

N° d'ordre : 329

# THÈSE

présentée à la Faculté pour obtenir le grade de :

## Docteur

CED : Sciences et Techniques

Spécialité : Physique des Hautes Energies et Théorique

### **Etude des noyaux loin de la vallée de stabilité par la méthode de Hartree-Fock-Bogoliubov et la théorie covariante de la fonctionnelle de la densité.**

par :

**Younes EL BASSEM**

(Master : Physique des Hautes Energies, Astronomie et Physique Computationnelle)

soutenue le 21 septembre 2019, devant la commission d'examen :

Président :	<b>M. CHABAB</b>	PES, FSSM Marrakech
Examineurs :	<b>Y. TAYALATI</b>	PES, Faculté des Sciences Rabat
	<b>F. FASSI</b>	PES, Faculté des Sciences Rabat
	<b>A. ADAHCHOUR</b>	PES, FSSM Marrakech
	<b>M. OULNE</b>	PES, FSSM Marrakech

## FICHE PRÉSENTATIVE DE LA THÈSE

- ★ *Nom et Prénom de l'auteur* : **EL BASSEM YOUNES.**
- ★ *Intitulé du travail* : **Etude des noyaux loin de la vallée de stabilité par la méthode de Hartree-Fock-Bogoliubov et la théorie covariante de la fonctionnelle de la densité.**
- ★ *Encadrant* : **OULNE Mostafa, PES. LPHEA- Faculté des sciences Semlalia, Université Cadi Ayyad, Marrakech.**
- ★ *Lieux de réalisation des travaux (laboratoires, institution,...)* : **Laboratoire de physique des hautes énergies et astrophysique. Faculté des sciences Semlalia, Université Cadi Ayyad, Marrakech.**
- ★ *Date de commencement du travail* : **Janvier 2014**
- ★ *Rapporteurs autres que l'encadrant (nom, prénom, grade, institution)* :
  - **HOUMMADA Abdeslam, PES, Faculté des Sciences Ain Chok, Université Hassan II Casablanca.**
  - **ANTONOV Anton, PES, Institute of Nuclear Research and Nuclear Energy, Bulgarian Academy of Sciences, Sofia, Bulgaria.**
  - **CHABAB Mohamed, PES. Faculté des Sciences Semlalia Université Cadi Ayyad, Marrakech.**
- ★ *Ce travail a donné lieu aux résultats suivants (publications, communications,...)* :

### Publications :

1. Y. El Bassem & M. Oulne, Nuclear structure investigation of even-even and odd Pb isotopes by using the Hartree-Fock-Bogoliubov method, **International Journal of Modern Physics E** **26 (12), 1750084, 2017.**
2. Y. El Bassem & M. Oulne, Hartree-Fock-Bogoliubov calculation of ground state properties of even-even and odd Mo and Ru isotopes, **Nuclear Physics A** **957, 22-32, 2017**
3. Y. El Bassem & M. Oulne, Ground state properties of even-even and odd Nd, Ce and Sm isotopes in Hartree-Fock-Bogoliubov method, **International Journal of Modern Physics E** **24 (10), 1550073, 2015**
4. Y. El Bassem & M. Oulne, Nuclear structure investigation of even-even Sn isotopes within the covariant density functional theory, **Nuclear Physics A** **987, 16-28, 2019**
5. Y. El Bassem & M. Oulne, Ground state properties and shape evolution in Pt isotopes within the covariant density functional theory, **(under review)**

### Communications Orales :

1. Y. El Bassem & M. Oulne, Ground state properties of even-even Sn isotopes in covariant density functional theory, Journées Nationales des Doctorants et des Jeunes Chercheurs, du 18 au 20 Juillet 2018 à la faculté des sciences, Rabat.
2. Y. El Bassem & M. Oulne, Investigation of ground-state properties of even-even and odd Pb isotopes within Hartree-Fock-Bogoliubov theory, the 36-th International Workshop on Nuclear Theory (IWNT-36), Rila Mountains, Bulgaria, 2017.
3. Y. El Bassem & M. Oulne, Hartree-Fock-Bogoliubov calculation of ground state properties of even-even and odd Mo and Ru isotopes, 1<sup>st</sup> international conference on theoretical physics and high energy physics @ Casablanca, ICTHPC-2016, Casablanca, du 22 au 24 Septembre 2016.
4. Y. El Bassem & M. Oulne, Etude de la structure nucléaire des isotopes pair-pairs et impairs du Plomb (Pb, Z=82) en utilisant la méthode de Hartree-Fock-Bogoliubov, Deuxième Forum de La recherche scientifique FSSM, 20-22 Octobre 2016, Faculté des Sciences Semlalia, Université Cadi Ayyad, Marrakech.
5. Y. El Bassem & M. Oulne, Ground state properties of even-even and odd Nd, Ce and Sm isotopes in Hartree-Fock-Bogoliubov method, La Rencontre Annuelle Plénière du Réseau Universitaire de Physique des Hautes Énergies (RUPHE), 5-6 Juin 2015, Faculté des Sciences Semlalia, Université Cadi Ayyad, Marrakech.

