

THEORIE SEMI-CLASSIQUE DE LA STRUCTURE NUCLEAIRE

M. Brack

Institut für Theoretische Physik der Universität
Universitätsstrasse 31, D-8400 Regensburg

Table des matières

1. Introduction
2. Modèle Thomas-Fermi généralisé (ETF)
 - a) Développement Wigner-Kirkwood (WK)
 - b) Relation avec le lissage numérique de Strutinsky
 - c) Le problème des points tournants
 - d) Les fonctionnelles $\tau_{\text{ETF}}[\rho]$ et $\vec{J}_{\text{ETF}}[\rho]$
3. Application du modèle ETF
 - a) Calculs variationnels pour des noyaux sphériques et déformés
 - b) Calculs ETF à température finie
 - c) Développement leptodermique et paramètres de la goutte liquide
 - d) Autres applications
4. Resommation partielle de la série WK

1. Introduction

La description self-consistente des propriétés statiques des noyaux à partir d'une force effective nucléon-nucléon connu un grand succès depuis une douzaine d'années. En particulier, le développement des forces phénoménologiques de type Skyrme [1], grâce à leur forme mathématique simple a permis le calcul purement microscopique à l'approximation Hartree-Fock (HF) des énergies de liaison, des densités de nucléons, et même des barrières de fission réalistes [2-3]. L'énergie totale HF - à part l'énergie Coulombienne - s'écrit pour une force de Skyrme sous la forme [1]

$$E_{HF} = \int d^3r \mathcal{E}_{sky} [\tau, \rho, \vec{J}], \quad (1)$$

où $\mathcal{E}_{sky}[\tau, \rho, \vec{J}]$ est une fonction des densités et leurs dérivées:

$$\begin{aligned} \rho(\vec{r}) &= \sum_i |\varphi_i(\vec{r})|^2 n_i, & \tau(\vec{r}) &= \sum_i |\vec{\nabla} \varphi_i(\vec{r})|^2 n_i, \\ \vec{J}(\vec{r}) &= -i \sum_{\nu} \varphi_{\nu}^*(\vec{r}) (\vec{\nabla} \times \vec{\sigma}) \varphi_{\nu}(\vec{r}) n_{\nu}, \end{aligned} \quad (2)$$

définies à l'aide des fonctions d'onde de nucléons indépendants $\varphi_i(\vec{r})$ et des nombres d'occupation n_i . (Nous supprimons dans les symboles $\rho, \tau, \vec{J}, \varphi_i$ un index n ou p indiquant des neutrons ou protons qui doivent toujours être considérés séparément.) Bien que l'approximation HF en soi ne permette pas de décrire des corrélations entre les nucléons, le fait que l'énergie HF se présente comme une fonctionnelle de densités locales - dont les paramètres, c.à.d. ceux de la force de Skyrme, sont ajustés pour reproduire des données expérimentales - indique qu'effectivement, des corrélations sont bien incluses dans E_{HF} , grâce au théorème de Hohenberg et Kohn [4] et au formalisme de Kohn et Sham [5]. Ceci s'accorde avec la construction explicite d'une fonctionnelle de type Skyrme à partir d'une matrice G obtenue dans un calcul Brückner-Bethe-HF [6].

Les temps de calcul HF étant assez longs pour des noyaux déformés - surtout s'il s'agit de calculs sous contrainte pour obtenir des barrières de fission - on a intérêt à développer et utiliser des méthodes d'approximation efficaces, permettant cependant de maintenir le caractère self-consistent des calculs. La méthode dite "des corrections de couche" proposé par Strutinsky [7] peut servir ce but sous certaines conditions [8].

Supposons que la matrice densité HF puisse être décomposée de la façon suivante

$$\rho_{HF} = \tilde{\rho} + \delta\rho, \quad (3)$$

où $|\delta\rho| \ll |\tilde{\rho}|$. On peut alors développer l'énergie HF autour de $\tilde{\rho}$ et on trouve le théorème de Strutinsky [7-9]

$$E_{HF} = E_{HF}[\tilde{\rho}] + \delta_1 E + \sigma[(\delta\rho)^2], \quad (4)$$

où la correction de couche $\delta_1 E$ est définie par

$$\delta_1 E = \sum_i \hat{\epsilon}_i (n_i - \tilde{n}_i). \quad (5)$$

Dans (5), $\hat{\epsilon}_i$ sont les énergies propres de l'Hamiltonien HF moyen:

$$\tilde{H} \hat{\psi}_i = \hat{\epsilon}_i \hat{\psi}_i; \quad \tilde{H} = H_{HF}[\tilde{\rho}]; \quad (6)$$

n_i et \tilde{n}_i sont respectivement les nombres d'occupation HF et ceux obtenue à l'aide d'un lissage de Strutinsky [7,9]. Dans la méthode des corrections de couche, telle qu'elle est pratiquée, on remplace dans (4) $E[\tilde{\rho}]$ par l'énergie du modèle de la goutte liquide (E_{LDM}), la correction $\delta_1 E$ (5) est définie par les énergies propres ϵ_i d'un potentiel moyen phénoménologique (Nilsson, Woods-Saxon, etc.), et les termes en $(\delta\rho)^2$ et d'ordres supérieurs sont négligés. Des testes numériques avec des forces de Skyrme ont montré que la série (4) converge très rapidement. En fait, si $\tilde{\rho}$, $E[\tilde{\rho}]$ et $H[\tilde{\rho}]$ sont calculés d'une façon self-consistante, on peut négliger tous les termes au delà de $\delta_1 E$ [8]. Dans ces calculs, on a défini la matrice densité moyenne $\tilde{\rho}$ à l'aide du lissage de Strutinsky:

$$\tilde{\rho}_{\alpha\beta} = \sum_i \langle \alpha | i \rangle \langle i | \beta \rangle \tilde{n}_i. \quad (7)$$

(Donc, en pratique, on remplace les n_i dans la définition des densités locales (2) par les \tilde{n}_i .) Dans la réf. [8] on a montré que la solution $\tilde{\rho}_{\alpha\beta}$ d'un calcul selfconsistant (obtenue par itérations, comme d'habitude) forme un système variationnel auquel on peut appliquer le théorème de Hohenberg et Kohn [4]. En conséquence, l'énergie moyenne $\tilde{E}_{HF} \equiv E_{HF}[\tilde{\rho}]$ peut s'écrire comme une fonctionnelle de la densité locale $\tilde{\rho}(r)$:

$$\tilde{E}_{HF} = E_{HF}[\tilde{\rho}] = \int d^3r \tilde{E}[\tilde{\rho}(\vec{r})]. \quad (8)$$

Puisque ce système lissé à la Strutinsky a un caractère semi-classique (voir sect. 2.b), on peut réaliser le calcul self-consistent des quantités moyennes \tilde{E}_{HF} , $\tilde{\rho}$ et $H_{HF}[\tilde{\rho}]$ sans utiliser des fonctions d'ondes, mais en employant justement des méthodes semi-classiques et en particulier le modèle Thomas-Fermi généralisé (ETF) qui sera l'objet du chapitre 2, méthodes qui sont beaucoup plus rapides que les calculs HF. On peut ensuite inclure les effets de couche en perturbation par un calcul Strutinsky, ce qui est équivalent à une seule itération HF (voir aussi la méthode "EVM", réf. [10]).

L'objet des études semi-classiques est donc de calculer des densités, énergies et potentiels moyens self-consistents à partir d'une force effective - déterminée par des calculs HF sur des noyaux sphériques, où ils sont rapides - sans introduire aucun paramètre libre. Evidemment, ces calculs semi-classiques peuvent aider à redéterminer les paramètres de la force, en particulier en ce qui concerne les barrières de fission [3,11].

2. Modèle Thomas-Fermi généralisé

2.a) Développement Wigner-Kirkwood (WK)

Pour dériver les expressions et relations du modèle Thomas-Fermi généralisé (ETF), on se sert en général d'un développement semi-classique de la densité de Bloch introduit par Wigner [12] et Kirkwood [13]. La densité de Bloch est définie par

$$C(\vec{r}, \vec{r}'; \beta) = \langle \vec{r}' | e^{-\beta \hat{H}} | \vec{r} \rangle = \sum_i \varphi_i^*(\vec{r}') e^{-\beta \varepsilon_i} \varphi_i(\vec{r}), \quad (9)$$

où \hat{H} est un Hamiltonian à un corps avec le spectre $\{\varepsilon_i, \varphi_i\}$:

$$\hat{H} \varphi_i = \varepsilon_i \varphi_i. \quad (10)$$

En partant de $C(\vec{r}, \vec{r}'; \beta)$, on dérive la matrice densité par une transformation de Laplace inverse:

$$\rho(\vec{r}, \vec{r}') = \mathcal{L}_\lambda^{-1} \left[\frac{1}{\beta} G(\vec{r}, \vec{r}'; \beta) \right] = \frac{1}{2\pi i} \int_{C-i\infty}^{C+i\infty} e^{\lambda\beta} \frac{1}{\beta} G(\vec{r}, \vec{r}'; \beta) d\beta, \quad (11)$$

λ étant l'énergie de Fermi du système de particules indépendantes décrites par \hat{H} . (Toutes les formules données dans ce texte sont valables séparément pour chaque type de Fermions.) A partir de $\rho(\vec{r}, \vec{r}')$ on trouve aisément les densités locales qui nous intéressent dans le contexte des forces de Skyrme:

$$\begin{aligned} \rho(\vec{r}) &= \rho(\vec{r}, \vec{r}), \\ \tau(\vec{r}) &= \vec{\nabla}_r \cdot \vec{\nabla}_{r'} \rho(\vec{r}, \vec{r}') \Big|_{\vec{r}=\vec{r}'}, \\ \vec{j}(\vec{r}) &= -i (\vec{\sigma} \times \vec{\nabla}_r) \rho(\vec{r}, \vec{r}') \Big|_{\vec{r}=\vec{r}'}. \end{aligned} \quad (12)$$

