations d'évolution des grandeurs qui caractérisent les états cohérents.

L'évolution des états cohérents se fait en deux "temps". En effet, pour chaque pas de temps, les états cohérents subiront deux traitements distincts. Le premier correspond à l'évolution en champ moyen pur, il s'agit d'appliquer les équations d'évolution pour chaque pas de temps. Le deuxième processus correspond aux effets dissipatifs du champ-moyen : le terme de collision. Ce traitement simule des effets au delà du champ-moyen avec des collisions élastiques entre états-cohérents.

B.2 Condition initiale

Pour amorcer la dynamique, on va utiliser les noyaux tels qu'ils ont été préparés dans la partie "statique". Mais on pourrait placer ces noyaux comme bon nous semble en fonction de ce que nous voulons faire, on va détailler deux cas parmi les trois possibles.

B.2.1 Prolongation

Dans un premier cas, on peut souhaiter simplement observer l'évolution d'un noyau, à l'état fondamental en fonction du temps. Ce procédé peut avoir pour but d'observer la stabilité de la condition initiale mais aussi la stabilité des équations dynamiques. Et pour tester cette stabilité, des observables comme l'énergie de liaison, sensée se conserver et être constante, sont intéressantes à étudier. Pour se faire, il suffit de placer le noyau à étudier au centre de la boîte et "mettre en route" la dynamique. Le terme de collision peut être activé ou non, pour différentes études. Bien que théoriquement, les collisions intra-noyau sont bloquées par le principe de Pauli.

B.2.2 Structure cristalline

Dans le cadre de l'étude de la matière nucléaire au sein des étoiles à neutrons [FIG10], le code peut être employé pour étudier de la matière à haute densité. C'est-à-dire que les noyaux sont bien plus proches les uns des autres que dans de la matière ordinaire. Pour tester les différentes possibilités de structures des noyaux, on les placera sur des réseaux cristallins périodiques (dont la périodicité donne une propriété d'infini et de continuité à cette matière nucléaire) de différents motifs.

B.2.3 En collision

Toutes les collisions qui sont simulées dans le programme sont dans le centre de masse de la collision. Cela implique qu'on doit prendre en compte l'énergie de bombardement de la collision E_{inc} pour leur attribuer une impulsion initiale. On doit aussi prendre en compte le paramètre d'impact b , ce qui affectera la position initiale du noyau. Et enfin, on fixe aussi une distance initiale relative R entre les noyaux (environ 30 [fm]). Le paramètre d'impact b et la distance relative R constitueront le placement dans l'espace des positions, alors que l'énergie de collision E_{inc} constituera le placement dans l'espace des impulsions.

Pour les noyaux (1) et (2), de masse A_1 et A_2 et de charge Z_1 et Z_2 . Dans le plan de réaction (Z, X) dans l'espace des positions. On va faire une transition des noyaux.

$$\begin{aligned}
 Z(1) &= Z(1) + Z_R \frac{A_2}{A_1 + A_2} \quad \text{et} \quad Z(2) = Z(2) - Z_R \frac{A_1}{A_1 + A_2} \\
 X(1) &= X(1) + X_R \frac{A_2}{A_1 + A_2} \quad \text{et} \quad X(2) = X(2) - X_R \frac{A_1}{A_1 + A_2} \\
 &\text{tels que :} \\
 &Z_R = R \cos\theta \quad \text{et} \quad X_R = R \sin\theta \\
 \text{et} \quad \theta &= \text{ArcCos} \left(\frac{1}{d_N} \left(1 - \frac{2 \frac{A_1 A_2}{A_1 + A_2} E_{inc} b^2}{\alpha_C R} \right) \right) - \text{ArcCos} \left(\frac{1}{d_N} \right) \\
 \text{où} \quad d_N &= \sqrt{1 + \left(2b \frac{A_1 A_2}{A_1 + A_2} \frac{E_{inc}}{\alpha_C} \right)^2} \quad \text{et} \quad \alpha_C = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} Z_1 Z_2 \quad (\text{B.1})
 \end{aligned}$$

En ce qui concerne les sphères de Fermi (distribution des noyaux dans l'espaces des impulsions), on effectue aussi une transition de la sphère :

$$\begin{aligned}
 ZK(1) &= ZK(1) + ZK_R \frac{A_2}{A_1 + A_2} \quad \text{et} \quad ZK(2) = ZK(2) - ZK_R \frac{A_1}{A_1 + A_2} \\
 XK(1) &= XK(1) + XK_R \frac{A_2}{A_1 + A_2} \quad \text{et} \quad XK(2) = XK(2) - XK_R \frac{A_1}{A_1 + A_2} \\
 &\text{tels que :} \\
 ZK_R &= \frac{(mc^2)}{3(\hbar c)} (r_P \cos\theta - t_P R \sin\theta) \quad \text{et} \quad XK_R = \frac{(mc^2)}{3(\hbar c)} (r_P \cos\theta + t_P R \sin\theta) \\
 \text{et} \quad t_P &= \sqrt{\frac{2E_{inc}}{\left(\frac{m}{9}\right)} \frac{b}{R^2}} \quad \text{et} \quad r_P = \sqrt{\frac{2}{\frac{A_1 A_2}{A_1 + A_2} \left(\frac{m}{9}\right)} \left(\frac{A_1 A_2}{A_1 + A_2} E_{inc} + \frac{\alpha_C}{R} \right) - \frac{2E_{inc} b^2}{\left(\frac{m}{9}\right) R^2}}
 \end{aligned}$$

B.3 Évolution temporelle

L'évolution temporelle se fait en deux temps. D'abord, on fait l'évolution pas-à-pas des états-cohérents. Ensuite, une fois les coordonnées fixées, on réalise les collisions (qui sont instantanées). D'abord, nous allons nous intéresser à l'évolution pas-à-pas.

B.3.1 Champ-moyen

L'évolution dynamique des états-cohérents repose sur deux points : les équations d'évolution et la méthode d'intégration. Les équations dynamiques sont obtenues à partir du principe variationnel (détaillées dans le chapitre 3). La méthode d'intégration constitue la procédure pour faire évoluer et calculer pas-de-temps par pas-de-temps les observables.

Équations d'évolutions

On rappelle que les observables qui caractérisent un état-cohérents sont : $x(t), k(t)$ (ou $p(t)$), $\chi(t), \phi(t)$ et $\sigma(t)$. Celles-ci sont, respectivement : la position, le nombre d'onde (ou impulsion), le moment d'ordre deux en position (ou largeur en position), le moment d'ordre deux en impulsion (ou largeur en impulsion) et la corrélation de l'état-cohérent. Il nous faut alors une équation pour chacune de ces observables de l'état-cohérent i (à 1-dimension) :

$$\langle \dot{x} \rangle_i = \frac{\hbar \langle k \rangle_i}{m} \quad (\text{B.2})$$

$$\langle \dot{k} \rangle_i = -\frac{1}{\hbar} \frac{\partial \langle V \rangle_i}{\partial \langle x \rangle_i} \quad (\text{B.3})$$

$$\dot{\chi}_i = \frac{4\gamma_i \chi_i}{m} \quad (\text{B.4})$$

$$\dot{\gamma}_i = \frac{\hbar}{8m} \frac{1}{\chi_i^2} - \frac{2\hbar}{m} \gamma_i^2 - \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \langle V \rangle_i}{\partial \chi_i} \quad (\text{B.5})$$

Avec $\gamma = \sigma/2\chi$. Ce paramètre γ sera un facteur de corrélation, tout comme σ , mais il est plus simple d'utilisation. On remarque que nous n'avons que 4 équations pour les 5 paramètres décrits précédemment. C'est simplement dû au fait que χ, ϕ et σ sont liés : $\sigma^2 = \phi\chi - 1/4$. De fait, on peut calculer ϕ :

$$\phi = \frac{1}{\chi} \left[\frac{1}{4} + \sigma^2 \right] = \frac{1}{\chi} \left[\frac{1}{4} + (2\gamma\chi)^2 \right] \quad (\text{B.6})$$

On précisera aussi que toutes les unités *d'impulsion* (p, ϕ, σ) sont exprimés en nombres d'ondes [fm^{-1}] pas en impulsion (cela modifie les constantes, notamment les \hbar).

Calcul des gradients et valeurs moyennes

Les équations d'évolution régissent l'évolution des paramètres d'un état-cohérent. Pour les équations régissant l'évolution des paramètres en position (position et largeur),

c'est une simple relation avec les autres paramètres en impulsion :

$$\begin{aligned}\langle \dot{x} \rangle_i &= \frac{\hbar \langle k \rangle_i}{m} \\ \dot{\chi}_i &= \frac{4\gamma_i \chi_i}{m}\end{aligned}\tag{B.7}$$

Pour les paramètres en impulsion (nombre d'onde et largeur), cela fait intervenir le potentiel du champ-moyen. Mais celui-ci est moyenné. La moyenne s'exprime ainsi :

$$\langle f \rangle_i = \langle \alpha_i | f | \alpha_i \rangle\tag{B.8}$$

$$= \iiint \alpha_i(x) \alpha_i^*(x) \alpha_i(y) \alpha_i^*(y) \alpha_i(z) \alpha_i^*(z) f(x, y, z) dx dy dz\tag{B.9}$$

$$= \iiint g_{\chi_{x,i}}(x - \langle x \rangle_i) g_{\chi_{y,i}}(y - \langle y \rangle_i) g_{\chi_{z,i}}(z - \langle z \rangle_i) f(x, y, z) dx dy dz\tag{B.10}$$

La valeur moyenne d'une fonction pour un état-cohérent i est la somme des contribution de cette fonction sur l'état-cohérent dans tout l'espace. De fait, pour l'évolution des nombres d'onde, on a :

$$\begin{aligned}\frac{\partial \langle V \rangle_i}{\partial \langle x \rangle_i} &= \frac{\partial}{\partial \langle x \rangle_i} \langle \alpha_i | V | \alpha_i \rangle \\ &= \frac{\partial}{\partial \langle x \rangle_i} \iiint \alpha_i(x) \alpha_i^*(x) \alpha_i(y) \alpha_i^*(y) \alpha_i(z) \alpha_i^*(z) V(x, y, z) dx dy dz \\ &= \iiint \frac{\partial (g_{\chi_{x,i}}(x - \langle x \rangle_i))}{\partial \langle x \rangle_i} g_{\chi_{y,i}}(y - \langle y \rangle_i) g_{\chi_{z,i}}(z - \langle z \rangle_i) V(x, y, z) dx dy dz \\ &= \iiint \left(\frac{x - \langle x \rangle_i}{2\chi_{x,i}} \right) g_{\chi_{x,i}}(x - \langle x \rangle_i) g_{\chi_{y,i}}(y - \langle y \rangle_i) g_{\chi_{z,i}}(z - \langle z \rangle_i) V(x, y, z) dx dy dz\end{aligned}$$

A partir de ce moment-là, calculer l'intégrale complète devient très lourd en temps de calcul, et cela ne concerne qu'un seul état-cohérent. Nous utiliserons donc une méthode alternative pour calculer cette intégrale. Nous utilisons la quadrature de Gauss-Hermite :

$$\int e^{-x^2} f(x) dx = \sum_i^{N_{GH}} \bar{\omega}_i f(X_i)\tag{B.11}$$

B.3. Évolution temporelle

Avec un changement de variable adéquat : $X = \left(\frac{x - \langle x \rangle_i}{\sqrt{2\chi_{x,i}}} \right)$ dans chaque dimension, on a :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \langle V \rangle_i}{\partial \langle x \rangle_i} &= \iiint \left(\frac{x - \langle x \rangle_i}{2\chi_{x,i}} \right) g_{\chi_{x,i}}(x - \langle x \rangle_i) g_{\chi_{y,i}}(y - \langle y \rangle_i) g_{\chi_{z,i}}(z - \langle z \rangle_i) V(x, y, z) dx dy dz \\
&= \frac{1}{\chi_{x,i} \pi^{3/2}} \iiint \sqrt{2\chi_{x,i}} X e^{-X^2} e^{-Y^2} e^{-Z^2} \\
&\quad \times V(\sqrt{2\pi\chi_{x,i}} X + \langle x \rangle_i, \sqrt{2\pi\chi_{y,i}} Y + \langle y \rangle_i, \sqrt{2\pi\chi_{z,i}} Z + \langle z \rangle_i) dX dY dZ \\
&= \frac{1}{\chi_{x,i} \pi^{3/2}} \sum_{i,j,k}^{NGH} \bar{\omega}_i \bar{\omega}_j \bar{\omega}_k \sqrt{2\chi_{x,i}} X_i \\
&\quad \times V(\sqrt{2\pi\chi_{x,i}} X_i + \langle x \rangle_i, \sqrt{2\pi\chi_{y,i}} Y_j + \langle y \rangle_i, \sqrt{2\pi\chi_{z,i}} Z_k + \langle z \rangle_i) \quad (B.12)
\end{aligned}$$

Quelle que soit la nature de V (potentiel nucléaire ou coulombien), cette formule reste valable. Pour les autres dimensions, il suffit de l'adapter sur la dimension en question (x, y ou z).