Le développement Wigner-Kirkwood (WK) consiste à écrire

$$G(\vec{r}, \vec{r}'; \beta) = G_{TF}(\vec{r}, \vec{r}'; \beta) \times \phi(\vec{r}, \vec{r}'; \beta), \quad (13)$$

où $G_{TF}(\vec{r}, \vec{r}'; \beta)$ est la densité de Bloch classique (correspondant à la fonction de Green d'une particule indépendante dans un potentiel local $V(\vec{r})$):

$$G_{TF}(\vec{r}, \vec{r}'; \beta) = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2\beta} \right)^{3/2} e^{-\beta V(\frac{\vec{r}+\vec{r}'}{2})} e^{-\frac{m}{2\hbar^2\beta} (\vec{r}-\vec{r}')^2}; \quad (14)$$

la fonction inconnue $\phi(\vec{r}, \vec{r}'; \beta)$ est développée en puissances de \hbar :

$$\phi(\vec{r}, \vec{r}'; \beta) = 1 + \sum_{n \geq 0} \hbar^n \chi_n(\vec{r}, \vec{r}'; \beta). \quad (15)$$

Ceci se fait à l'aide d'un algorithme donné par Uhlenbeck et Beth [14]. Pour le cas d'un potentiel local ($\hat{H} = \hat{T} + V(\vec{r})$), les fonctions χ_n contiennent des dérivées du potentiel $V(\vec{r})$ jusqu'à l'ordre n . Pour un Hamiltonien de type Skyrme

$$\hat{H} = -\vec{\nabla} \cdot \frac{\hbar^2}{2m^*(\vec{r})} \vec{\nabla} + V(\vec{r}) - i \vec{W}(\vec{r}) \cdot (\vec{\sigma} \times \vec{\nabla}), \quad (16)$$

elles contiennent aussi des dérivées de la masse effective $m^*(\vec{r})$ et du potentiel spin-orbite $\vec{W}(\vec{r})$. (Dans ce cas, il faut remplacer m dans l'éq. (14) par

$$m^*(\frac{\vec{r}+\vec{r}'}{2})$$

En faisant la transformation éq. (11) terme par terme de la série ainsi obtenue pour $C(\vec{r}, \vec{r}'; \beta)$, on arrive à des développements des densités locales (12) en gradients du potentiel V (et de $m^*(\vec{r})$ et $\vec{W}(\vec{r})$):

$$\begin{aligned} \rho_{\text{ETF}}(\vec{r}) &= \rho_{\text{TF}}(\vec{r}) + \rho_2(\vec{r}) + \rho_4(\vec{r}) + \dots, \\ \tau_{\text{ETF}}(\vec{r}) &= \tau_{\text{TF}}(\vec{r}) + \tau_2(\vec{r}) + \tau_4(\vec{r}) + \dots, \\ \vec{J}_{\text{ETF}}(\vec{r}) &= \vec{J}_2(\vec{r}) + \vec{J}_4(\vec{r}) + \dots, \end{aligned} \quad (17)$$

où les indices indiquent l'ordre en \hbar inclu. (Les termes d'ordres impairs sont nuls pour un potentiel $V(\vec{r})$ analytique.) Nous donnons ici, comme illustration, les premiers termes pour le cas local ($m^*(\vec{r}) = m$)

$$\begin{aligned} \rho_{\text{TF}}(\vec{r}) &= \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} [\lambda - V(\vec{r})]^{3/2}, \\ \tau_{\text{TF}}(\vec{r}) &= \frac{1}{5\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{5/2} [\lambda - V(\vec{r})]^{5/2}, \\ \rho_2(\vec{r}) &= -\frac{1}{24\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{1/2} \left\{ [\lambda - V(\vec{r})]^{-1/2} \Delta V(\vec{r}) + \frac{1}{4} [\lambda - V]^{-3/2} (\vec{\nabla} V)^2 \right\}, \end{aligned} \quad (18)$$

$$\begin{aligned} \tau_2(\vec{r}) &= -\frac{1}{24\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \left\{ 5[\lambda - V]^{1/2} \Delta V - \frac{9}{4} [\lambda - V]^{-1/2} (\vec{\nabla} V)^2 \right\}, \\ \vec{J}_2(\vec{r}) &= -\frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{5/2} [\lambda - V]^{3/2} \vec{W}(\vec{r}). \end{aligned}$$

(Un facteur 2 de spin est inclu dans ces résultats.) Il faut remarquer que ces densités ne sont définies qu' à l'intérieur de la région accessible classiquement définie par

$$\lambda \geq V(\vec{r}); \quad (19)$$

au delà des points tournants classiques \vec{r}_λ - qui dans l'espace à 3 dimensions forment une surface - il faut annuler ces quantités. De plus, on se trouve confronté avec le problème de la divergence aux points tournants des corrections semiclassiques ρ_n , τ_n et \vec{J}_{n+2} pour $n \geq 2$. Nous reviendrons sur ce point dans la section 2.c).

Malgré ces divergences, on peut calculer avec cette méthode l'énergie totale E d'un système à N particules dans un potentiel $V(\vec{r})$. En fait, E et N sont données via la fonction de partition $Z(\beta)$

$$Z(\beta) = \int d^3r \, G(\vec{r}, \vec{r}' = \vec{r}; \beta) \quad (20)$$

par les formules suivantes

$$E = \mathcal{L}_\lambda^{-1} \left[-\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \beta} Z(\beta) \right], \quad N = \mathcal{L}_\lambda^{-1} \left[\frac{1}{\beta} Z(\beta) \right]. \quad (21)$$

Si on échange d'une façon appropriée la transformation de Laplace inverse et l'intégration spatiale [16, 17], on arrive à un développement de l'énergie E :

$$E = E_{TF} + E_2 + E_4 + \dots, \quad (22)$$

dont les termes E_2 , E_4 sont bien définis. La série (22) est semi-convergente: à partir d'un certain ordre (par exemple l'ordre 6 pour un oscillateur harmonique en 3 dimensions) on obtient des contributions infinies. La partie convergente de cette série sera appelée ici E_{ETF} . (Pour un exemple réaliste, voir table 1 ci-dessous).

La divergence des termes $\rho_2, \rho_4, \tau_2, \tau_4$ aux points tournants est spurieuse dans le sens suivant: Si on transforme $\rho_{ETF}(\vec{r}, \vec{r}')$ à l'espace de Wigner:

$$f_{\text{ETF}}(\vec{q}, \vec{p}) = \int d^3r \int d^3r' \rho_{\text{ETF}}(\vec{r}, \vec{r}') e^{i\vec{p} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} \delta(\vec{q} - \frac{\vec{r} + \vec{r}'}{2}), \quad (23)$$

on trouve qu'on a affaire à une distribution [18]

$$f_{\text{ETF}}(\vec{q}, \vec{p}) = \Theta[\lambda - H_{\text{cl}}(\vec{p}, \vec{q})] + \sum_{\nu > 0} g_{\nu}(\vec{p}, \vec{q}; \hbar) \delta^{(\nu-1)}[\lambda - H_{\text{cl}}]. \quad (24)$$

Nous attirons l'attention sur la thèse de Voros [18] pour une discussion des propriétés mathématiques de $f_{\text{ETF}}(\vec{p}, \vec{q})$ ainsi que pour la relation de ce développement avec la méthode WKB. Le fait important pour l'application présente est qu'on trouve des séries semi-convergentes pour toutes les quantités intégrées comme E , N , et des moments des densités, c.-à.d. pour toutes les valeurs moyennes d'opérateurs à un corps.

2.b) Relation avec le lissage numérique de Strutinsky

Bhaduri, Ross [15] et Jennings [16,17] ont utilisé le développement WK pour calculer l'énergie d'un système de N particules dans des potentiels nucléaires modèles (oscillateur harmonique, Woods-Saxon etc.). L'idée originale était de remplacer l'énergie moyenne définie par Strutinsky à l'aide d'un lissage numérique [7]

$$\tilde{E}_{\text{Strut}} = \sum_i \epsilon_i \tilde{n}_i \quad (25)$$

par l'énergie E_{ETF} . Il se trouve en fait, que ces deux énergies sont pratiquement identiques:

$$E_{\text{ETF}} = \tilde{E}_{\text{Strut}}. \quad (26)$$

L'identité (26) peut être démontrée analytiquement pour un oscillateur à 3 dimensions [19]; pour des puits Woods-Saxon réalistes, on la trouve vérifiée numériquement à ~ 1 MeV près [20], ce qui constitue la limite de précision numérique dans les deux méthodes. Dans la table 1, nous montrons à titre d'exemple ces deux énergies, ainsi que les contributions séparées E_{TF} , E_2 , E_4 , pour différents nombres ($A=2N$) de nucléons dans un puits Woods-Saxon sphérique. (Voir réf. [20] pour les détails.)

A=2N	E_{TF}	E_2	E_4	E_{ETF}	\tilde{E}_{Strut}
72	-1368.3	52.5	0.8	-1315.0	-1315.4 (1.2)
164	-3344.7	88.8	1.0	-3254.9	-3256.0 (1.2)
204	-4229.8	102.3	1.0	-4126.5	-4126.6 (0.8)
260	-5484.8	119.7	1.1	-5364.0	-5364.4 (0.8)
292	-6208.4	129.1	1.1	-6078.2	-6078.6 (0.8)
416	-9045.1	162.5	1.1	-8881.5	-8882.8 (1.2)

table 1

Les chiffres entre parenthèses représentent l'incertitude dans l'énergie Strutinsky due au lissage numérique d'un spectre limité (voir réf. [9] pour le problème "du plateau"). Des résultats similaires ont été obtenus en incluant un potentiel spin-orbite [17, 20] et pour des potentiels déformés.

On a donc trouvé que le lissage numérique de Strutinsky conduit aux mêmes énergies moyennes que le modèle ETF. Cela justifie, en relation avec le théorème eq. (4), l'application du modèle ETF au calcul d'énergies de liaison moyennes.

2.c) Le problème des points tournants

Pour réaliser la self-consistence de la matrice densité moyenne $\tilde{\rho}$ (ou ρ_{ETF}), il faut itérer comme dans le cas HF habituel:

$$\tilde{V}_0 \rightarrow \tilde{\rho}_0, \tilde{\tau}_0 \rightarrow \tilde{V}_1 \rightarrow \tilde{\rho}_1, \tilde{\tau}_1 \rightarrow \tilde{V}_2 \rightarrow \dots \quad (27)$$

jusqu'à la convergence. Bien que le modèle ETF nous permette d'arriver à une densité à partir d'un potentiel sans utiliser de fonctions d'onde, le pas de la densité au potentiel ne marche pas à cause de la divergence aux points tournants.

Nous connaissons à présent deux méthodes différentes pour éviter ce problème. L'une est de resommer certains termes de la série WK eq. (15); elle sera discutée dans le chapitre 4. L'autre méthode consiste à exprimer les densités $\tau_{ETF}(r)$ et $\vec{j}_{ETF}(\vec{r})$ par $\rho_{ETF}(\vec{r})$ et ses gradients. Ceci est justifié, en principe, par le théorème de Hohenberg et Kohn [4] et permet

d'exprimer l'énergie totale comme une fonctionnelle de $\rho_{\text{ETF}}(\vec{r})$ et donc de faire des calculs variationnels par rapport à la densité. Nous présentons des résultats de tels calculs dans le chapitre 3.

2.d) Les fonctionnelles $\tau_{\text{ETF}}[\rho]$ et $\vec{J}_{\text{ETF}}[\rho]$

Si on élimine des expressions $\rho_{\text{TF}}(\vec{r})$ et $\tau_{\text{TF}}(\vec{r})$ eq. (18) la quantité $[\lambda - V(\vec{r})]$, on arrive à la relation connue du modèle TF, qui d'ailleurs est exacte pour un système de Fermions à densité constante (par exemple un gas de Fermi ou la "matière nucléaire infinie"):

$$\tau_{\text{TF}}[\rho_{\text{TF}}] = \kappa \rho_{\text{TF}}^{5/3} \quad ; \quad \kappa = \frac{3}{5} (3\pi^2)^{2/3} . \quad (28)$$

De la même façon, on peut éliminer des séries eq. (17) jusqu'à l'ordre \hbar^n toutes les puissances de $[\lambda - V(\vec{r})]$ ainsi que les gradients de $V(\vec{r})$, pour obtenir des corrections à la fonctionnelle $\tau_{\text{TF}}[\rho]$ et, parallèlement, une fonctionnelle $\vec{J}_{\text{ETF}}[\rho]$:

$$\begin{aligned} \tau_{\text{ETF}}[\rho] &= \kappa \rho^{5/3} + \tau_2[\rho] + \dots + \tau_n[\rho] , \\ \vec{J}_{\text{ETF}}[\rho] &= \vec{J}_2[\rho] + \dots + \vec{J}_n[\rho] . \end{aligned} \quad (29)$$

(Si l'on s'arrête à l'ordre $\tau_n[\rho]$ et $\vec{J}_{n+2}[\rho]$ de ces séries, il faut que ρ contienne les termes de son développement eq. (17) jusqu'à l'ordre \hbar^n .) Pour le cas de l'Hamiltonien (16), on obtient explicitement [21]

$$\begin{aligned} \tau_2[\rho] &= \frac{1}{36} \frac{(\vec{\nabla}\rho)^2}{\rho} + \frac{1}{3} \Delta\rho + \frac{1}{6} \frac{\vec{\nabla}f \cdot \vec{\nabla}\rho}{f} + \frac{1}{6} \rho \frac{\Delta f}{f} + \\ &\quad - \frac{1}{12} \rho \frac{(\vec{\nabla}f)^2}{f^2} + \frac{1}{2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^2 \frac{1}{f^2} \rho (\vec{w})^2 , \end{aligned} \quad (30)$$

$$\vec{J}_2[\rho] = - \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right) \frac{1}{f} \rho \vec{w} , \quad (31)$$

où nous avons défini

$$f(\vec{r}) = \frac{m}{m^*(\vec{r})} \quad (32)$$

Les termes $\tau_4[\rho]$ et $\vec{J}_4[\rho]$ sont très compliqués à dériver à la main dans le cas général eq. (16); ils ont été déterminés sur un ordinateur par Grammaticos et Voros [22]. Ils contiennent des dérivées jusqu'à l'ordre 4 des quantités $\rho(\vec{r})$, $f(\vec{r})$ et l'ordre 2 de $\vec{W}(\vec{r})$. Cependant, en intégrant les contributions différentes de $\tau_4[\rho]$ et $\vec{J}_4[\rho]$ à l'énergie de Skyrme totale, eq. (1), on peut éliminer les dérivées de l'ordre 3 et 4. Donc, pour les intégrales $\int \tau_4[\rho] d^3r$, $\int \rho \tau_4[\rho] d^3r$ ou $\int \rho \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_4[\rho] d^3r$ on n'aura à calculer que les dérivées premières et secondes.

Les séries eq. (29) sont à nouveau des séries asymptotiques semi-convergentes: Pour des densités qui décroissent comme $\rho(r) \sim e^{-ar}$ pour $r \rightarrow \infty$, les contributions $\tau_n[\rho]$ et $\vec{J}_n[\rho]$ pour $n \geq 6$ sont divergentes. Nous utiliserons donc les parties convergentes et nous les appellerons $\tau_{\text{ETF}}[\rho]$ et $\vec{J}_{\text{ETF}}[\rho]$. Nous donnons ici comme illustration la fonctionnelle de l'énergie cinétique pour le cas local ($f=1$, $\vec{W}=0$):

$$\begin{aligned} T_{\text{ETF}}[\rho] &= \frac{\hbar^2}{2m} \int d^3r \tau_{\text{ETF}}[\rho(\vec{r})] = \frac{\hbar^2}{2m} \int d^3r \left\{ \kappa \rho^{5/3} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{36} \frac{(\vec{\nabla} \rho)^2}{\rho} + \frac{1}{6480} (3\pi^2)^{-2/3} \rho^{1/3} \left[8 \left(\frac{\vec{\nabla} \rho}{\rho} \right)^4 - 27 \frac{(\vec{\nabla} \rho)^2 \Delta \rho}{\rho^3} + 24 \left(\frac{\Delta \rho}{\rho} \right)^2 \right] \right\} \quad (33) \end{aligned}$$

(Voir la réf. [11] pour les corrections dues à $f(\vec{r}) \neq \text{const.}$, $\vec{W}(\vec{r}) \neq 0$.)

Dans les références [21] et [23] on a testé numériquement la fonctionnelle $T_{\text{ETF}}[\rho]$ eq. (33) en utilisant des densités $\tilde{\rho}(\vec{r})$ et $\tilde{\tau}(\vec{r})$ lissées à la Strutinsky pour des potentiels différents et en comparant les quantités $T_{\text{ETF}}[\tilde{\rho}]$ et $T = \frac{\hbar^2}{2m} \int \tilde{\tau}(\vec{r}) d^3r$. (Voir la réf. [23] pour une discussion détaillée.) Dans la table 2 nous montrons les résultats obtenus pour différents nombres de nucléons dans un potentiel harmonique sphérique. On verra que la différence $\Delta T = T_{\text{ETF}}[\tilde{\rho}] - \tilde{T}$ est toujours inférieure à 1 MeV, ce qui correspond à une précision de 10^{-3} à 10^{-4} sur la fonctionnelle. Dans la table 2 on trouvera aussi les valeurs de $V_\tau = C \int d^3r \rho \tau$ obtenus par $\tau_{\text{ETF}}[\tilde{\rho}]$ ou $\tilde{\tau}(\vec{r})$, respectivement, et leur différences ainsi que les deuxièmes moments $\langle r^2 \rangle_\tau = \int d^3r \vec{r}^2 \tau$ obtenus par ces deux voies.

N	\tilde{T}	$T[\tilde{\rho}]$	ΔT	\tilde{V}_T	$V_T[\tilde{\rho}]$	ΔV_T	$\langle r^2 \rangle_T$	$\langle r^2 \rangle_T[\tilde{\rho}]$
4	28.45	28.41	-0.04	0.62	0.62	0.0	14.054	16.401
16	170.91	170.68	-0.23	9.64	9.67	0.03	16.284	16.934
28	356.29	355.90	-0.39	28.00	28.04	0.04	18.044	18.448
40	570.13	569.70	-0.43	54.82	54.90	0.08	19.477	19.775
52	806.27	805.88	-0.39	89.65	89.73	0.08	20.699	20.960
64	1061.12	1061.00	-0.12	132.12	132.19	0.07	21.780	21.949
76	1332.20	1332.72	0.52	181.99	182.14	0.15	22.750	22.980
88	1617.82	1617.72	-0.10	239.09	239.25	0.16	23.632	23.841
100	1916.56	1916.72	0.16	303.17	303.41	0.23	24.453	24.637
112	2227.38	2227.49	0.11	374.13	374.34	0.21	25.217	25.386
124	2549.40	2549.76	0.36	451.95	452.09	0.14	25.930	26.099
136	2881.21	2881.88	0.67	536.40	536.67	0.27	26.595	26.728
148	3224.25	3224.26	0.01	627.24	627.45	0.21	27.244	27.388
160	3575.88	3575.67	-0.21	724.57	724.93	0.35	27.853	27.975

table 2

Cet excellent accord a aussi été obtenu pour des potentiels harmoniques déformés et des potentiels Woods-Saxon sphériques ou déformés. Sur la figure 1 nous montrons les énergies cinétiques \tilde{T} et $T[\tilde{\rho}]$ - obtenues successivement avec la fonctionnelle jusqu'à l'ordre TF, n=2 et n=4 - pour 126 neutrons dans un puit Woods-Saxon déformé en fonction de c. (Voir réf. [9] pour ce paramètre d'élongation.)