En ce qui concerne l'évolution de la corrélation de l'état-cohérent, on a :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \langle V \rangle_i}{\partial \chi_i} &= \frac{\partial}{\partial \chi_i} \langle \alpha_i | V | \alpha_i \rangle \\
&= \frac{\partial}{\partial \chi_i} \iiint \alpha_i(x) \alpha_i^*(x) \alpha_i(y) \alpha_i^*(y) \alpha_i(z) \alpha_i^*(z) V(x, y, z) dx dy dz \\
&= \iiint \frac{\partial (g_{\chi_{x,i}}(x - \langle x \rangle_i))}{\partial \chi_i} g_{\chi_{y,i}}(y - \langle y \rangle_i) g_{\chi_{z,i}}(z - \langle z \rangle_i) V(x, y, z) dx dy dz \\
&= \frac{1}{\chi_{x,i}} \iiint \left(\frac{(x - \langle x \rangle_i)^2}{2\chi_{x,i}} - \frac{1}{2} \right) \\
&\quad \times g_{\chi_{x,i}}(x - \langle x \rangle_i) g_{\chi_{y,i}}(y - \langle y \rangle_i) g_{\chi_{z,i}}(z - \langle z \rangle_i) V(x, y, z) dx dy dz
\end{aligned}$$

On conserve le même changement de variable $X = \left(\frac{x - \langle x \rangle_i}{\sqrt{2\chi_{x,i}}} \right)$.

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \langle V \rangle_i}{\partial \chi_{x,i}} &= \frac{1}{\chi_{x,i}} \iiint \left(\frac{(x - \langle x \rangle_i)^2}{2\chi_{x,i}} - \frac{1}{2} \right) \\
&\quad \times g_{\chi_{x,i}}(x - \langle x \rangle_i) g_{\chi_{y,i}}(y - \langle y \rangle_i) g_{\chi_{z,i}}(z - \langle z \rangle_i) V(x, y, z) dx dy dz \\
&= \frac{1}{\chi_{x,i} \pi^{3/2}} \iiint \left(X^2 - \frac{1}{2} \right) e^{-X^2} e^{-Y^2} e^{-Z^2} \\
&\quad \times V(\sqrt{2\pi\chi_{x,i}} X + \langle x \rangle_i, \sqrt{2\pi\chi_{y,i}} Y + \langle y \rangle_i, \sqrt{2\pi\chi_{z,i}} Z + \langle z \rangle_i) dX dY dZ \\
&= \frac{1}{\chi_{x,i} \pi^{3/2}} \sum_{i,j,k}^{NGH} \bar{\omega}_i \bar{\omega}_j \bar{\omega}_k \left(X_i^2 - \frac{1}{2} \right) \\
&\quad \times V(\sqrt{2\pi\chi_{x,i}} X_i + \langle x \rangle_i, \sqrt{2\pi\chi_{y,i}} Y_j + \langle y \rangle_i, \sqrt{2\pi\chi_{z,i}} Z_k + \langle z \rangle_i) \quad (B.13)
\end{aligned}$$

Numérique : Il convient d'utiliser une bonne interpolation à 3 dimensions pour déterminer la valeur du potentiel sur les points de Gauss-Hermite. Si le pas du réseau est

trop grand, la quadrature de Gauss-Hermite sera peu valable. Nous utilisons une interpolation tri-linéaire cubique. De plus, nous préconisons un nombre impair de points pour la quadrature vu le profil gaussien de la densité.

Cas du potentiel coulombien

Si le potentiel nucléaire n'a rien de changé quant à son expression entre la méthode statique ou dynamique, le potentiel coulombien diffère. Nous allons le calculer dans sa formulation classique :

$$V_{CB}(x, y, z) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \iiint \frac{\rho_p(x', y', z')}{\sqrt{(x-x')^2 + (y-y')^2 + (z-z')^2}} dx' dy' dz' \quad (\text{B.14})$$

Pour calculer efficacement ce potentiel sans en payer un trop fort temps de calcul, nous allons réaliser à nouveau une quadrature de Gauss-Hermite. Pour cela, nous allons introduire le changement de variable suivant : $X = x' - x$.

$$\begin{aligned} V_{CB}(x, y, z) &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \iiint e^{-X^2} e^{-Y^2} e^{-Z^2} \left(\frac{\rho_p(X+x, Y+y, Z+z) e^{X^2} e^{Y^2} e^{Z^2}}{\sqrt{X^2 + Y^2 + Z^2}} \right) dXdYdZ \\ &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i,j,k}^{N_{GH}} \bar{\omega}_i \bar{\omega}_j \bar{\omega}_k \left(\frac{\rho_p(X_i+x, Y_j+y, Z_k+z) e^{X_i^2} e^{Y_j^2} e^{Z_k^2}}{\sqrt{X_i^2 + Y_j^2 + Z_k^2}} \right) \end{aligned} \quad (\text{B.15})$$

Numérique : A nouveau, il convient d'utiliser une bonne interpolation à 3 dimensions sur le réseau pour estimer la densité de protons sur les points. De plus, nous préconisons fortement cette fois-ci l'utilisation d'un nombre pair de points de Gauss. Au regard du dénominateur qui ne peut s'annuler que si $X_i = Y_j = Z_k = 0$, il faut éviter le point central de position nulle pour les quadratures de Gauss-Hermite impaires.

Mais il s'avère que cette formulation classique donne un coulombien assez fort. Nous avons aussi implémenté la formulation du coulombien proposée dans [GQ80; Cha+98] qui inclut un terme d'échange :

$$V_{CB}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left\{ \int \frac{\rho_p(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3\mathbf{r}' - 2 \left[\frac{3}{\pi} \rho_p(\mathbf{r}) \right]^{1/3} \right\} \quad (\text{B.16})$$

On utilise exactement la même méthode d'intégration de Gauss-Hermite vu précédemment.

Méthode d'intégration

Pour toutes les variables qui vont évoluer dans le temps, on va utiliser une incrémentation temporelle par gradient (Méthode d'Euler progressive du premier ordre) :

$$x_{t+\Delta t} = x_t + \dot{x}\Delta t \quad (\text{B.17})$$

Néanmoins, cette intégration est très imprécise et peut générer beaucoup de fluctuations numériques. On va alors utiliser une méthode d'intégration. La méthode utilisée est de type **prédicteur-correcteur d'ordre 2**. C'est la réunion d'une méthode explicite type Euler modifié (prédicteur-correcteur) et de la méthode de Adams-Bashforth explicite, qui prend en compte le gradient du pas de temps précédent. On va évaluer deux fois le gradient. On va utiliser un point milieu, c'est à dire qu'on va évaluer une première fois le gradient (sur le point), on estime ainsi un prédicteur. On va réévaluer le gradient en ce point (prédicteur), on va en déduire le correcteur avec la méthode de Adams-Bashforth :

$$\text{Soit : } f(x) = \left. \frac{df}{dt} \right|_x$$

$$\bar{x}_{n+1}^{[1]} = \bar{x}_n + \frac{\Delta t}{2} (3f(\bar{x}_n) - f(\bar{x}_{n-1})) \quad \text{Prédicteur} \quad (\text{B.18})$$

$$x_{n+1} = \bar{x}_n + \frac{\Delta t}{2} (f(\bar{x}_n) + f(\bar{x}_{n+1}^{[1]})) \quad \text{Correcteur} \quad (\text{B.19})$$

Techniquement, cette méthode est aisée à mettre en place et ne requiert le calcul des gradients deux fois par pas de temps. Ce qui est peu comparé à des méthodes types Runge-Kutta qui vont calculer un nombre de fois le gradient égal à l'ordre de la méthode. La seule précaution de la méthode prédicteur-correcteur d'ordre 2, est de calculer le gradient au pas de temps initial, qui sera requis pour le pas de temps suivant.

C'est un excellent compromis entre stabilité et coût de temps de calcul. Car gagner en stabilité numérique se paye par du temps de calcul. On pourra citer plusieurs méthodes : Runge-Kutta d'ordre n (n calculs de gradient), prédicteur-correcteur d'ordre 3 (nécessitent les gradients de deux pas de temps précédents et 2 calculs de gradient), Runge-Kutta-Fehlberg (pas de temps adaptatif avec 6 calculs de gradient). Toutes ces méthodes sont plus complexes et peuvent apporter des améliorations comme des pas de temps adaptatifs. Point qui peut être très intéressant dans les calculs numériques de précision. Mais qui se paie, à nouveau, très fortement en temps de calcul : de part le nombre de gradient à calculer mais aussi par des subdivisions du pas de temps d'intégration plus nombreux.

B.3.2 Collisions

Le terme de collision qui a pour but de rendre compte des effets dissipatifs lors des collisions d'ions lourds est reproduit à partir de collisions élastiques entre états-cohérents. Les collisions sont *à priori* toutes traitées. C'est-à-dire qu'on va regarder tous les couples et sélectionner ceux qui sont susceptibles de réaliser une collision effective avec différents critères. Nous allons détailler ces différents critères.

Sélection du couple

Sur l'ensemble des états-cohérents, nous allons choisir un couple (i, j) pioché aléatoirement dans l'ensemble. On prend soin de ne pas choisir $i = j$. Pour chaque couple, on va faire passer différents critères jusqu'à vérifier qu'il est susceptible de faire une collision effective. Si un couple collisionne, ils sont désactivés pour ce pas de temps et ils ne peuvent pas subir d'autre collision sur ce pas de temps.

Critère de distance

Les collisions sont traitées de façon instantanée (mais successives d'un point de vu algorithmique). Donc, toutes les collisions sont locales et doivent satisfaire un critère de distance relative faible.

$$|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|^2 \leq (c\Delta t_{col})^2 \quad (\text{B.20})$$

On suppose que pendant l'intervalle de temps de collision, les états cohérents, à une vitesse c sont susceptibles d'entrer en collision d'un point de vue distance.

Critère de vitesse

Le deuxième critère concerne les vitesses. Le premier point à vérifier concerne l'orientation des vitesses :

$$(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \cdot (\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_j) \leq 0 \quad (\text{B.21})$$

Si l'on projette le nombre d'onde relatif sur la distance relative, on s'assure que les deux états-cohérents peuvent entrer en collision. Avec ce critère, on exclue l'opposition d'orientation des vecteurs de nombre d'onde.

Le deuxième point à vérifier concerne la norme de la vitesse. On s'assure que la norme permette une collision par "choc arrière" (orientation des vitesses proches mais normes différentes).

$$|(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \cdot (\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_j)| \leq \frac{\hbar c}{mc^2} \times c\Delta t \times |\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_j|^2 \quad (\text{B.22})$$

Section efficace

La section efficace nucléon-nucléon peut-être choisie constante à 40 mb ou selon une paramétrisation en fonction de l'énergie [Che68]. Pour les collisions $p-n$:

$$\begin{aligned} \sigma &= -\frac{5057.4}{E^2} + \frac{9069.2}{E} + 6.9466 \text{ mb}, & E \leq 40 \text{ MeV} \\ \sigma &= \frac{239380}{E^2} + \frac{1802.0}{E} + 27.147 \text{ mb}, & 40 < E \leq 400 \text{ MeV} \\ \sigma &= 34.5 \text{ mb}, & 400 < E \leq 800 \text{ MeV} \end{aligned}$$

et pour les collisions $p-p$ et $n-n$:

$$\begin{aligned} \sigma &= -\frac{1174.8}{E^2} + \frac{3088.5}{E} + 5.3107 \text{ mb}, & E \leq 40 \text{ MeV} \\ \sigma &= \frac{93074}{E^2} - \frac{11.148}{E} + 22.429 \text{ mb}, & 40 < E \leq 310 \text{ MeV} \\ \sigma &= \frac{887.37}{E} + 0.05331E + 3.5475 \text{ mb}, & 310 < E \leq 800 \text{ MeV} \end{aligned}$$

L'énergie E est l'énergie cinétique de la particule incidente dans le repère du laboratoire sur une autre particule au repos.

De plus, la section efficace est diminuée d'un facteur 10 pour la conversion $\text{mb} \rightarrow \text{fm}^2$ ($1\text{fm}^2 = 10^{-26}\text{cm}^{-2} = 10\text{mb}$). Et d'un facteur π pour l'intégration en paramètre d'impact :

B.3. Évolution temporelle

$$\sigma = 2\pi \int b db = 2\pi \times b^2/2 = \pi b^2.$$

$$\forall E, \forall \Delta T, \bar{\sigma}[\text{fm}^2] = \frac{\sigma[\text{mb}]}{10 \times \pi} \quad (\text{B.23})$$

Avec $\Delta T = 1$ pour les collisions $n-p$ et $\Delta T = 0$ pour les collisions $n-n$ ou $p-p$. Puis, la section efficace est renormalisée avec le poids du couple d'états cohérents $\omega_{(i,j)}$ qui collisionnent et diminuée par le facteur F (effet du milieu).

$$\sigma_{ij} = \bar{\sigma} \times \left(\frac{\omega_i + \omega_j}{2} \right) \times F \quad (\text{B.24})$$

La collision est acceptée si :

$$|\vec{r}_i - \vec{r}_j|^2 - \frac{[(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \cdot (\vec{k}_i - \vec{k}_j)]^2}{|\vec{k}_i - \vec{k}_j|^2} \leq \sigma_{ij} \quad (\text{B.25})$$

Si la collision est acceptée, on va calculer les nouvelles impulsions (nombres d'ondes) du couple d'états-cohérents.

Nouvelles impulsions

Pour calculer les nouvelles impulsions (ou nombres d'ondes), on va d'abord calculer les coordonnées du centre de masse (CM) de la collision état-cohérent/état-cohérent.

$$\mathbf{k}_{CM} = \frac{\omega_i}{\omega_i + \omega_j} \mathbf{k}_i + \frac{\omega_j}{\omega_i + \omega_j} \mathbf{k}_j \quad (\text{B.26})$$

Ensuite, on tire deux nombres aléatoires $\#[0, 1]_1$ et $\#[0, 1]_2$ (compris entre 0 et 1) qui vont nous permettre de tirer un vecteur $\mathbf{k}_\#$ dans un repère sphérique.

$$\begin{aligned} k_{x,\#} &= \frac{|\vec{k}_i - \vec{k}_j|}{\omega_i + \omega_j} \times \left(\sqrt{1 - (\#[-1, 1]_1)^2} \right) \text{Cos}(\#[0, 2\pi]_2) \\ k_{y,\#} &= \frac{|\vec{k}_i - \vec{k}_j|}{\omega_i + \omega_j} \times \left(\sqrt{1 - (\#[-1, 1]_1)^2} \right) \text{Sin}(\#[0, 2\pi]_2) \\ k_{z,\#} &= \frac{|\vec{k}_i - \vec{k}_j|}{\omega_i + \omega_j} \times \left(\sqrt{1 - (\#[-1, 1]_1)^2} \right) \end{aligned} \quad (\text{B.27})$$

Plutôt que de tirer deux angles aléatoires dans une sphère (ce qui donne une distribution non-homogène), on utilise ces règles de transformation assez courantes pour un tirage d'un vecteur aléatoire dans une sphère. Ainsi, les nouvelles impulsions vont être :

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_i &= \mathbf{k}_{CM} + \omega_j \mathbf{k}_\# \\ \mathbf{k}_j &= \mathbf{k}_{CM} - \omega_i \mathbf{k}_\# \end{aligned}$$

Correction de corrélation

Si les équations d'évolution du champ-moyen gèrent le signe et la valeur de la corrélation d'un état-cohérent, une collision est une variation brusque du nombre d'onde de

l'état-cohérent. De fait, celui-ci peut subir une variation dont l'état final ne garantie pas que le signe de la corrélation soit correct. De fait, on va simplement chercher le puits de potentiel le plus proche (pour se placer dans le repère du noyau où est lié l'état-cohérent). Pour cela, il existe différentes méthodes, celle employée ici est une recherche rapide des quatre plus gros fragments. On cherche à quel fragment l'état-cohérent est le plus proche (dans l'espace des phases 6-dim), on se place dans le repère de ce noyau et on ajuste le signe de la corrélation en fonction. On rappelle que : $\sigma = \text{sgn}(-\langle x \rangle \langle k \rangle) \times \sqrt{\phi\chi - \frac{1}{4}}$ dans le repère du noyau où est lié l'état-cohérent.

Blocage de Pauli

Le blocage de Pauli utilisé exploite la nature des états-cohérents. Les états-cohérents, étant tous de la même nature, on va vérifier qu'il n'existe aucun autre état-cohérent dont les paramètres sont très semblables à l'état-cohérent qu'on teste. Autrement dit, on vérifie qu'il n'existe pas un état-cohérent parmi toute la distribution qui soit dans le même état (position, nombre d'onde, largeurs, corrélations, isospin et spin) que l'état-cohérent que l'on teste. Pour cela, pour chaque état-cohérent du couple, on va calculer le produit scalaire (détaillé en annexe E) de l'état i avec tous les autres. Ainsi, si l'un des produits scalaires est au-delà un seuil dit de "similarité", l'état final atteint par l'état-cohérent est bloqué par le blocage de Pauli, la collision est rejetée.

Ainsi, on ne vérifie le blocage de Pauli que pour les états-cohérent de **même** isospin et spin. On calcule le produit scalaire de tout état-cohérent avec l'état en question :

$$\langle 1|2 \rangle_x = \frac{1}{\Delta_{12}^{-1/4}} \times \quad (B.28)$$

$$\times \text{Exp} \left(-\frac{1}{4\Delta_{12}} \left((\phi_1 + \phi_2)(x_1 - x_2)^2 + (\chi_1 + \chi_2)(k_1 - k_2)^2 - 2(\sigma_1 + \sigma_2)(k_1 - k_2)(x_1 - x_2) \right) \right)$$

avec $\Delta_{12} = (\chi_1 + \chi_2)(\phi_1 + \phi_2) - (\sigma_1 + \sigma_2)^2$

$$\langle 1|2 \rangle = \langle 1|2 \rangle_x \langle 1|2 \rangle_y \langle 1|2 \rangle_z \quad (B.29)$$

Dans le cas où la valeur du produit scalaire serait en dessous du seuil, on vérifie aussi le spin, ultime critère de similarité entre deux états-cohérent susceptibles d'être dans le même état. Bien entendu, on calcule les produits-scalaires avec les états-finaux des états-cohérent, le but de la collision étant un changement d'état, l'état initial est considéré comme libre.

Collision effective

Si tous les critères sont acceptés, que le parcours de toute la distribution lors de la vérification du blocage de Pauli n'a donné aucun produit scalaire supérieur au seuil de similarité (pour le couple i et j), alors on considère que la collision est effective. On attribue à l'état-cohérent ses nouveaux nombres d'ondes et éventuellement son changement de signe de corrélation. On désactive le couple pour ce pas de temps là afin d'éviter des multiples collisions pendant un pas de temps. Ensuite, on passe à un autre couple.

Explications sur l'échantillonnage en déterminants de SLATER

Cette deuxième partie a pour but de décrire comment on procède pour l'échantillonnage en déterminant de Slater d'ondelettes du chapitre 5.

Tout d'abord, on rappelle l'équation 5.9 qui définit notre fonction d'onde à N-Corps comme la combinaison de tous les déterminants de Slater d'ondelettes possibles. Comme on en a discuté au chapitre 5, il est presque impossible d'aboutir à une reconstruction exacte de tous les déterminants de Slater vu le nombre. Ceci est dû au fait du grand nombre d'ondelette utilisée **par** nucléon. Donc on va échantillonner notre distribution avec un nombre suffisant de déterminant de Slater afin de reconstruire au mieux l'information. On rappelle que sur certaines observables, la distribution en états-cohérents traduit le comportement moyen que la superposition de nos échantillonnages devrait reproduire

$$|\Psi^N\rangle = \sum_{k=1}^{\Omega(N)} C_k \mathcal{A} \left\{ \prod_{l=1}^N |\alpha_l\rangle \right\}_k \quad (\text{C.1})$$

Fondamentalement, il existe deux méthodes pour reconstruire ces déterminants de Slater :

La première consiste à se baser uniquement sur les niveaux du déterminant de Slater de la voie d'entrée. C'est-à-dire qu'on va piocher le nombre de nucléons par niveau en fonction de la dégénérescence du niveau. Mais cette approche pose des questions de formalismes. En effet, dans une approche type ETDHF, les niveaux d'occupations varient avec le terme de collision. Donc reconstruire notre information à N-Corps avec un "canvas" de la voie d'entrée semble peu pertinent. On peut néanmoins utiliser cette approche sur des calculs TDHF où les niveaux d'occupations ne vont pas (ou peu) varier, conserver la structure de la voie d'entrée semble cohérent.

L'autre méthode consiste à reconstruire l'information en se basant sur les nucléons uniquement. On part du principe que les niveaux d'occupations ont été complètement mélangés et ne sont pas connus précisément. De fait, on se passe de la structure de la voie d'entrée et il nous est impossible de reconstruire les niveaux de la voie de sortie. Pour reconstruire l'information sur les nucléons, on va procéder à l'inverse de la décomposition utilisée dans la partie statique du programme (STAWAN).

On sait à quelle "famille" appartient un état-cohérent : neutrons de la cible, du projectile, ou proton de la cible ou du projectile. Ces quatre familles sont bien rangées dans

l'ordre. On va donc piocher les nucléons d'une famille après l'autre :

$$\begin{aligned}
 & \sum_{i=1}^{\Omega(A_{proj}+A_{cible})} \omega_i = A_{proj} + A_{cible} \\
 \Rightarrow & \sum_{i=1}^{\Omega(A_{proj}+A_{cible})} \omega_i = \sum_{i=1}^{\Omega(N_{proj})} \omega_i + \sum_{i=1}^{\Omega(N_{cible})} \omega_i + \sum_{i=1}^{\Omega(Z_{proj})} \omega_i + \sum_{i=1}^{\Omega(Z_{cible})} \omega_i \\
 & = N_{proj} + N_{cible} + Z_{proj} + Z_{cible}
 \end{aligned} \tag{C.2}$$

Donc, pour une famille donnée d'état-cohérent, on sait que :

$$N_{proj} = \sum_{k=1}^{N_{proj}} \underbrace{\left(\sum_{i=1}^{\Omega(\mathbf{n}_k)} \omega_i \right)}_{=1} \text{ tel que : } \mathbf{n}_k \in N_{proj} \tag{C.3}$$

Par exemple pour les neutrons du projectile, on va construire N_{proj} familles d'états-cohérents, tel que la somme des ω_i de cette famille soit égale à 1. De façon à ce qu'on retrouve la masse d'un nucléon. Pour chaque déterminant de Slater d'états-cohérents, on va piocher un état-cohérent par famille, celui-ci représentera un nucléon.