Au vu de ces résultats nous pouvons conclure que $T_{ETF}[\rho]$ éq. (33) reproduit très exactement les énergies cinétiques moyennées à la Strutinsky. Pour le cas non-local avec l'Hamiltonien eq. (16), nous renvoyons aux résultats de tels calculs variationnels avec des forces de Skyrme et leur excellent accord avec des résultats HF (voir chapitre 3). On remarquera d'ailleurs sur la figure 1 l'importance des termes $\tau_4[\rho]$ pour obtenir un bon comporte-

ment de l'énergie cinétique en fonction de la déformation. ($c \approx 1.5$ à 1.6 correspond aux déformations typiques des barrières de fission des actinides!)

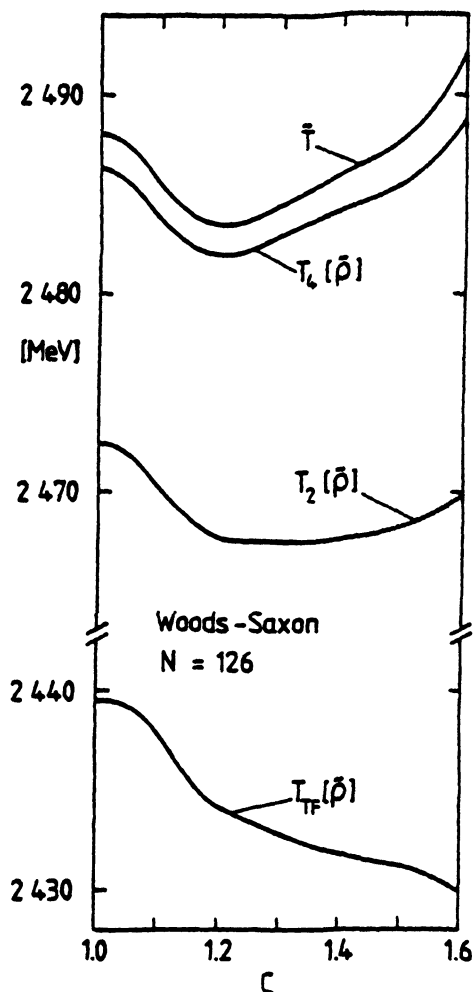


figure 1

totale à l'aide d'une paramétrisation réaliste et flexible des densités ρ_n et ρ_p . Ceci a été fait récemment par le groupe de Ratisbonne [11,24,25]; nous présenterons quelques résultats dans le chapitre suivant.

Bohigas et al. [26] ont résolu les équations d'Euler-Lagrange pour des forces de Skyrme dans des noyaux sphériques, mais ils ont négligé $\tau_4[\rho]$ ainsi que toutes les contributions spin-orbite et de masse effective. Leurs énergies semiclassiques contenaient des erreurs de plusieurs dizaines de MeV.

A l'aide des fonctionnelles $\tau_{\text{ETF}}[\rho]$ et $\vec{J}_{\text{ETF}}[\rho]$, on est donc capable d'exprimer l'énergie totale moyenne de Skyrme comme une fonctionnelle des densités $\rho_n(\vec{r})$ et $\rho_p(\vec{r})$ et de faire des calculs variationnels:

$$\frac{\delta}{\delta \rho_q} \int d^3r \left\{ E_{\text{tot}}[\rho_n, \rho_p] - \lambda_n \rho_n(\vec{r}) - \lambda_p \rho_p(\vec{r}) \right\} = 0, \quad (34)$$

λ_n et λ_p étant des multiplicateurs de Lagrange pour fixer les nombres N et Z des neutrons et protons. La variation dans l'éq. (34), avec les fonctionnelles $\tau_{\text{ETF}}[\rho]$ et $\vec{J}_{\text{ETF}}[\rho]$ complètes à l'ordre 4, conduit à des équations différentielles couplées d'Euler-Lagrange. Elles sont du 4ème ordre, fortement non locales et donc extrêmement difficiles sinon impossibles à résoudre numériquement, surtout dans le cas déformé

(accessible avec un champ extérieur). Il est plus praticable de minimiser l'énergie

D'excellentes énergies E_{ETF} ont été obtenues pour des noyaux sphériques

dans la réf. [27] en réajustant les paramètres de la fonctionnelle $\tau_{TF}[\rho] + \tau_2[\rho]$, mais cette approche phénoménologique dépend de la force et ne s'étend pas au cas déformé.

3. Applications du modèle ETF

3.a) Calculs variationnels pour des noyaux sphériques et déformés

Les premiers calculs pour des noyaux sphériques et déformés utilisant les fonctionnelles complètes (au 4ème ordre) $\tau_{ETF}[\rho]$ et $\vec{J}_{ETF}[\rho]$ ont été réalisés par le groupe à Ratisbonne [11,24]. L'ensemble de ces résultats sera bientôt publié [11]; nous nous contenterons ici de donner les idées principales et quelques résultats typiques.

Pour les noyaux sphériques, on paramétrise les densités ρ_n et ρ_p de la façon suivante

$$\rho_q(\vec{r}) = \frac{\rho_{q0} [1 + \rho_{q1} \exp[-(r/\beta_q R_q)^2]]}{[1 + \exp(\frac{r-R_q}{\alpha_q})]^{\gamma_q}} \quad (q = n, p). \quad (35)$$

L'énergie totale est calculée par

$$E_{tot} = \int d^3r \mathcal{E}_{sky}[\rho_n, \rho_p] + E_{coul}[\rho_p], \quad (36)$$

où $E_{coul}[\rho_p]$ est l'énergie Coulombienne dont la partie d'échange est incluse dans l'approximation de Slater. Ensuite on minimise E_{tot} par rapport aux 12 paramètres $\rho_{q0}, \rho_{q1}, \beta_q, \alpha_q, \gamma_q, R_q$ ($q = n, p$), dont deux s'éliminent à cause de la conservation des nombres N et Z de neutrons et protons. Il s'agit donc d'un calcul variationnel dans un espace restreint. Les densités eq. (35) sont cependant très flexibles et réalistes. Dans la figure 2 nous trouverons une comparaison des densités résultant d'un tel calcul (marqués ETF) et celles sortant d'un calcul microscopique HF, obtenues pour ^{40}Ca et ^{208}Pb avec la force de Skyrme SkM*[3,11]. On remarquera l'excellente reproduction des densités HF en moyenne par le calcul semi-classique non seulement dans la surface - qui est asymétrique autour du point d'inflexion ($\gamma_q > 1!$) - mais