Pour cette méthode, on va procéder à un grand nombre d'échantillonnage en déterminant de Slater de façon à se rapprocher au mieux de la décomposition exacte de la fonction d'onde à N-Corps. L'avantage de cette méthode, c'est qu'elle permet de prendre en compte implicitement tous les déterminants de Slater possible quelque soit les niveaux d'occupations. Car il est aussi possible d'exprimer la fonction d'onde à N-Corps comme une superposition des déterminants de Slater des niveaux d'occupations [WM77].

Liste des méthodes d'agrégation

Cette deuxième partie a pour but de lister les différentes approches d'agrégation de nucléons envisagées du chapitre 5.

On part du principe ici que nous disposons d'une distribution de fonctions d'onde à 1-Corps comme nucléons. De fait, chaque nucléon dispose d'une position ($\langle x \rangle, \langle y \rangle, \langle z \rangle$), d'un nombre d'onde ($\langle k_x \rangle, \langle k_y \rangle, \langle k_z \rangle$), des moments d'ordre deux en position (χ_x, χ_y, χ_z) et des corrélations des moments ($\gamma_x, \gamma_y, \gamma_z$). On peut calculer les moments d'ordre deux en nombre d'onde avec la formule $\phi = (1/4 + 4\gamma^2\chi^2)/\chi$.

D.1 Percolation

La méthode la plus simple est la percolation. On n'utilise que les centroïdes des nucléons. On va d'abord choisir un nucléon et on va chercher tous les nucléons autour dans une sphère proche et agglomérer les nucléons dans un fragment autour de ce nucléon choisi. Ainsi, on va former des groupes de nucléons par critère de proximité qui formeront nos fragments.

De la même façon, on peut procéder à la percolation en impulsion, de cette façon on forme des fragments qui ont une impulsion proche mais qui peuvent être très étalés dans l'espace des position. Un compromis consiste à faire la percolation dans l'espace ces phases à 3D.

D.2 Classification Ascendante Hiérarchique

Cette autre méthode est issue des techniques utilisées en analyse multidimensionnelle, notamment en analyse en composantes principales. C'est un système itératif. On va d'abord créer des paires avec une percolation (en position, impulsion ou les deux en même temps).

Chaque paire admet alors un barycentre. On va donc procéder encore à une percolation de paire, mais cette fois-ci on prend en compte les barycentres de paires et le nucléon non-choisi en cas de nombre impair. On va procéder ainsi en réalisant une percolation paire à paire jusqu'à ce qu'il ne reste plus qu'un seul fragment, voir figure D.1.

Cette percolation peut se faire selon plusieurs critères :

- Le lien minimum : entre deux paires, on regarde la distance minimale entre les constituants (créé des petits fragments)

- Le lien maximum : entre deux paires, on regarde la plus grande distance entre les constituants (crée des gros fragments)
- La distance moyenne : on regarde la distance entre groupe avec le barycentre de chaque paire
- L'indice de Ward : on crée les groupes avec la plus petite inertie intra-groupe et la plus grande inertie inter-groupe.

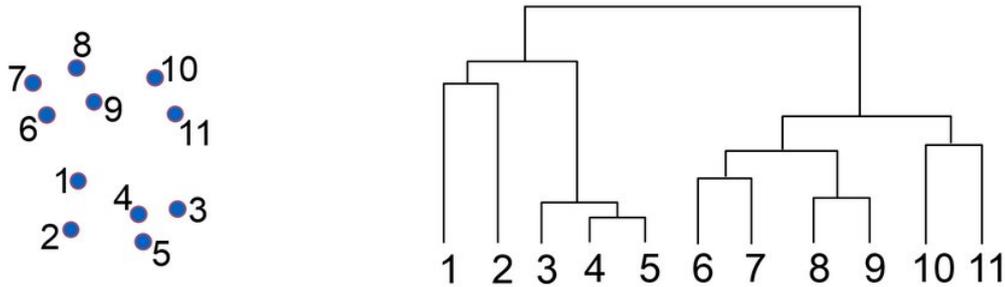


FIGURE D.1 – Illustration schématique de la Classification Ascendante Hiérarchique [RCP]. A gauche, représentation \mathbb{R}^2 des nucléons, à droite le dendrogramme associé.

Le dendrogramme est une représentation peu coutumière des fragments, mais il permet de voir les sous-structures géométriques qu'un fragment peu présenter. Bien évidemment, ces structures sont **purement géométriques** car elles se basent sur les centroïdes des nucléons (positions ou impulsions). Le problème se place ensuite dans le découpage. En effet, on a formé un seul et unique fragment au final, qui absorbe toute la distribution. Il existe trois méthodes pour découper le dendrogramme en fragments :

- La coupure : on fixe une coupure, un critère de distance (\mathbb{R}^3 ou \mathbb{R}^6) relative. On représente cela comme une coupure horizontale dans le dendrogramme.
- Le nombre : on fixe un nombre de fragments en sortie. Cela suppose qu'on connaisse exactement la multiplicité de notre événement.
- Le critère de Ward : de façon itérative, on se base sur la variation brusque de l'inertie intra-groupe et inter-groupe entre deux découpages en fragments.

Le critère de Ward est la méthode la plus satisfaisante des trois. En fait, on réalise une procédure itérative pour chaque nombre de fragments possible (de 1 au nombre de nucléons) et on calcule l'inertie intra-groupe et inter-groupe. On se base alors sur la plus grosse variation entre deux itérations successives qui maximise l'inertie intra-groupe et qui minimise l'inertie inter-groupe : on maximise le fragment le plus *probable* (géométriquement).

Si les distances relatives sont géométriques, on peut néanmoins utiliser la classification ascendante hiérarchique avec d'autres paramètres, tant que ceux-ci sont comparables. On peut notamment créer les sous-fragments en calculant les interactions nucléaires les plus fortes entre nucléons ou les énergies de liaisons (Formule de Bethe-Weisäcker) en cherchant les fragments les plus liés.

D.2. Classification Ascendante Hiérarchique

Une procédure qui se base sur une distribution des fragments les plus liés a été développée dans [Fé+16]. L'algorithme **FRIGA** recherche la configuration la plus satisfaisante en se basant sur la configuration avec les fragments **les plus liés**. Cela fait intervenir la formule de Bethe-Weisäcker où les paramètres des différentes contributions ont été recalculés avec les coefficients de la force effective utilisée au sein du modèle.

Produit scalaire

Cette annexe a pour but de détailler le calcul du produit scalaire entre deux états-cohérents. Cette partie, relativement technique, a pour but de démontrer la relation B.29 utilisée dans le terme de collision pour le blocage de Pauli ainsi que dans la routine de fluctuations.

E.1 Première approche

Cette partie débutera par un rappel général des propriétés des opérateurs de création et annihilation de la seconde quantification :

$$a^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle \quad (\text{E.1})$$

$$a |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle \quad (\text{E.2})$$

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^n |0\rangle \quad (\text{E.3})$$

$$N |n\rangle = a a^\dagger |n\rangle = n |n\rangle \quad (\text{E.4})$$

$$\langle n | n' \rangle = \delta_{nn'} \quad (\text{E.5})$$

Un état-cohérent canonique sera défini comme le déplacement de l'état vide $|0\rangle$ par l'opérateur de déplacement $D(\alpha)$, qui est unitaire donc : $D^\dagger(\alpha) = D^{-1}(\alpha) = D(-\alpha)$ et défini comme suit :

$$D(\alpha) = e^{\alpha a^\dagger - \alpha^* a} \quad (\text{E.6})$$

$$|\beta\rangle = D(\beta) |0\rangle \quad (\text{E.7})$$

La première étape consiste à ré-exprimer l'opérateur de déplacement en utilisant la formule de Baker-Campbell-Hausdorff : $e^A \cdot e^B = e^{A+B} e^{\frac{1}{2}[A,B]}$ (valable si A et B commutent avec $[A, B]$). Ainsi avec $A = \alpha a^\dagger$ et $B = -\alpha^* a$, on a :

$$[A, B] = [\alpha a^\dagger, -\alpha^* a] = -\alpha \alpha^* [a^\dagger, a] = |\alpha|^2 \quad (\text{E.8})$$

$$D(\alpha) = e^{\alpha a^\dagger} e^{-\alpha^* a} e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \quad (\text{E.9})$$

Nous allons d'abord nous intéresser au produit scalaire de deux états-cohérents canoniques :

$$\langle \beta | \alpha \rangle = \langle 0 | D^\dagger(\beta) D(\alpha) | 0 \rangle \quad (\text{E.10})$$

$$= \langle 0 | e^{-\beta a^\dagger} e^{\beta^* a} e^{\alpha a^\dagger} e^{-\alpha^* a} | 0 \rangle e^{-\frac{1}{2}(|\alpha|^2 + |\beta|^2)} \quad (\text{E.11})$$

On va d'abord s'intéresser au premier terme, on laisse de coté le terme exponentiel de droite. On développera les termes exponentiels d'opérateur en série de Taylor : $e^{ax} = 1 + ax + \frac{(ax)^2}{2!} + \dots$, les termes extérieurs qui s'appliquent au bra et au ket.

$$\langle 0|e^{-\beta a^\dagger} e^{\beta^* a} e^{\alpha a^\dagger} e^{-\alpha^* a}|0\rangle = \langle 0|\left(1 - \beta a^\dagger + \frac{(\beta a^\dagger)^2}{2!} + \dots\right) e^{\beta^* a} e^{\alpha a^\dagger} \left(1 - \alpha^* a + \frac{(\alpha^* a)^2}{2!} + \dots\right)|0\rangle \quad (\text{E.12})$$

$$\approx \langle 0|(1)e^{\beta^* a} e^{\alpha a^\dagger} (1)|0\rangle \quad (\text{E.13})$$

On rappelle que si l'on applique l'opérateur d'annihilation a sur le vide, on détruit l'état : $a|0\rangle = \bar{0}$. Si l'on observe l'application des opérateurs de gauche sur le bra $\langle 0|$ et les opérateurs de droite sur le ket $|0\rangle$, on voit que globalement aucun terme ne subsistera sauf le terme issu du premier ordre des séries. On applique le même développement aux termes centraux :

$$\langle 0|e^{-\beta a^\dagger} e^{\beta^* a} e^{\alpha a^\dagger} e^{-\alpha^* a}|0\rangle \approx \langle 0|\left(1 + \beta^* a + \frac{(\beta^* a)^2}{2!} + \dots\right) \left(1 + \alpha a^\dagger + \frac{(\alpha a^\dagger)^2}{2!} + \dots\right)|0\rangle \quad (\text{E.14})$$

$$\approx \left(\dots + \langle 2|\frac{1}{2!}\sqrt{2}(\beta^*)^2 + \langle 1|\beta^* + \langle 0|\right) \cdot \left(|0\rangle + \alpha|1\rangle + \frac{1}{2!}\sqrt{2}(\alpha)^2|2\rangle + \dots\right) \quad (\text{E.15})$$