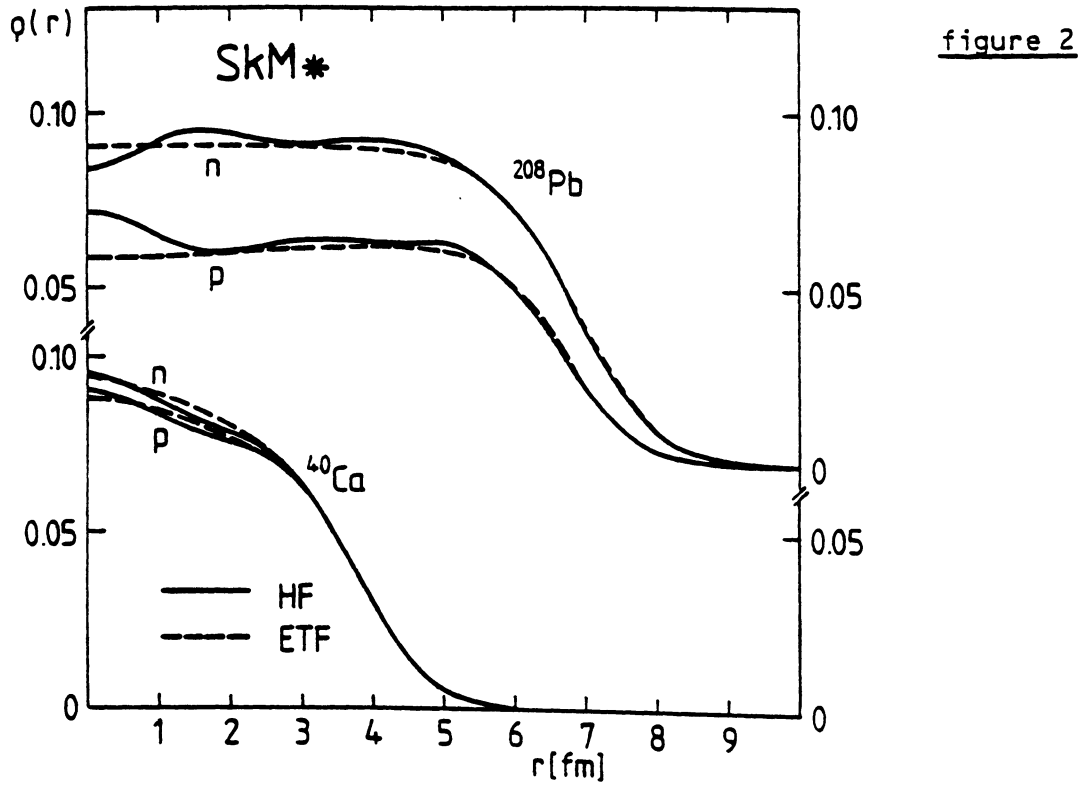
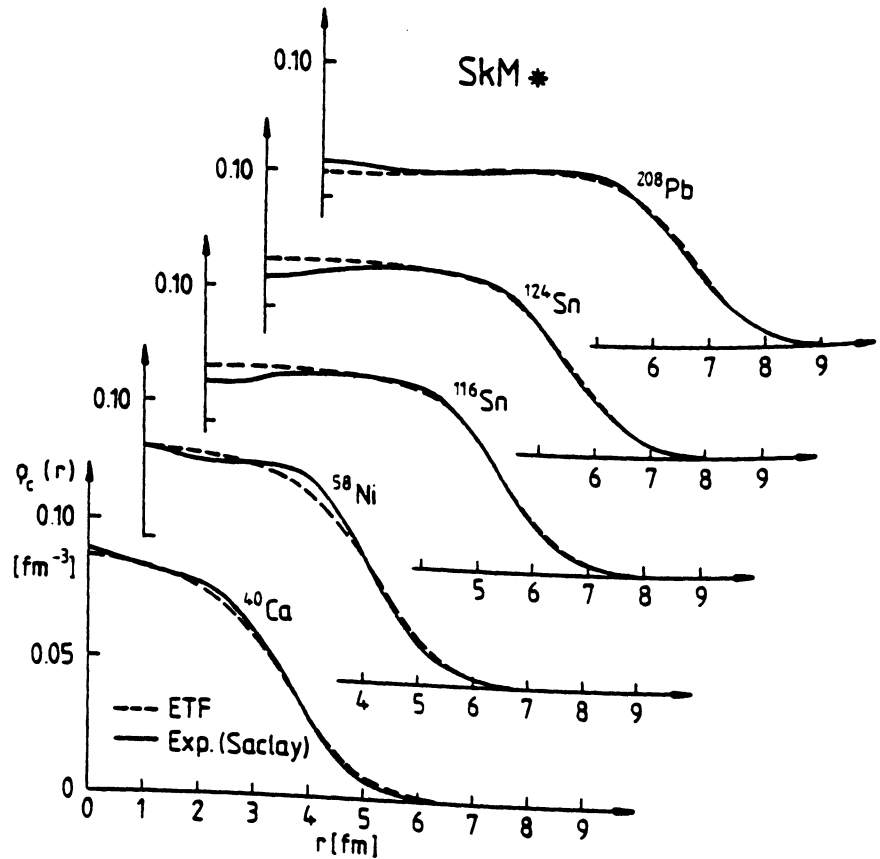


figure 3



aussi à l'intérieur des noyaux. Le fait que la montée des densités du ^{40}Ca vers l'intérieur est reproduite nous paraît intéressant: cette montée n'est donc pas exclusivement un effet de couche, mais une propriété globale macroscopique. Dans la figure 3, nous comparons les densités semi-classiques de protons $\rho_p(r)$ de 5 noyaux sphériques à des distributions expérimentales obtenues à Saclay [28]. (Les densités $\rho_p(r)$ ont été convoluées avec un facteur de forme du proton donnant $\langle r_p^2 \rangle = 0.64 \text{ fm.}$)

L'énergie totale eq. (36) et les rayons carrés moyens r_n^2 , r_p^2 dépendent très peu des paramètres ρ_{1q} , β_q (≈ 0.5) et γ_q . Donc, des fonctions de Fermi ($\rho_{1q} = 0$, $\gamma_q = 1$) donnent déjà de bonnes estimations de ces quantités. Pour $\rho_{1q} \neq 0$, on gagne moins de 1 MeV en énergie de liaison et en outre pour $\gamma_q \neq 1$ moins de $\sim 4 \text{ MeV}$ pour les noyaux lourds. Dans la table 3 nous présentons, pour 9 noyaux sphériques, des énergies de liaison expérimentales (B^{exp}), HF(B^{HF}) et semiclassiques (B^{ETF}); les résultats théoriques ont toujours été calculés avec la force SkM*; dans les calculs ETF on s'est restreint ici à des fonctions de Fermi pour les densités ρ_n et ρ_p . On trouvera que, à part l'absence d'effets de couche, les énergies B^{ETF} sont trop grandes de quelques MeV ($\approx 5 \text{ MeV}$ pour le ^{208}Pb).

	B^{exp}	B^{HF}	B^{ETF}	B^{EVM}
^{16}O	127.6	127.7	126.0	127.4
^{40}Ca	342.1	341.1	343.6	340.4
^{48}Ca	416.0	420.1	419.3	418.4
^{56}Ni	484.0	485.4	481.0	483.1
^{90}Zr	783.9	784.5	783.7	782.7
^{114}Sn	971.6	969.2	972.5	967.9
^{132}Sn	1102.7	1110.7	1097.8	1108.3
^{140}Ce	1172.7	1173.9	1170.4	1171.6
^{208}Pb	1636.5	1636.4	1621.9	1633.7

table 3

Ce surplus d'énergie de liaison paraît être un défaut des fonctionnelles ETF utilisées; mais il n'affecte guère les énergies de déformations (voir en-bas). Dans la dernière colonne de la table 3 sont montrés les résultats d'un calcul utilisant la méthode dite "expectation value method" (EVM) [10] pour inclure les effets de couche. Cette méthode consiste à calculer les Hamiltoniens à un corps de Skyrme H_q eq. (16) à partir des densités semi-classiques variationnelles, et à faire ensuite une seule itération HF. Elle équivaut à l'addition de la correction de couche $\delta_q E$ (voir eqs. (4,5), à l'énergie E_{ETF} mais elle a l'avantage de corriger en perturbation le défaut de l'énergie de liaison ETF mentionné ci-dessus. Dans la table 4 nous présentons des rayons carrés moyens r_q et leurs différences, ainsi que les paramètres des densités semi-classiques (fonction de Fermi!) obtenus dans les memes calculs ($\rho^0 \equiv \rho_{no} + \rho_{po}$; $\rho_p^0 \equiv \rho_{po}$). Les rayons de charge r_c théoriques contiennent l'effet du facteur de forme du proton. On remarquera l'excellent

	r_c^{exp}	r_c^{HF}	r_c^{ETF}	$(r_{np}^{TF})^{HF}$	$(r_{np}^{TF})^{ETF}$	α_n	α_p	ρ_p^0	ρ^0
^{16}O	2.73	2.81	2.78	-0.03	-0.02	0.448	0.452	0.0789	0.1597
^{40}Ca	3.49	3.52	3.47	-0.05	-0.04	0.460	0.468	0.0790	0.1607
^{48}Ca	3.48	3.54	3.54	0.16	0.17	0.500	0.442	0.0706	0.1607
^{56}Ni	3.75	3.77	3.81	-0.06	-0.05	0.463	0.473	0.0780	0.1592
^{90}Zr	4.27	4.30	4.29	0.05	0.07	0.491	0.454	0.0710	0.1574
^{114}Sn	-	4.60	4.61	0.08	0.08	0.496	0.453	0.0693	0.1557
^{132}Sn	-	4.73	4.75	0.23	0.24	0.540	0.438	0.0621	0.1543
^{140}Ce	4.88*	4.89	4.89	0.13	0.14	0.512	0.446	0.0656	0.1540
^{208}Pb	5.50	5.51	5.53	0.17	0.17	0.529	0.441	0.0613	0.1504

* Ce naturel (88,5 % de ^{140}Ce).

table 4

accord entre les rayons ETF et HF. Dans la réf. [3] on a montré que les différences entre r_c^{HF} et les rayons de charge expérimentaux r_c^{exp} qui sont déjà petites! - sont encore diminuées par des corrections de centre de masse, d'effets de spin-orbite et d'un facteur de forme du neutron. Attirons l'at-

tention sur les différences systématiques entre les diffusivités de surface $\alpha_n - \alpha_p$ qui sont proportionnelles à l'asymétrie $(N-Z)/A$ des noyaux et qui constituent la source principale des différences $(r_n - r_p)^{ETF}$.

Pour décrire des noyaux déformés, on contraint leur forme en généralisant la paramétrisation eq. (35) à des densités déformées. On part d'une paramétrisation (c,h) de goutte liquide telle qu'on l'a utilisée dans des calculs de barrières de fission avec la méthode de Strutinsky [9]. On suppose alors que les densités diffuses vont à travers la surface de cette goutte selon

$$\rho_q(u) = \frac{\rho_{q0}}{[1 + \exp(\frac{u - \Delta q}{\alpha_q})]^{r_1}}, \quad (37)$$

où \underline{u} est la normale locale dans chaque point de cette surface. (Voir la réf. [25] pour la définition d'un système de coordonnées curvilinéaires qui s'adaptent idéalement à cette prescription.) Dans chaque point de l'espace (c,h) de déformation, on minimise l'énergie totale par rapport aux paramètres des densités eq. (37). On obtient ainsi des surfaces d'énergie de déformation $E_{ETF}(c,h)$, dont on extrait des barrières de fission moyennes en suivant le chemin statique (ou adiabatique).

Dans la figure 4 on montre les barrières moyennes de fission obtenues pour le ^{240}Pu avec plusieurs forces de type Skyrme, portées comme fonctions du paramètre d'élongation c (et minimisées par rapport au paramètre de "necking" h). Ces calculs confirment le résultat connu [29]: la force SIII

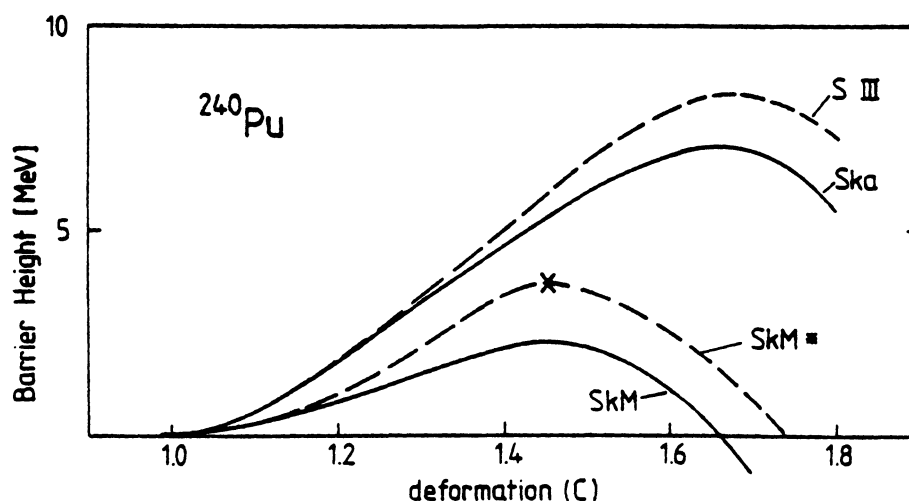


figure 4

conduit à des barrières trop élevées - comme d'ailleurs toutes les forces de la "famille" SII à SV d'Orsay [30] (voir aussi la réf. [24]) et celle nommée Ska par Köhler [31]. La force SkM qui a été déterminée par des calculs RPA pour reproduire les énergies d'excitations de résonances géantes (E_0 , E_1 et E_2) [32], donne une barrière légèrement trop basse devant la hauteur empirique (indiquée d'une croix). La force SkM*, qui a les mêmes propriétés de matières nucléaire infinie que SkM, a récemment été ajustée pour reproduire la barrière LDM empirique [3,11]. La figure 5 montre la barrière du ^{240}Pu obtenue par un calcul purement microscopique HF (en contraignant le moment

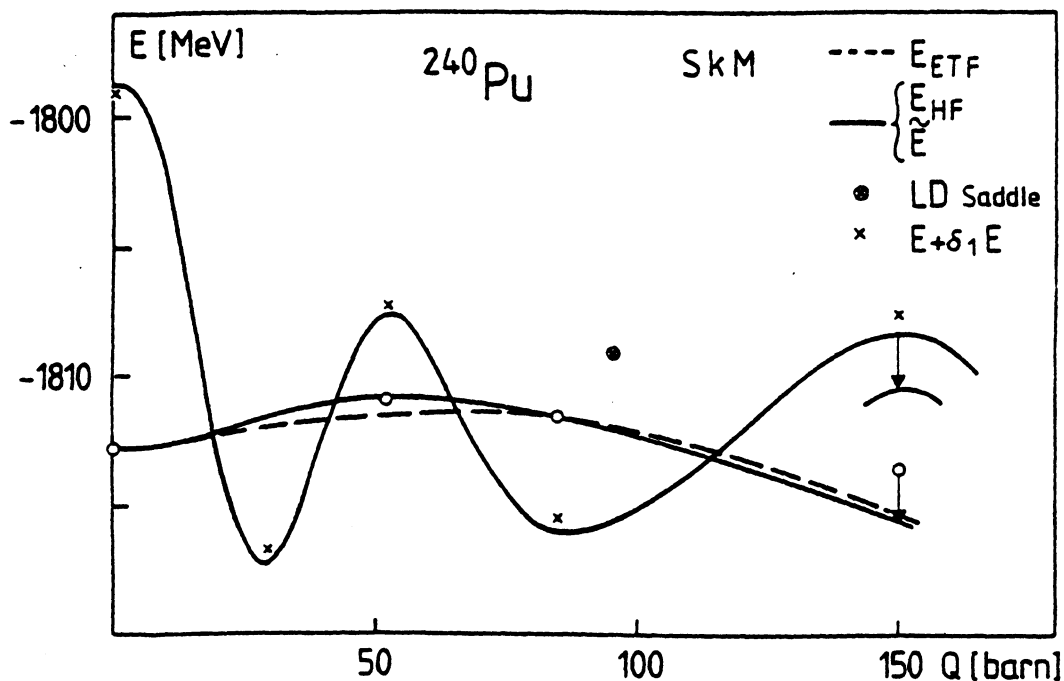


figure 5

quadrupolaire totale (Q) avec la force SkM (voir la réf. [3] pour les détails.) On y trouve aussi une courbe HF lissée de façon self-consistante (désignée E) et le résultat du calcul semi-classique (E_{ETF}). L'accord à $\lesssim 1$ MeV près entre ces deux courbes constitue une confirmation excellente de la méthode semi-classique variationnelle.

Pour inclure les effets de couche on a fait un calcul EVM dans le plan (c, h) pour le ^{240}Pu ; le résultat est présenté sur la figure 6 sous la forme d'une surface d'énergie de déformation. (Le fondamental est ajusté arbitrairement à ~ 0.5 MeV.) Pour des raisons de temps de calcul on a du choisir une base d'oscillateurs déformés limitée à $N = 12$ couches majeures. Les énergies

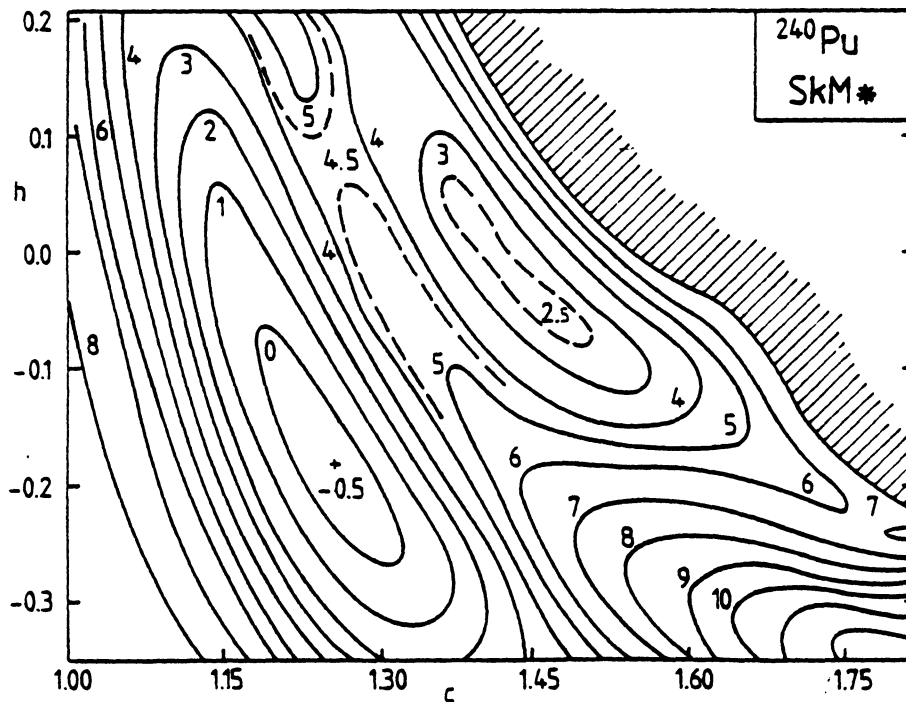


figure 6

pour les grandes deformations (~au delà du minimum isomérique) ne sont donc pas fiables. Mais la structure topologique de cette surface et surtout les énergies relatives entre le fondamental, le deuxième minimum et le premier point de selle sont identiques aux meilleurs calculs phénoménologiques à la Strutinsky (voir par ex. la réf. [9]). (On a notamment gardé la symétrie axiale et la symétrie gauche/droite!)

3.b) Calculs ETF à température finie

Les calculs ETF s'étendent facilement à des températures $T > 0$ pour décrire des noyaux à haute énergie d'excitation auxquels on a accès p. ex. par des réactions d'ions lourds. Il faut dans ce cas minimiser l'énergie libre

$$F = E - TS ,$$

(38)

où S est l'entropie. L'inclusion de la température dans le formalisme ETF se fait facilement par une convolution du spectre ϵ_i par la fonction $\cosh^{-2}(E/2T)/4T$ (voir réf. [8]). On trouve alors pour la densité de Bloch

$$C_T(\vec{r}, \vec{r}'; \beta) = C_0(\vec{r}, \vec{r}'; \beta) j_0^{-1}(\pi\beta T), \quad (39)$$

où $C_0(\vec{r}, \vec{r}'; \beta)$ est la densité de Bloch à température nulle, eq. (9), et j_0 est la fonction de Bessel sphérique d'ordre zero. En développant celle-ci ("low temperature expansion"), on obtient

$$C_T(\vec{r}, \vec{r}'; \beta) = C_0(\vec{r}, \vec{r}'; \beta) \left\{ 1 + \frac{\pi^2}{6} \beta^2 T^2 + O(T^4) \right\}, \quad (40)$$

d'où on dérive facilement la correction à la fonctionnelle $\tau_{ETF}[\rho]$:

$$\tau_{ETF}^T[\rho] = \tau_{ETF}^0[\rho] - a(\rho) T^2. \quad (41)$$

Ici, $\tau_{ETF}^0[\rho]$ est la fonctionnelle à $T = 0$ discutée dans la section 2.d) et $a(\rho)$ est donnée par la relation connue du modèle TF

$$a(\rho) = \frac{\pi^2}{6} \tilde{q}(\lambda) = \frac{(3\pi^2)^{1/3}}{12} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right) \frac{1}{f(\vec{r})} \rho^{1/3}(\vec{r}). \quad (42)$$

(Il n'y a pas de corrections semi-classiques à l'eq. (42).) En utilisant $\tau_{ETF}^T[\rho]$, éq. (41), pour le calcul de l'énergie cinétique, on obtient automatiquement l'énergie libre F .