Si l'on applique la propriété E.5 à E.15 et on reporte dans E.11 :

$$\langle \beta|\alpha\rangle = \left(1 + \beta^* \alpha + \frac{1}{2!}(\beta^* \alpha)^2 + \dots\right) e^{-\frac{1}{2}(|\alpha|^2 + |\beta|^2)} \quad (\text{E.16})$$

$$= e^{\beta^* \alpha} e^{-\frac{1}{2}(|\alpha|^2 + |\beta|^2)} \quad (\text{E.17})$$

$$\text{avec : } |\alpha - \beta|^2 = (\alpha - \beta)(\alpha^* - \beta^*) = |\alpha|^2 + |\beta|^2 - \alpha\beta^* - \alpha^*\beta \quad (\text{E.18})$$

$$\Rightarrow |\langle \beta|\alpha\rangle|^2 = e^{-|\alpha - \beta|^2} \quad (\text{E.19})$$

Cette relation définit la norme au carré du produit scalaire pour des états cohérents canoniques. Mais nous utilisons des états-cohérents généralisés, qui sont définis ainsi :

$$|\beta\gamma\rangle = S^{-1}(\gamma)D(\beta)|0\rangle \quad (\text{E.20})$$

On retrouve l'opérateur de déplacement $D(\beta)$ qui est identique au cas des états-cohérents canoniques. On fait intervenir l'opérateur $S(\gamma)$ unitaire. Or le produit scalaire des états-cohérents généralisés reste inchangé car il est indépendant de γ [RDH82] :

$$\langle \beta\gamma|\alpha\gamma\rangle = \langle 0|(S^{-1}(\gamma)D(\beta))^\dagger (S^{-1}(\gamma)D(\alpha))|0\rangle \quad (\text{E.21})$$

$$= \langle 0|D(\beta)^\dagger (S^{-1}(\gamma))^\dagger S^{-1}(\gamma)D(\alpha)|0\rangle \quad (\text{E.22})$$

$$= \langle 0|D(\beta)^\dagger (S(\gamma)S^{-1}(\gamma))D(\alpha)|0\rangle \quad (\text{E.23})$$

$$= \langle \beta|\alpha\rangle \quad (\text{E.24})$$

$$= e^{\beta^* \alpha} e^{-\frac{1}{2}(|\alpha|^2 + |\beta|^2)} \quad (\text{E.25})$$

Au regard de l'expression du produit scalaire, force est de constater que les états-cohérents ne sont pas orthogonaux et le produit scalaire tend vers zéro pour des très grandes différences d'états avec $|\alpha - \beta| \gg 1$.

E.2 Formule analytique

Pour commencer, on reprend l'expression d'un état cohérent dans l'espace des configurations :

$$|\beta\gamma\rangle = \left(\frac{1}{\pi\hbar|\alpha_2|^2} \right) e^{-\frac{1}{2\hbar}\left(\frac{\alpha_1}{\alpha_2}\right)(x-\langle x \rangle)^2} e^{i\frac{\langle p \rangle}{\hbar}(x-\langle x \rangle)} \quad (\text{E.26})$$

On va calculer le produit scalaire avec la formulation intégrale (à 1 dimension, les dimensions étant séparables) :

$$\langle \beta'\gamma' | \beta\gamma \rangle = \left(\frac{1}{\pi\hbar|\alpha_2|^2} \right)^{1/4} \left(\frac{1}{\pi\hbar|\alpha_2'|^2} \right)^{1/4} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left[e^{-\frac{1}{2\hbar}\left(\frac{\alpha_1'}{\alpha_2'}\right)^*(x-\langle x' \rangle)^2} e^{-i\frac{\langle p' \rangle}{\hbar}(x-\langle x' \rangle)} \times e^{-\frac{1}{2\hbar}\left(\frac{\alpha_1}{\alpha_2}\right)(x-\langle x \rangle)^2} e^{i\frac{\langle p \rangle}{\hbar}(x-\langle x \rangle)} \right] \quad (\text{E.27})$$

On pose pour la suite $a = \frac{\alpha_1}{\alpha_2}$ et $a' = \frac{\alpha_1'}{\alpha_2'}$. On va d'abord s'intéresser à la partie exponentielle :

$$\begin{aligned} \epsilon &= -\frac{1}{2\hbar} [a'^*(x^2 - 2x\langle x' \rangle + \langle x' \rangle^2) + a(x^2 - 2x\langle x \rangle + \langle x \rangle^2)] + \frac{i}{\hbar} [\langle p \rangle x - \langle p \rangle \langle x \rangle - \langle p' \rangle x + \langle p' \rangle \langle x' \rangle] \\ &= -x^2 \frac{(a + a'^*)}{2\hbar} + \frac{x}{\hbar} (a'^* \langle x' \rangle + a \langle x \rangle + i[\langle p \rangle - \langle p' \rangle]) - \frac{1}{2\hbar} (a'^* \langle x' \rangle^2 + a \langle x \rangle^2) - \frac{i}{\hbar} (\langle p \rangle \langle x \rangle - \langle p' \rangle \langle x' \rangle) \end{aligned} \quad (\text{E.28})$$

Après intégration et sortie des termes indépendants de l'intégration, on regroupe tous les termes exponentiels sous M , et on a :

$$\langle \beta'\gamma' | \beta\gamma \rangle = \left(\frac{1}{\pi\hbar|\alpha_2|^2} \right)^{1/4} \left(\frac{1}{\pi\hbar|\alpha_2'|^2} \right)^{1/4} \left(\frac{2\pi\hbar}{\left(\frac{\alpha_1}{\alpha_2} + \left(\frac{\alpha_1'}{\alpha_2'}\right)^*\right)} \right)^{1/2} e^M \quad (\text{E.29})$$

On rappelle des propriétés déjà utilisées dans le chapitre 3 :

$$|\alpha_2|^2 = \frac{2\chi}{\hbar} \quad (\text{E.30})$$

$$\frac{\alpha_1}{\alpha_2} + \frac{\alpha_1^*}{\alpha_2^*} = \frac{2}{|\alpha_2|^2} = \frac{\hbar}{\chi} \quad (\text{E.31})$$

$$\frac{\alpha_1}{\alpha_2} = \frac{\hbar}{2\chi} \left(1 - i \frac{2\sigma}{\hbar} \right) \quad (\text{E.32})$$

On commence par simplifier le dénominateur du troisième terme :

$$\begin{aligned}
 \left| \frac{\alpha_1}{\alpha_2} + \left(\frac{\alpha'_1}{\alpha'_2} \right)^* \right| &= \left| \frac{\hbar}{2\chi} \left(1 - i \frac{2\sigma}{\hbar} \right) + \frac{\hbar}{2\chi'} \left(1 + i \frac{2\sigma'}{\hbar} \right) \right| \\
 &= \left| \frac{\hbar}{2\chi} + \frac{\hbar}{2\chi'} + i \left(\frac{\sigma'}{\chi'} - \frac{\sigma}{\chi} \right) \right| \\
 &= \left[\frac{\hbar^2}{4} \left(\frac{1}{\chi} + \frac{1}{\chi'} \right)^2 + \left(\frac{\sigma'}{\chi'} - \frac{\sigma}{\chi} \right)^2 \right]^{1/2} \\
 &= \left[\frac{\hbar^2}{4} (\chi + \chi')^2 + (\sigma'\chi - \sigma\chi') \right]^{1/2} \frac{1}{\chi\chi'} \quad (\text{E.33})
 \end{aligned}$$

De fait, on reprend l'expression et on injecte ce calcul :

$$\begin{aligned}
 \langle \beta' \gamma' | \beta \gamma \rangle &= \left(\frac{\hbar}{2\chi} \right)^{1/4} \left(\frac{\hbar}{2\chi'} \right)^{1/4} \frac{\sqrt{2}(\chi\chi')^{1/2}}{\left[\frac{\hbar^2}{4} (\chi + \chi')^2 + (\sigma'\chi - \sigma\chi') \right]^{1/4}} e^M \\
 &= \sqrt{2\hbar} \frac{(\chi\chi')^{1/4}}{\underbrace{(\hbar^2(\chi + \chi')^2 + 4(\sigma'\chi - \sigma\chi'))^{1/4}}_a} e^M \quad (\text{E.34})
 \end{aligned}$$

On va simplifier le terme a :

$$\begin{aligned}
 a &= \hbar^2(\chi + \chi')^2 + 4(\sigma'\chi - \sigma\chi')^2 \\
 &= \hbar^2(\chi^2 + 2\chi\chi' + \chi'^2) + 4(\sigma'^2\chi^2 - 2\sigma'\sigma\chi'\chi + \sigma^2\chi'^2) \\
 &= \chi^2(\hbar^2 + 4\sigma'^2) + \chi'^2(\hbar^2 + 4\sigma^2) + 2\chi\chi'(\hbar^2 - 4\sigma\sigma') \\
 \text{or : } \sigma^2 &= \chi\phi - \frac{\hbar^2}{4} \\
 &= \chi^2(\hbar^2 + 4\chi'\phi' - 4\frac{\hbar^2}{4}) + \chi'^2(\hbar^2 + 4\chi\phi - 4\frac{\hbar^2}{4}) + 2\chi\chi'(\hbar^2 - 4\sigma\sigma') \\
 &= 4\chi\chi'(\chi\phi' + \chi'\phi) + 2\chi\chi'\hbar^2 - 8\chi\chi'\sigma\sigma' \\
 &= 4\chi\chi' \left[\underbrace{\chi\phi' + \chi'\phi + \frac{\hbar^2}{2} - 2\sigma\sigma'}_{\Delta} \right] \\
 &= 4\chi\chi'\Delta \quad (\text{E.35})
 \end{aligned}$$

Et on simplifie l'expression précédente avec la simplification de a :

$$\begin{aligned}
 \langle \beta' \gamma' | \beta \gamma \rangle &= \sqrt{2\hbar} \frac{(\chi\chi')^{1/4}}{(4\chi\chi'\Delta)^{1/4}} e^M \\
 &= \left(\frac{\hbar^2}{\Delta} \right)^{1/4} e^M \quad \text{avec : } \Delta = \chi\phi' + \chi'\phi + \frac{\hbar^2}{2} - 2\sigma\sigma' \quad (\text{E.36})
 \end{aligned}$$

E.2. Formule analytique

Pour la suite, on décomposera le terme dans M , en distinguant la partie réelle, imaginaire et la phase :

$$\langle \beta' \gamma' | \beta \gamma \rangle = \left(\frac{\hbar^2}{\Delta} \right)^{1/4} e^M e^{i\frac{\theta}{2}}$$

$$\text{Re}\{M\} = -\frac{1}{4\Delta} [(\langle x \rangle - \langle x' \rangle)^2(\phi + \phi') + (\langle p \rangle - \langle p' \rangle)^2(\chi + \chi') - 2(\sigma + \sigma')(\langle x \rangle - \langle x' \rangle)(\langle p \rangle - \langle p' \rangle)] \quad (\text{E.37})$$

$$\text{Im}\{M\} = -\frac{1}{2\hbar\Delta} [(\langle x \rangle - \langle x' \rangle)^2(\sigma' \phi - \sigma \phi') + (\langle p \rangle - \langle p' \rangle)^2(\sigma \chi' - \sigma' \chi) + 2(\langle x \rangle - \langle x' \rangle)(\langle p \rangle - \langle p' \rangle) \left(\frac{\hbar^2}{4} - \sigma \sigma' \right) + 2(\langle x \rangle - \langle x' \rangle)(\langle p \rangle \chi \phi' + \langle p' \rangle \chi' \phi)] \quad (\text{E.38})$$

$$\theta = \text{ArcTan} \left(\frac{2(\sigma \chi' - \sigma' \chi)}{\hbar(\chi + \chi')} \right) \quad (\text{E.39})$$

Ainsi, pour deux états cohérents 1 et 2, dans l'espace des phases (position-nombre d'onde) à 1-dimension, le produit scalaire s'exprime ainsi :

$$|\langle 1|2 \rangle_x| = \frac{1}{\Delta_{12}^{-1/4}} \times \quad (\text{E.40})$$

$$\times \text{Exp} \left(-\frac{1}{4\Delta_{12}} ((\phi_1 + \phi_2)(x_1 - x_2)^2 + (\chi_1 + \chi_2)(k_1 - k_2)^2 - 2(\sigma_1 + \sigma_2)(k_1 - k_2)(x_1 - x_2)) \right)$$

avec $\Delta_{12} = (\chi_1 + \chi_2)(\phi_1 + \phi_2) - (\sigma_1 + \sigma_2)^2$

On remarquera qu'à nouveau, le produit scalaire ne prend pas comme valeur 0 ou 1 uniquement. Sa valeur est réelle et est comprise en 0 et 1.