Dans la réf. [11] on a appliqué la méthode ETF variationnelle décrite ci-dessus au cas $T > 0$. La figure 7 nous montre la variation des paramètres de densité (fonctions de Fermi) avec la température pour le ^{240}Pu (cas sphérique). (On a porté les valeurs relatives à celles du cas $T=0$.) On trouve que les diffusivités augmentent rapidement pour $T \gtrsim 1-1.5$ MeV, tandis que les rayons sont beaucoup plus stables. (Les densités centrales ρ_{q0} changent de moins que 0.1 % jusqu'à $T = 3$ MeV.) La conséquence de la variation $\alpha_q(T)$ est une diminution de l'énergie (libre) de surface pour $T > 0$, ce qui conduit les barrières de fission à décroître. Les résultats obtenus pour les barrières du ^{240}Pu à $T > 0$ avec la force SkM* [11] se paramétrisent par la formule du type LDM suivante

$$E_f(T) = \text{const.} \cdot a_s^*(T) (1 - X(T))^3, \quad (43)$$

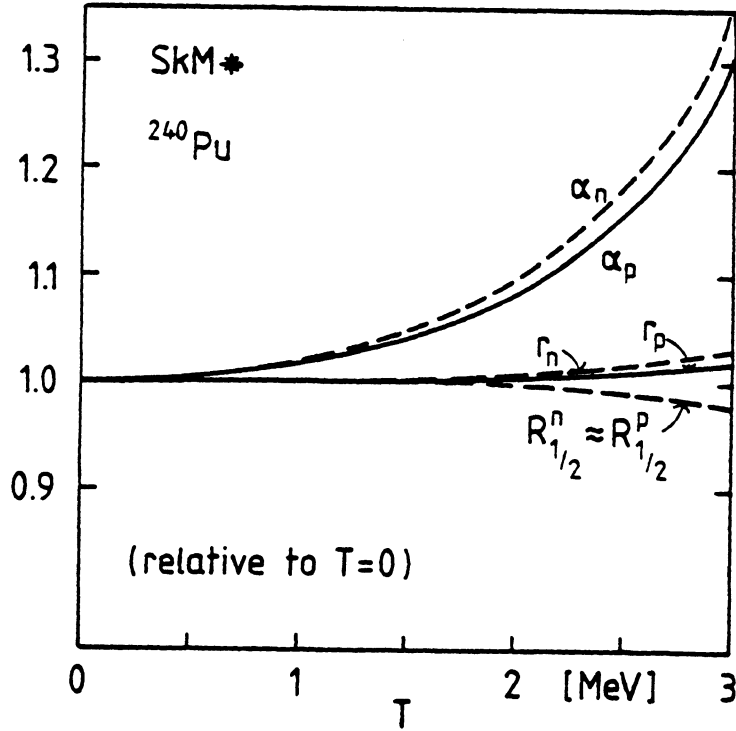


figure 7

où

$$x(T) = \frac{\bar{Z}^2}{A} / \left(\frac{\bar{Z}^2}{A} \right)_{\text{crit}}(T) = \left(\frac{\bar{Z}^2}{A} \right) \frac{C_1^*}{2 Q_s^*(T)} \quad (44)$$

et $a_s^*(T)$ est une énergie de surface effective qui contient des effets d'asymétrie, de courbure et de réarrangement de Coulomb et est approximée par

$$Q_s^*(T) = Q_s^*(0) (1 - \varepsilon T^2). \quad (45)$$

Les valeurs obtenues pour la force SkM* sont (pour le ^{240}Pu seulement!)

$$Q_s^*(0) = 17.3 \text{ MeV}, C_1^* = 0.778 \text{ MeV}, \varepsilon \approx 0.017 \text{ MeV}^{-2}. \quad (46)$$

On trouve donc que la barrière moyenne de fission du ^{240}Pu disparaît à $T \approx 2.5 \text{ MeV}$. Puisqu'il n'y a plus d'effets de couche à cette température (voir p.ex. la réf. [33]), ce résultat devrait correspondre à une situation réaliste.

3.c) Développement leptodermique et paramètres de la goutte liquide

Dans la référence [25] on a montré comment l'approximation leptodermique

$$(\alpha_q / R_q) \ll 1 \quad (47)$$

pour les densités éq. (35) permet de développer l'énergie ETF en une série du type modèle de la goutte liquide (LDM). Dans le cas $N=Z$ (sans Coulomb) on trouve

$$E_{ETF} = a_v A + a_s A^{2/3} + a_c A^{1/3} + a_o + \dots, \quad (48)$$

où les paramètres a_s , a_c , a_o peuvent être déterminés une fois pour toutes pour une force de Skyrme donnée par un calcul de la matière nucléaire semi-infinie. (Les énergies de surface ont déjà été données dans la réf. [22].) Contrairement au "droplet model" (DM) [34] appliqué au fit des masses ou à d'autres formules de masse récentes (voir p.ex. la réf. [35]), on trouve $a_c \approx 7-9$ MeV pour toutes les forces de Skyrme réalistes. Pour des paramètres d'asymétrie

a_v	a_s	a_c	a_o	J	P	G	H	Q	K
- 15.78	17.2	9.5	- 7.3	30.0	31.6	39.0	10.6	35.4	216.7

table 5

($N \neq Z$) et les contributions de Coulomb, on peut tester les formules du DM. On confirme qualitativement ces formules [11, 25], mais on trouve aussi des différences quantitatives, surtout au niveau des contributions de Coulomb et des effets de courbure [36]. Comme illustration, nous donnons dans la table 5 les paramètres a_v , a_s , ... de l'éq. (48) et les paramètres d'asymétrie de volume J et de surface P, G, H, Q (voir Myers et Swiatecki [34] pour leur définition) obtenus pour la force SkM* (tous en MeV); K est l'incompressibilité de la matière nucléaire infinie.

3.d) Autres applications du modèle ETF

Nous n'avons pas le temps ni la place pour discuter d'autres applications du modèle ETF ou des variantes de celui-ci. Nous nous contentons de citer quelques sujets et de donner des références:

- description semi-classique d'effets d'appariement [37],
- noyaux en rotation (hauts spins) [38-40],
- théorie semi-classique dynamique des résonances géantes [41,32],
- analyses du "breathing mode" et de la compressibilité de surface [42, 43].

4. Resommation partielle de la série WK

Un autre moyen d'éliminer les divergences aux points tournants des densités ETF est de resommer certaines contributions de la série WK éq. (15) à tous les ordres de \hbar [44]. Ceci correspond, successivement, à une approximation locale linéaire ou harmonique du potentiel [45] et peut être généralisé pour des potentiels non locaux [46]. De cette façon on obtient des expressions pour la densité de Bloch où tous les termes de la série éq. (15) ont été inclus qui ne contiennent pas de dérivées du potentiel supérieur à la première (C_{lin}) ou à la deuxième (C_{harm}). Nous ne donnons ici que la forme linéaire:

$$C_{lin}(\vec{r}, \vec{r}'; \beta) = \left(\frac{m^*(r)}{2\pi\hbar^2\beta} \right)^{3/2} e^{-\beta V + \frac{\hbar^2}{24m^*(r)}\beta^3(\vec{\nabla}V)^2} e^{-\frac{m}{2\hbar^2\beta}(\vec{r}-\vec{r}')^2}; \quad (42)$$

voir la réf. [45] pour la forme plus compliquée de C_{harm} .

Ces densités de Bloch n'ont plus la forme simple de l'approximation TF (ou ETF) qui était la cause de la divergence des densités ρ, τ et \vec{J} aux points tournants. Les inversions de Laplace peuvent être faites analytiquement ou par la méthode du col. De cette façon on obtient des expressions semi-classiques séparément pour les densités $\rho(\vec{r})$, $\tau(\vec{r})$ et $\vec{J}(\vec{r})$ qui sont bien définies aux points tournants et au delà. Dans l'approximation harmonique, ou une approximation à celle-là [44], les queues des densités coïncident pratiquement avec celles des densités exactes (quantiques)! Les énergies obtenues après l'intégration sont seulement à quelques MeV des énergies E_{Strut} ou des énergies ETF.

Cette méthode permet donc de réaliser l'itération semi-classique du potentiel indiquée dans l'éq. (27). Ceci a été réalisé récemment par Bartel et Vallières [47]. Pour éviter des instabilités numériques, ces auteurs ont

fitté les densités à chaque cycle de l'itération par des fonctions de Fermi modifiées éq. (35) (avec $\gamma_q = 1$). Dans la figure 8 nous présentons leurs résultats sur les densités et potentiels locaux, comparés à des résultats HF avec la force SIII pour le ^{208}Pb . (Les potentiels V_p montrés dans la figure ne contiennent pas la contribution Coulombienne). Dans la table 6 on trouvera les énergies totales semi-classiques E_{sc} sans et avec addition des corrections de couches $\delta_j E$ (tirées de la réf. [8]) et les rayons carrés moyens pour différents noyaux sphériques (force SIII); toutes ces quantités sont comparées aux résultats HF correspondants. Ces résultats sont tout à fait comparables à ceux de la méthode ETF variationnelle (voir chapitre 3); on remarque aussi un léger surplus de liaison de $\sim 3-6$ MeV dans les énergies

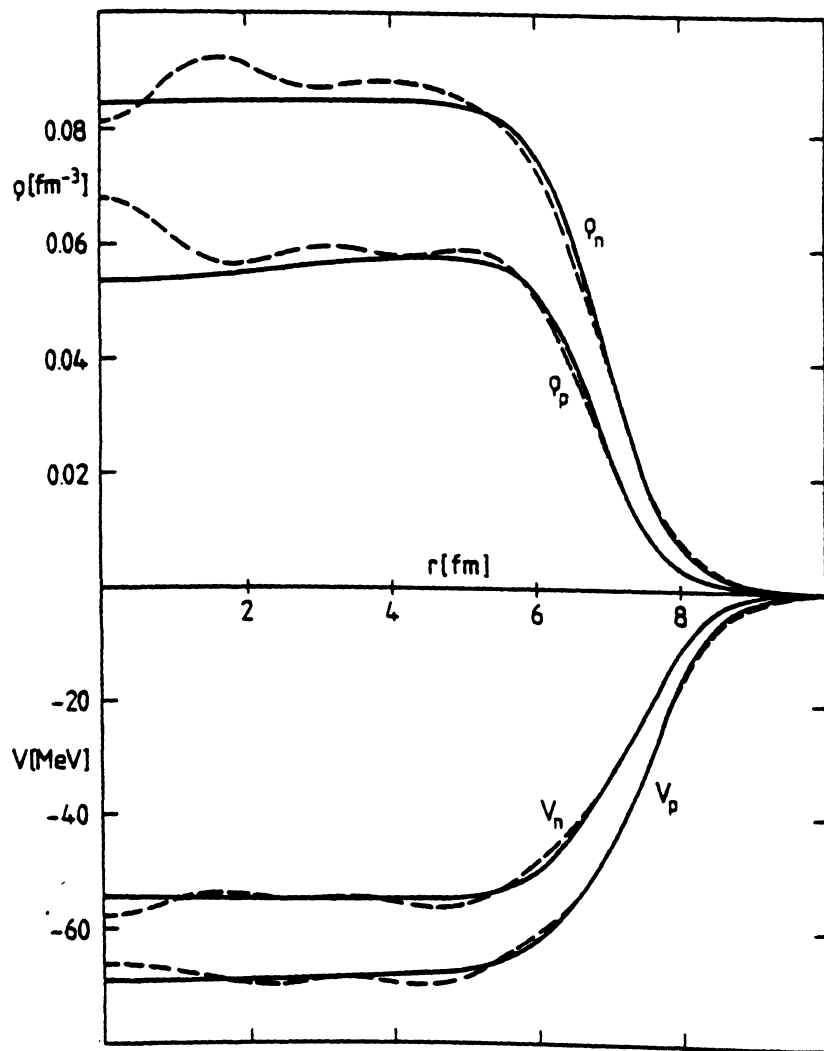


figure 8

	E_{SC}	$E_{SC} + \delta_1 E$	E_{HF}	r_n^{SC}	r_n^{HF}	r_p^{SC}	r_p^{HF}
^{16}O	-127.1	-131.8	-128.2	2.60	2.62	2.61	2.64
^{40}Ca	-342.7	-345.3	-341.8	3.34	3.36	3.39	3.41
^{48}Ca	-416.2		-418.2	3.59	3.60	3.47	3.46
^{56}Ni	-479.5	-486.3	-483.6	3.69	3.67	3.73	3.72
^{90}Zr	-781.0	-786.5	-782.6	4.31	4.31	4.26	4.26
^{114}Sn	-970.4	-969.9	-965.4	4.64	4.65	4.59	4.60
^{140}Ce	-1167.8		-1172.4	4.97	4.97	4.88	4.89
^{208}Pb	-1623.7	-1642.9	-1636.6	5.66	5.65	5.56	5.52

table 6

qui, ici, pourrait être dû à l'absence de contributions de spin-orbite au 4ème ordre. A part ça, l'accord entre les rayons semi-classiques et les rayons HF est excellent.

Vis-à-vis de la méthode ETF, cette méthode a l'avantage suivant: pour des noyaux à température finie, on peut inclure le facteur $j_0^{-1}(\pi\beta T)$ équ. (39) tel quel. L'approche ne dépendra donc pas de la qualité du développement à basse température, équ. (40), qui est nécessaire pour les calculs ETF.

Nous terminons ce chapitre en mentionnant qu'une résommation partielle de la densité de Bloch similaire à celle discutée ci-dessus a été appliquée avec succès au calcul semi-classique de densités électroniques d'atomes [48].

Je tiens à remercier mes collègues J. Bartel, C. Guet et H.-B. Håkansson de leur collaboration patiente et J. Libert d'avoir éliminé plusieurs grosses erreurs linguistiques de ce manuscrit. Je remercie Mme. A. Herrmann de la frappe soignée et efficace du manuscrit.

Références

- 1) D. Vautherin, D.M. Brink, Phys. Rev. C
- 2) P. Quentin, H. Flocard, Ann. Rev. Nucl. Part. Sci. 28 (1978) 23
- 3) J. Bartel, P. Quentin, C. Guet, H.-B. Håkansson, M. Brack, Nucl. Phys. A, in print
- 4) P. Hohenberg, W. Kohn, Phys. Rev. 136 (1964) B 864
- 5) W. Kohn, L.J. Sham, Phys. Rev. 137 (1965) A 1697; 140 (1965) A 1133
- 6) J.W. Negele, D. Vautherin, Phys. Rev. C5 (1972) 1472
- 7) V.M. Strutinsky, Nucl. Phys. A 95 (1967) 420; A 122 (1968) 1
- 8) M. Brack, P. Quentin, Phys. Lett. 56 B (1975) 421; Nucl. Phys. A 361 (1981) 35
- 9) M. Brack, J. Damgard, A.S. Jensen, H.C. Pauli, V.M. Strutinsky, C.Y. Wong, Rev. Mod. Phys. 44 (1972) 320
- 10) M. Brack, Phys. Lett. 71 B (1977) 239
- 11) C. Guet, H.-B. Håkansson, M. Brack, to be published
- 12) E.P. Wigner, Phys. Rev. 40 (1932) 749
- 13) J.G. Kirkwood, Phys. Rev. 44 (1933) 31
- 14) G.E. Uhlenbeck, E. Beth, Physica 3 (1936) 729
- 15) R.K. Bhaduri, C.K. Ross, Phys. Rev. Lett. 27 (1971) 606
- 16) B.K. Jennings, Nucl. Phys. A 207 (1973) 538
- 17) B.K. Jennings, Ph.D. thesis, McMaster University, 1976
- 18) A. Voros, Thèse d'Etat, Université de Paris-Sud (Orsay), 1977
- 19) M. Brack, H.C. Pauli, Nucl. Phys. A 207 (1973) 401
- 20) B.K. Jennings, R.K. Bhaduri, M. Brack, Phys. Rev. Lett. 34 (1975) 228; Nucl. Phys. A 253 (1975) 29
- 21) M. Brack, B.K. Jennings, Y.H. Chu, Phys. Lett. 65 B (1976) 1
- 22) B. Grammaticos, A. Voros, Ann. of Phys. 123 (1979) 359; 129 (1980) 153
- 23) C. Guet, M. Brack, Z.f. Phys. A 297 (1980) 247
- 24) C. Guet, H.-B. Håkansson, M. Brack, Phys. Lett. 97 B (1980) 7
- 25) M. Brack, C. Guet, H.-B. Håkansson, A. Magner, V.M. Strutinsky, 4th Intern^l Conf. on nuclei far from stability, Helsingør, 1981 (CERN 81-09, Geneva 1981) p. 65
- 26) O. Bohigas, X. Campi, H. Krivine, J. Treiner, Phys. Lett. 65 B (1976) 381
- 27) H. Krivine, J. Treiner, Phys. Lett. 88 B (1979) 212
- 28) J.B. Bellicard et al., compte rendu d'activité C.E.N. Saclay, D.Ph.Th., notes C.E.A. - N 2207
- 29) H. Flocard, P. Quentin, D. Vautherin, M. Vénéroni, A.K. Kerman, Nucl. Phys. A 231 (1974) 176

- 30) M. Beiner, H. Flocard, N.v. Giai, P. Quentin, Nucl. Phys. A 238 (1975) 29
- 31) S. Köhler, Nucl. Phys. A 258 (1976) 301
- 32) H. Krivine, J. Treiner, O. Bohigas, Nucl. Phys. A 366 (1980) 155
- 33) M. Brack, P. Quentin, Phys. Lett. 52 B (1974) 159; Phys. Scripta 10A(1974)163
- 34) W.D. Myers, W.J. Swiatecki, Ann. Phys. (N.Y.) 55 (1969) 395; 84 (1974) 186
- 35) P. Möller, J.R. Nix, Nucl. Phys. A 361 (1981)
- 36) M. Brack, to be published
- 37) R. Bengtsson, P. Schuck, Phys. Lett. 89B (1980) 321
- 38) M. Brack, B.K. Jennings, Nucl. Phys. A 258 (1976) 264
- 39) B. Grammaticos, T. Sami, J. Phys. G 7 (1981) 1063
- 40) L. Münchow, H. Schulz, J. Phys. G 6 (1980) 193
- 41) G. Holzwarth, G. Eckart, Z. Phys. A 284 (1978) 291; Nucl. Phys. A 325 (1979)1; G. Eckart, G. Holzwarth, B. Schwesinger, Phys. Lett. 94 B (1980) 453
- 42) J. Treiner, H. Krivine, O. Bohigas, J. Martorell, Nucl. Phys. A 371 (1981) 253
- 43) M. Brack, W. Stocker, Nucl. Phys. A, in print
- 44) R.K. Bhaduri, Phys. Rev. Lett. 39 (1977) 329
- 45) M. Durand, M. Brack, P. Schuck, Z. Phys. A 286 (1978) 381
- 46) M. Durand, P. Schuck, M. Brack, Z. Phys. A 296 (1980) 87
- 47) J. Bartel, M. Vallières, Phys. Lett. B, in print
- 48) R.K. Bhaduri, M. Brack, H. Gräf, P. Schuck, J. de Physique - Lett. 41 (1980) L - 347