Bibliographie

- [Aic91] Jörg AICHELIN. « “Quantum” molecular dynamics—a dynamical microscopic n-body approach to investigate fragment formation and the nuclear equation of state in heavy ion collisions ». In : *Physics Reports* 202.5–6 (1991), p. 233–360. ISSN : 0370-1573. DOI : [https://doi.org/10.1016/0370-1573\(91\)90094-3](https://doi.org/10.1016/0370-1573(91)90094-3). URL : <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0370157391900943>.
- [Ang04] I. ANGELI. « A consistent set of nuclear rms charge radii : properties of the radius surface $R(N,Z)$ ». In : *Atomic Data and Nuclear Data Tables* 87.2 (2004), p. 185–206. ISSN : 0092-640X. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.adt.2004.04.002>. URL : <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0092640X04000166>.
- [Bal75] Radu. BALESCU. *Equilibrium and nonequilibrium statistical mechanics / Radu Balescu*. English. Wiley New York, 1975, xiv, 742 p. : ISBN : 0471046000.
- [Bas+98] S.A. BASS et al. « Microscopic models for ultrarelativistic heavy ion collisions ». In : *Progress in Particle and Nuclear Physics* 41 (1998), p. 255–369. ISSN : 0146-6410. DOI : [https://doi.org/10.1016/S0146-6410\(98\)00058-1](https://doi.org/10.1016/S0146-6410(98)00058-1). URL : <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0146641098000581>.
- [BB36] H. A. BETHE et R. F. BACHER. « Nuclear Physics A. Stationary States of Nuclei ». In : *Rev. Mod. Phys.* 8 (2 1936), p. 82–229. DOI : 10.1103/RevModPhys.8.82. URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.8.82>.
- [BBDG87] W. BAUER, G. F. BERTSCH et S. DAS GUPTA. « Fluctuations and clustering in heavy-ion collisions ». In : *Phys. Rev. Lett.* 58 (9 1987), p. 863–866. DOI : 10.1103/PhysRevLett.58.863. URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.58.863>.
- [BCS57] J. BARDEEN, L. N. COOPER et J. R. SCHRIEFFER. « Theory of Superconductivity ». In : *Phys. Rev.* 108 (5 1957), p. 1175–1204. DOI : 10.1103/PhysRev.108.1175. URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.108.1175>.
- [BEM16a] Z. BASRAK, P. EUDES et V. de la MOTA. « Aspects of the momentum dependence of the equation of state and of the residual NN cross section, and their effects on nuclear stopping ». In : *Phys. Rev. C* 93 (5 2016), p. 054609. DOI : 10.1103/PhysRevC.93.054609. URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.93.054609>.
- [BEM16b] Z. BASRAK, P. EUDES et V. de la MOTA. « Aspects of the momentum dependence of the equation of state and of the residual NN cross section, and their effects on nuclear stopping ». In : *Phys. Rev. C* 93 (5 2016), p. 054609. DOI : 10.1103/PhysRevC.93.054609. URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.93.054609>.

- [Bet68] H. A. BETHE. « Thomas-Fermi Theory of Nuclei ». In : *Phys. Rev.* 167 (4 1968), p. 879–907. DOI : 10.1103/PhysRev.167.879. URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.167.879>.
- [Bla80] J.P. BLAIZOT. « Nuclear compressibilities ». In : *Physics Reports* 64.4 (1980), p. 171–248. ISSN : 0370-1573. DOI : [http://dx.doi.org/10.1016/0370-1573\(80\)90001-0](http://dx.doi.org/10.1016/0370-1573(80)90001-0). URL : <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0370157380900010>.
- [Blo+78] J BLOCKI et al. « One-body dissipation and the super-viscosity of nuclei ». In : *Annals of Physics* 113.2 (1978), p. 330–386. ISSN : 0003-4916. DOI : [http://dx.doi.org/10.1016/0003-4916\(78\)90208-7](http://dx.doi.org/10.1016/0003-4916(78)90208-7). URL : <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0003491678902087>.
- [Bog46] N. N. BOGOLIUBOV. « Kinetic Equations ». In : *Journal of Physics USSR* 10.3 (1946), 265–274.
- [Bon+14] E. BONNET et al. « Investigation of collective radial expansion and stopping in heavy ion collisions at Fermi energies ». In : *Phys. Rev. C* 89 (3 2014), p. 034608. DOI : 10.1103/PhysRevC.89.034608. URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.89.034608>.
- [BT81] D.M. BRINK et M. Di TORO. « Dynamics of a semiclassical nuclear Hartree-Fock fluid ». In : *Nuclear Physics A* 372.1 (1981), p. 151–172. ISSN : 0375-9474. DOI : [http://dx.doi.org/10.1016/0375-9474\(81\)90093-2](http://dx.doi.org/10.1016/0375-9474(81)90093-2). URL : <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0375947481900932>.
- [BW39] Niels BOHR et John Archibald WHEELER. « The Mechanism of Nuclear Fission ». In : *Phys. Rev.* 56 (5 1939), p. 426–450. DOI : 10.1103/PhysRev.56.426. URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.56.426>.
- [Cha+97] E. CHABANAT et al. « A Skyrme parametrization from subnuclear to neutron star densities ». In : *Nuclear Physics A* 627.4 (1997), p. 710–746. ISSN : 0375-9474. DOI : [http://dx.doi.org/10.1016/S0375-9474\(97\)00596-4](http://dx.doi.org/10.1016/S0375-9474(97)00596-4). URL : <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0375947497005964>.
- [Cha+98] E. CHABANAT et al. « A Skyrme parametrization from subnuclear to neutron star densities Part II. Nuclei far from stabilities ». In : *Nuclear Physics A* 635.1 (1998), p. 231–256. ISSN : 0375-9474. DOI : [http://dx.doi.org/10.1016/S0375-9474\(98\)00180-8](http://dx.doi.org/10.1016/S0375-9474(98)00180-8). URL : <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0375947498001808>.
- [Che68] CHEN. « VEGAS : A Monte Carlo Simulation of Intranuclear Cascades ». In : *Phys. Rev.* 166 (1968), p. 949.
- [Col] FAZIA COLLABORATION. *European initiative for a next-generation charged particle array*. URL : <http://fazia.in2p3.fr/?lang=en>.
- [Dan95] P. DANIELEWICZ. « Effects of compression and collective expansion on particle emission from central heavy ion reactions ». In : *Phys. Rev. C* 51 (1995), p. 716–750. DOI : 10.1103/PhysRevC.51.716. arXiv : nucl-th/9408018 [nucl-th].

- [DFT84] J. DOBACZEWSKI, H. FLOCARD et J. TREINER. « Hartree-Fock-Bogolyubov description of nuclei near the neutron-drip line ». In : *Nuclear Physics A* 422.1 (1984), p. 103–139. ISSN : 0375-9474. DOI : [http://dx.doi.org/10.1016/0375-9474\(84\)90433-0](http://dx.doi.org/10.1016/0375-9474(84)90433-0). URL : <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0375947484904330>.
- [DH82] C. O. DORSO et E. S. HERNÁNDEZ. « Lifetime of interference effects in collisional time-dependent Hartree-Fock dynamics ». In : *Phys. Rev. C* 26 (2 1982), p. 528–541. DOI : 10.1103/PhysRevC.26.528. URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.26.528>.
- [DLL02] Paweł DANIELEWICZ, Roy LACEY et William G. LYNCH. « Determination of the Equation of State of Dense Matter ». In : *Science* 298.5598 (2002), p. 1592–1596. ISSN : 0036-8075. DOI : 10.1126/science.1078070. eprint : <http://science.sciencemag.org/content/298/5598/1592.full.pdf>. URL : <http://science.sciencemag.org/content/298/5598/1592>.
- [DLMS01] V. DE LA MOTA et F. SEBILLE. « Dissipative and fluctuating effects in nuclear dynamics with a wavelet representation ». In : *European Physical Journal A* 12 (2001), p. 479–486. URL : <http://hal.in2p3.fr/in2p3-00021473>.
- [Dur92] D. DURAND. « An event generator for the study of nuclear collisions in the Fermi energy domain (I). Formalism and first applications ». In : *Nuclear Physics A* 541.2 (1992), p. 266–294. ISSN : 0375-9474. DOI : [http://dx.doi.org/10.1016/0375-9474\(92\)90097-4](http://dx.doi.org/10.1016/0375-9474(92)90097-4). URL : <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0375947492900974>.
- [Dut+12] M. DUTRA et al. « Skyrme interaction and nuclear matter constraints ». In : *Phys. Rev. C* 85 (3 2012), p. 035201. DOI : 10.1103/PhysRevC.85.035201. URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.85.035201>.
- [Ein05] Albert EINSTEIN. « Über die von der molekularkinetischen Theorie der Wärme geforderte Bewegung von in ruhenden Flüssigkeiten suspendierten Teilchen ». In : *Annalen der Physik*. 322.8 (1905), 549–560.
- [Fel90] H. FELDMEIERS. « Fermionic molecular dynamics ». In : *Nuclear Physics A* 515.1 (1990), p. 147–172. ISSN : 0375-9474. DOI : [http://dx.doi.org/10.1016/0375-9474\(90\)90328-J](http://dx.doi.org/10.1016/0375-9474(90)90328-J). URL : <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/037594749090328J>.
- [Fer28] E. FERMI. « Eine statistische Methode zur Bestimmung einiger Eigenschaften des Atoms und ihre Anwendung auf die Theorie des periodischen Systems der Elemente ». In : *Zeitschrift für Physik* 48.1 (1928), p. 73–79. ISSN : 0044-3328. DOI : 10.1007/BF01351576. URL : <http://dx.doi.org/10.1007/BF01351576>.
- [FIG10] Sébastien FIGEROU. « Dynamique de la fragmentation nucléaire : étude des transitions de structure au sein des astres compacts ». Thèse de doct. Université de NANTES, 2010.

- [Fé+16] A. Le FÉVRE et al. « FRIGA, A New Approach To Identify Isotopes and Hypernuclei In N-Body Transport Models ». In : *Journal of Physics : Conference Series* 668.1 (2016), p. 012021. URL : <http://stacks.iop.org/1742-6596/668/i=1/a=012021>.
- [GJ84] LEFORT Marc GALIN JOEL. *Faisceaux d'ions lourds, collisions nucléaires et macrophysique du noyau*. 1984. URL : https://www.canal-u.tv/video/cerimes/faisceaux_d_ions_lourds_collisions_nucleaires_et_macrophysique_du_noyau.9168.
- [Gla63a] Roy J. GLAUBER. « Coherent and Incoherent States of the Radiation Field ». In : *Phys. Rev.* 131 (6 1963), p. 2766–2788. DOI : 10.1103/PhysRev.131.2766. URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.131.2766>.
- [Gla63b] Roy J. GLAUBER. « The Quantum Theory of Optical Coherence ». In : *Phys. Rev.* 130 (6 1963), p. 2529–2539. DOI : 10.1103/PhysRev.130.2529. URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.130.2529>.
- [Gog75] D. GOGNY. « International Conference on Nuclear Selfconsistent Fields ». In : *Proceedings of International Conference on Nuclear Selfconsistent Field*. Sous la dir. d'Amsterdam NORTH HOLLAND. 1975, p. 176,209,265,266.
- [GQ80] M. J. GIANNONI et P. QUENTIN. « Mass parameters in the adiabatic time-dependent Hartree-Fock approximation. II. Results for the isoscalar quadrupole mode ». In : *Phys. Rev. C* 21 (5 1980), p. 2076–2093. DOI : 10.1103/PhysRevC.21.2076. URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.21.2076>.
- [Gro84] D.H.E. GROSS. « Nuclear physics with heavy ions — Many body systems with specific flavour ». In : *Nuclear Physics A* 428 (1984), p. 313–325. ISSN : 0375-9474. DOI : [http://dx.doi.org/10.1016/0375-9474\(84\)90260-4](http://dx.doi.org/10.1016/0375-9474(84)90260-4). URL : <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0375947484902604>.
- [Har+89] C. HARTNACK et al. « Quantum molecular dynamics a microscopic model from {UNILAC} to {CERN} energies ». In : *Nuclear Physics A* 495.1–2 (1989), p. 303–319. ISSN : 0375-9474. DOI : [https://doi.org/10.1016/0375-9474\(89\)90328-X](https://doi.org/10.1016/0375-9474(89)90328-X). URL : <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/037594748990328X>.
- [Hel75] Eric J. HELLER. « Time-dependent approach to semiclassical dynamics ». In : *The Journal of Chemical Physics* 62.4 (1975), p. 1544–1555. DOI : 10.1063/1.430620. eprint : <http://dx.doi.org/10.1063/1.430620>. URL : <http://dx.doi.org/10.1063/1.430620>.
- [Hel76] Eric J. HELLER. « Time dependent variational approach to semiclassical dynamics ». In : *The Journal of Chemical Physics* 64.1 (1976), p. 63–73. DOI : 10.1063/1.431911. eprint : <http://dx.doi.org/10.1063/1.431911>. URL : <http://dx.doi.org/10.1063/1.431911>.
- [Hel77] Eric J. HELLER. « Phase space interpretation of semiclassical theory ». In : *The Journal of Chemical Physics* 67.7 (1977), p. 3339–3351. DOI : 10.1063/1.435296. eprint : <http://dx.doi.org/10.1063/1.435296>. URL : <http://dx.doi.org/10.1063/1.435296>.

BIBLIOGRAPHIE

- [Hor+14] C. J. HOROWITZ et al. « A way forward in the study of the symmetry energy : experiment, theory, and observation ». In : *J. Phys.* G41 (2014), p. 093001. DOI : 10.1088/0954-3899/41/9/093001. arXiv : 1401.5839 [nucl-th].
- [HSG46] Max Born et HERBERT S. GREEN. « A General Kinetic Theory of Liquids I : The Molecular Distribution Functions ». In : *Proceedings of the Royal Society A* 188 (1946), p. 10–18.
- [HW01] Muhsin N. HARAKEH et Adriaan van der WOUDE. *Giant Resonances, Fundamental High-Frequency Modes of Nuclear Excitation*. Oxford Studies in Nuclear Physics, 2001.
- [JOU96] Bruno JOUAULT. « Application de l'analyse en ondelettes à l'étude de l'espace des phases nucléaire ». Thèse de doct. Université de NANTES, 1996.
- [JSDLM98] B. JOUAULT, F. SEBILLE et V. DE LA MOTA. « Wavelet representation of the nuclear dynamics. » In : *Nuclear Physics A* 268 (1998), p. 119–. URL : <http://hal.in2p3.fr/in2p3-00000662>.
- [Kir46] John G. KIRKWOOD. « The Statistical Mechanical Theory of Transport Processes I. General Theory ». In : *The Journal of Chemical Physics* 14.3 (1946), p. 180–201. DOI : 10.1063/1.1724117. eprint : <http://dx.doi.org/10.1063/1.1724117>. URL : <http://dx.doi.org/10.1063/1.1724117>.
- [KK76] A.K KERMAN et S.E KOONIN. « Hamiltonian formulation of time-dependent variational principles for the many-body system ». In : *Annals of Physics* 100.1 (1976), p. 332–358. ISSN : 0003-4916. DOI : [http://dx.doi.org/10.1016/0003-4916\(76\)90065-8](http://dx.doi.org/10.1016/0003-4916(76)90065-8). URL : <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0003491676900658>.
- [Kox+87] S. KOX et al. « Trends of total reaction cross sections for heavy ion collisions in the intermediate energy range ». In : *Phys. Rev. C* 35 (5 1987), p. 1678–1691. DOI : 10.1103/PhysRevC.35.1678. URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.35.1678>.
- [LAC99] Denis LACROIX. « Aspects quantiques et dissipatifs dans la structure et la dynamique nucléaire ». Thèse de doct. Université de CAEN, 1999.
- [Lee95] Hai-Woong LEE. « Theory and application of the quantum phase-space distribution functions ». In : *Physics Reports* 259.3 (1995), p. 147–211. ISSN : 0370-1573. DOI : [https://doi.org/10.1016/0370-1573\(95\)00007-4](https://doi.org/10.1016/0370-1573(95)00007-4). URL : <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0370157395000074>.
- [Leh+10] G. LEHAUT et al. « Study of Nuclear Stopping in Central Collisions at Intermediate Energies ». In : *Phys. Rev. Lett.* 104 (23 2010), p. 232701. DOI : 10.1103/PhysRevLett.104.232701. URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.104.232701>.
- [LG76] Peter C. LICHTNER et James J. GRIFFIN. « Evolution of a Quantum System : Lifetime of a Determinant ». In : *Phys. Rev. Lett.* 37 (23 1976), p. 1521–1524. DOI : 10.1103/PhysRevLett.37.1521. URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.37.1521>.

- [Lib71] NAG Fortran LIBRARY. *E02ACF*. 1971. URL : <https://www.nag.co.uk/numeric/fl/manual/pdf/E02/e02acf.pdf>.
- [Lop+14a] O. LOPEZ et al. « In-medium effects for nuclear matter in the Fermi-energy domain ». In : *Phys. Rev. C* 90 (6 2014), p. 064602. DOI:10.1103/PhysRevC.90.064602. URL:<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.90.064602>.
- [Lop+14b] O. LOPEZ et al. « In-medium effects for nuclear matter in the Fermi-energy domain ». In : *Phys. Rev. C* 90 (6 2014), p. 064602. DOI:10.1103/PhysRevC.90.064602. URL:<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.90.064602>.
- [LS14] James M. LATTIMER et Andrew W. STEINER. « Constraints on the symmetry energy using the mass-radius relation of neutron stars ». In : *The European Physical Journal A* 50.2 (2014), p. 40. ISSN : 1434-601X. DOI:10.1140/epja/i2014-14040-y. URL:<http://dx.doi.org/10.1140/epja/i2014-14040-y>.
- [LVLD04] Denis LACROIX, Aymeric VAN LAUWE et Dominique DURAND. « Event generator for nuclear collisions at intermediate energies ». In : *Phys. Rev. C* 69 (5 2004), p. 054604. DOI:10.1103/PhysRevC.69.054604. URL:<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.69.054604>.
- [Max67] J. Clerk MAXWELL. « On the Dynamical Theory of Gases ». In : *Phil. Trans. R. Soc. Lond.* 157 (1867), p. 49–88.
- [Mil+62] J. MILLER et al. « Reactions (γ , n) dans C12, O16 et Ca40 ». In : *Physics Letters* 2.2 (1962), p. 76–78. ISSN : 0031-9163. DOI: [http://dx.doi.org/10.1016/0031-9163\(62\)90156-7](http://dx.doi.org/10.1016/0031-9163(62)90156-7). URL:<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0031916362901567>.
- [MSE13] V. de la MOTA, F. SEBILLE et Ph. EUDES. « A dynamical description of neutron star crusts ». In : *J. Phys. Conf. Ser.* 420 (2013), p. 012146. DOI:10.1088/1742-6596/420/1/012146. arXiv : 1209.1488 [astro-ph.SR].
- [Mye77] W. D. MYERS. *Droplet Model of Atomic Nuclei*. 1st. Springer, 1977.
- [Nap+10] P. NAPOLITANI et al. « Probing the nuclear equation of state in heavy-ion collisions at Fermi energy in isospin-sensitive exclusive experiments ». In : *Phys. Rev. C* 81 (4 2010), p. 044619. DOI:10.1103/PhysRevC.81.044619. URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.81.044619>.
- [Nap17] Paolo NAPOLITANI. « Violent Nuclear Reactions : Large-Amplitude Nuclear Dynamic Phenomena in Fermionic Systems ». Habilitation à diriger des recherches. Université Paris Sud, Orsay, 2017. URL:<https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-01524570>.
- [NNDC] Brookhaven National Laboratory NATIONAL NUCLEAR DATA CENTER. NNDC. URL : <http://www.nndc.bnl.gov/nudat2/>.
- [NW29] J. V. NEUMANN et E. P. WIGNER. In : *Zeitschrift für Physik* 30.76 (1929), p. 427.

- [Ono+92] Akira ONO et al. « Antisymmetrized Version of Molecular Dynamics with Two-Nucleon Collisions and Its Application to Heavy Ion Reactions ». In : *Progress of Theoretical Physics* 87.5 (1992), p. 1185. DOI : [10 . 1143 / ptp / 87 . 5 . 1185](https://doi.org/10.1143/ptp/87.5.1185). eprint : [/oup/backfile/content_public/journal/ptp/87/5/10.1143/ptp/87.5.1185/2/87-5-1185.pdf](http://oup/backfile/content_public/journal/ptp/87/5/10.1143/ptp/87.5.1185/2/87-5-1185.pdf). URL : [+http://dx.doi.org/10.1143/ptp/87.5.1185](http://dx.doi.org/10.1143/ptp/87.5.1185).
- [Pag+04] A. PAGANO et al. « Fragmentation studies with the CHIMERA detector at LNS in Catania : recent progress ». In : *Nuclear Physics A* 734 (2004), p. 504–511. ISSN : 0375-9474. DOI : [http : / / dx . doi . org / 10 . 1016 / j . nuclphysa . 2004 . 01 . 093](http://dx.doi.org/10.1016/j.nuclphysa.2004.01.093). URL : [http : / / www . sciencedirect . com/science/article/pii/S0375947404001137](http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0375947404001137).
- [Pea+91] J.M. PEARSON et al. « Thomas-Fermi approach to nuclear mass formula ». In : *Nuclear Physics A* 528.1 (1991), p. 1–47. ISSN : 0375-9474. DOI : [http://dx.doi.org/10.1016/0375-9474\(91\)90418-6](http://dx.doi.org/10.1016/0375-9474(91)90418-6). URL : <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0375947491904186>.
- [Per86] Askold PERELOMOV. *Generalized Coherent States and Their Applications*. Springer Berlin Heidelberg, 1986.
- [PMB01] Massimo PAPA, Toshiki MARUYAMA et Aldo BONASERA. « Constrained molecular dynamics approach to fermionic systems ». In : *Phys. Rev. C* 64 (2001), p. 024612. DOI : [10 . 1103 / PhysRevC . 64 . 024612](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.64.024612). URL : [https : / / link . aps . org / doi / 10 . 1103 / PhysRevC . 64 . 024612](https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.64.024612).
- [Pou+95] J. POUTHAS et al. « INDRA, a 4pi charged product detection array at GANIL ». In : *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A : Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* 357.2 (1995), p. 418–442. ISSN : 0168-9002. DOI : [http : / / dx . doi . org / 10 . 1016 / 0168 - 9002 \(94 \) 01543 - 0](http://dx.doi.org/10.1016/0168-9002(94)01543-0). URL : <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0168900294015430>.
- [PR87] C.J. PETHICK et D.G. RAVENHALL. « Instabilities in hot nuclear matter and the fragmentation process ». In : *Nuclear Physics A* 471.1 (1987), p. 19–34. ISSN : 0375-9474. DOI : [http://dx.doi.org/10.1016/0375-9474\(87\)90241-7](http://dx.doi.org/10.1016/0375-9474(87)90241-7). URL : <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0375947487902417>.
- [RCP] Cours Cnam RCP216. *Classification Automatique*. URL : <http://cedric.cnam.fr/vertigo/Cours/RCP216/coursClassificationAutomatique.html>.
- [RDH82] B. REMAUD, C. DORSO et E.S. HERNANDEZ. « Coherent state propagation in open systems ». In : *Physica A : Statistical Mechanics and its Applications* 112.1 (1982), p. 193–213. ISSN : 0378-4371. DOI : [http : / / dx . doi . org / 10 . 1016 / 0378 - 4371 \(82 \) 90214 - X](http://dx.doi.org/10.1016/0378-4371(82)90214-X). URL : <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/037843718290214X>.
- [Rei+97] W. REISDORF et al. « Central collisions of Au on Au at 150, 250 and 400 A·MeV ». In : *Nuclear Physics A* 612.3 (1997), p. 493–556. ISSN : 0375-9474. DOI : [http : / / dx . doi . org / 10 . 1016 / S0375 - 9474 \(96 \) 00388 - 0](http://dx.doi.org/10.1016/S0375-9474(96)00388-0). URL : <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0375947496003880>.

- [RG84] Erich RUNGE et E. K. U. GROSS. « Density-Functional Theory for Time-Dependent Systems ». In : *Phys. Rev. Lett.* 52 (12 1984), p. 997–1000. DOI : 10.1103/PhysRevLett.52.997. URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.52.997>.
- [RGO10] G. ROYER, M. GUILBAUD et A. ONILLON. « Macro-microscopic mass formulae and nuclear mass predictions ». In : *Nuclear Physics A* 847.1 (2010), p. 24–41. ISSN : 0375-9474. DOI : <http://dx.doi.org/10.1016/j.nuclphysa.2010.06.014>. URL : <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0375947410006020>.
- [RM82] A. K. RAJAGOPAL et John T. MARSHALL. « New coherent states with applications to time-dependent systems ». In : *Phys. Rev. A* 26 (5 1982), p. 2977–2980. DOI : 10.1103/PhysRevA.26.2977. URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.26.2977>.
- [RR09] G. ROYER et R. ROUSSEAU. « On the liquid drop model mass formulae and charge radii ». In : *The European Physical Journal A* 42.3 (2009), p. 541. ISSN : 1434-601X. DOI : 10.1140/epja/i2008-10745-8. URL : <http://dx.doi.org/10.1140/epja/i2008-10745-8>.
- [RS80] P. RING et P. SCHUCK. *The nuclear many-body problem*. New York : Springer-Verlag, 1980.
- [RZ08] G. ROYER et H. F. ZHANG. « Recent α decay half-lives and analytic expression predictions including superheavy nuclei ». In : *Phys. Rev. C* 77 (3 2008), p. 037602. DOI : 10.1103/PhysRevC.77.037602. URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.77.037602>.
- [SEB86] Francois SEBILLE. « Approche semi-classique de la dynamique des ions lourds aux energies intermediaires ». Thèse de doctorat d'état. Université de NANTES, 1986.
- [Sky58] T.H.R. SKYRME. « The effective nuclear potential ». In : *Nuclear Physics* 9.4 (1958), p. 615–634. ISSN : 0029-5582. DOI : [http://dx.doi.org/10.1016/0029-5582\(58\)90345-6](http://dx.doi.org/10.1016/0029-5582(58)90345-6). URL : <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0029558258903456>.
- [Sur95] Eric SURAUD. « Equations cinétiques en physique des ions lourds ». In : *Ecole Joliot-Curie de Physique Nucléaire* 322.8 (1995), p. 57–99.
- [Sur98] Eric SURAUD. *Physique des collisions nucléaires*. 2e. Paris : Paris : Hermann, 1998.
- [Swi51] W J SWIATECKI. « The Nuclear Surface Energy ». In : *Proceedings of the Physical Society. Section A* 64.3 (1951), p. 226. URL : <http://stacks.iop.org/0370-1298/64/i=3/a=302>.
- [Ter+96] J. TERASAKI et al. « 3D solution of Hartree-Fock-Bogoliubov equations for drip-line nuclei ». In : *Nuclear Physics A* 600.3 (1996), p. 371–386. ISSN : 0375-9474. DOI : [http://dx.doi.org/10.1016/0375-9474\(96\)00036-X](http://dx.doi.org/10.1016/0375-9474(96)00036-X). URL : <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S037594749600036X>.

- [Tho27] L. H. THOMAS. « The calculation of atomic fields ». In : *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society* 23.5 (1927), 542–548. DOI : 10.1017/S0305004100011683.
- [Ton+84] F. TONDEUR et al. « Static nuclear properties and the parametrisation of Skyrme forces ». In : *Nuclear Physics A* 420.2 (1984), p. 297–319. ISSN : 0375-9474. DOI : [http://dx.doi.org/10.1016/0375-9474\(84\)90444-5](http://dx.doi.org/10.1016/0375-9474(84)90444-5). URL : <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0375947484904445>.
- [Tsa+12] M. B. TSANG et al. « Constraints on the symmetry energy and neutron skins from experiments and theory ». In : *Phys. Rev. C* 86 (1 2012), p. 015803. DOI : 10.1103/PhysRevC.86.015803. URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.86.015803>.
- [TW82] C. TOEPFFER et Cheuk-Yin WONG. « Relaxation of some fermion nonequilibrium momentum distributions ». In : *Phys. Rev. C* 25 (2 1982), p. 1018–1027. DOI : 10.1103/PhysRevC.25.1018. URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.25.1018>.
- [VB72] D. VAUTHERIN et D. M. BRINK. « Hartree-Fock Calculations with Skyrme’s Interaction. I. Spherical Nuclei ». In : *Phys. Rev. C* 5 (3 1972), p. 626–647. DOI : 10.1103/PhysRevC.5.626. URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.5.626>.
- [VTV87] D. VAUTHERIN, J. TREINER et M. VÉNÉRONI. « Evolution of hot compressed nuclei in the time-dependent Hartree-Fock approximation ». In : *Physics Letters B* 191.1 (1987), p. 6–10. ISSN : 0370-2693. DOI : [http://dx.doi.org/10.1016/0370-2693\(87\)91311-6](http://dx.doi.org/10.1016/0370-2693(87)91311-6). URL : <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0370269387913116>.
- [Wei35] C. F. v. WEIZSÄCKER. « Zur Theorie der Kernmassen ». In : *Zeitschrift für Physik* 96.7 (1935), p. 431–458. ISSN : 0044-3328. DOI : 10.1007/BF01337700. URL : <http://dx.doi.org/10.1007/BF01337700>.
- [WM77] Cheuk-Yin WONG et John A. McDONALD. « Dynamics of nuclear fluid. III. General considerations on the kinetic theory of quantum fluids ». In : *Phys. Rev. C* 16 (3 1977), p. 1196–1215. DOI : 10.1103/PhysRevC.16.1196. URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.16.1196>.
- [WS54] Roger D. WOODS et David S. SAXON. « Diffuse Surface Optical Model for Nucleon-Nuclei Scattering ». In : *Phys. Rev.* 95 (2 1954), p. 577–578. DOI : 10.1103/PhysRev.95.577. URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.95.577>.
- [WT79] Cheuk-Yin WONG et Henry H. K. TANG. « Dynamics of nuclear fluid. V. Extended time-dependent Hartree-Fock approximation illuminates the approach to thermal equilibrium ». In : *Phys. Rev. C* 20 (4 1979), p. 1419–1452. DOI : 10.1103/PhysRevC.20.1419. URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.20.1419>.
- [Xu+16] Jun XU et al. « Understanding transport simulations of heavy-ion collisions at 100A and 400A MeV : Comparison of heavy-ion transport codes under controlled conditions ». In : *Phys. Rev. C* 93.4 (2016), p. 044609. DOI : 10.1103/PhysRevC.93.044609. arXiv : 1603.08149 [nucl-th].

-
- [Yvo35] Jacques YVON. « La théorie statistique des fluides et l'équation d'état ». In : *Actualités scientifiques et industrielles* 203 (1935).
- [ZFG90] Wei-Min ZHANG, Da Hsuan FENG et Robert GILMORE. « Coherent states : Theory and some applications ». In : *Rev. Mod. Phys.* 62 (4 1990), p. 867–927. DOI : 10.1103/RevModPhys.62.867. URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.62.867>.
- [Zha+06] Hongfei ZHANG et al. « α decay half-lives of new superheavy nuclei within a generalized liquid drop model ». In : *Phys. Rev. C* 74 (1 2006), p. 017304. DOI : 10.1103/PhysRevC.74.017304. URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.74.017304>.
- [Zha+12] Yingxun ZHANG et al. « Effect of isospin-dependent cluster recognition on the observables in heavy ion collisions ». In : *Phys. Rev. C* 85 (5 2012), p. 051602. DOI : 10.1103/PhysRevC.85.051602. URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.85.051602>.

Thèse de Doctorat

Grégoire BESSE

Description théorique de la dynamique nucléaire lors de collisions d'ions lourds aux énergies de Fermi

Résumé

Le cadre général de la thèse porte sur la physique nucléaire dans le domaine des énergies basses et intermédiaires, les énergies incidentes pouvant aller d'une dizaine de MeV et atteindre des énergies de l'ordre de l'énergie de Fermi. Ce travail consistera essentiellement en l'élaboration de modèles microscopiques décrivant le problème à N - corps nucléaire, dans le but de fournir des outils théoriques adaptés à l'étude de phénomènes en liaison directe avec des programmes expérimentaux internationaux tels que LNL-FAZIA, GANIL-Spiral 2, GSI-FAIR et LBL-FRIB. Ces nouveaux dispositifs expérimentaux produiront des faisceaux radioactifs de grande qualité qui vont nous permettre d'explorer la matière nucléaire bien loin de ses conditions de stabilité, notamment en isospin, et par conséquent d'avancer dans la compréhension des interactions fondamentales.

Des applications interdisciplinaires dans le domaine des astres compacts sont envisageables comme conséquence de la poursuite de ces travaux. En effet, l'astrophysique et la physique nucléaire sont deux disciplines qui s'entrelacent de façon inextricable. En particulier, les expériences avec les nouveaux faisceaux radioactifs nous permettront d'obtenir des informations sur les isotopes rares ayant un rôle important dans des processus astrophysiques, et de répondre à des questions fondamentales concernant la nature des étoiles à neutrons.

Mots clés

N-Corps Quantique, ETDHF, Collisions ions lourds, Noyaux exotiques, Force de Skyrme, Etats-cohérents, Equation d'Etat, Fluctuations

Abstract

This PhD-work is about nuclear physics for low and intermediate energies, the incident energy from tens MeV to energies about the Fermi-energy. This work consists essentially in the development of microscopic models describing the N-body nuclear problem, the main goal is to provide some theoretical tools adapted to the study of phenomena linked to international experimental programs such as LNL-FAZIA, GANIL-Spiral 2, GSI-FAIR and LBL-FRIB. These new experiments will produce high-quality radioactive beams that will provide us to explore nuclear matter far from stability, especially in isospin and therefore to progress in the comprehension of fundamental interactions.

Interdisciplinary applications in the field of compact stars can be envisaged as due to this work. Indeed, astrophysics and nuclear physics are two disciplines that intertwine inextricably. In particular, experiments with new radioactive beams will enable us to obtain information on rare isotopes having an important role in astrophysical processes and to answer basic questions about the nature of neutron stars.

Key Words

Quantum N-Body, ETDHF, Heavy ions collision, Exotic Nuclei, Skyrme force, Coherents-States, Equation of State, Fluctuations