### Communications Affichées :

1. Y. El Bassem & M. Oulne, A systematic study of even-even and odd pb isotopes by using the Hartree-fock-bogoliubov method, Troisième Forum de La recherche scientifique FSSM, 9-11 Mai 2018, Faculté des Sciences Semlalia, Université Cadi Ayyad, Marrakech.
2. Y. El Bassem & M. Oulne, Ground state properties of even-even and odd Nd, Ce and Sm isotopes in Hartree-Fock-Bogoliubov method, la Journée Dédiée à l'Astrophysique, Lundi 28 Mars 2016, Faculté des Sciences Semlalia, Université Cadi Ayyad, Marrakech.
3. Y. El Bassem & M. Oulne, Etude des Noyaux loin de la vallée de stabilité Par la méthode de Hartree-Fock-Bogoliubov, Premier Forum de La recherche scientifique FSSM, 3-5 Juin 2015, Faculté des Sciences Semlalia, Université Cadi Ayyad, Marrakech.
4. Y. El Bassem & M. Oulne, Structure evolution of some nuclear isotopes within Hartree-Fock-Bogoliubov theory, Quantum Africa Conference 3 : Advances in Quantum Sciences, 22-27 Sepembre. 2014, Faculté des Sciences, Université Mohammed V-Agdal, ICTP-Trieste, Rabat.

---

# Etude des noyaux loin de la vallée de stabilité par la méthode de Hartree-Fock-Bogoliubov et la théorie covariante de la fonctionnelle de la densité.

---

Auteur : Younes El BASSEM

Encadrant : Prof. M. OULNE



Laboratoire de Physique des Hautes Énergies et Astrophysique  
Faculté des Sciences Semlalia  
Université Cadi Ayyad  
©2019

# Abstract

The study of nuclei far from the valley of stability represents a new frontier in our understanding of the nuclear structure, because it not only reveals new nuclear properties and thus enriches our knowledge of atomic nuclei, but also helps us to understand the origin of chemical elements in nucleosynthesis.

In this thesis, we study the ground state properties of several isotopic chains, from the proton-rich side to the neutron-rich side, using two different methods, namely : Hartree-Fock-Bogoliubov theory (HFB ) and the covariant density functional theory (CDFT).

The studied properties are : the binding energy, one- and two-neutron separation energies, charge, neutron and proton radii, pairing gap and quadrupole deformation. The results obtained have been compared with the available experimental data and with the predictions of other theoretical models, such as : the Finite Range Droplet Model (FRDM), the Relativistic Mean Field (RMF) model with NL3 functional, ...

The isotopic chains targeted in this work are : Firstly, the isotopes of Neodymium (Nd,  $Z=60$ ), Molybdenum (Mo,  $Z=42$ ) and Lead (Pb,  $Z=82$ ) studied using the HFB method and a new formula that has been proposed for each of the three chains and which gives the optimum value of the pairing force. Secondly, the isotopes of Platinum (Pt,  $Z=78$ ) and Tin (Sn,  $Z=50$ ) studied in the context of the covariant density functional theory.

# Résumé

L'étude des noyaux loin de la vallée de stabilité représente une nouvelle frontière dans notre compréhension de la structure nucléaire, car elle permet non seulement de révéler de nouvelles propriétés nucléaires et enrichir ainsi notre connaissance des noyaux atomiques, mais également nous aide à comprendre l'origine des éléments chimiques dans la nucléosynthèse.

Dans le cadre de ce travail de thèse, nous étudions les propriétés de l'état fondamental de plusieurs chaînes isotopiques, du côté riche en protons au côté riche en neutrons, en utilisant deux méthodes différentes, à savoir : la méthode de Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB) et la théorie covariante de la fonctionnelle de la densité (CDFT). Les propriétés étudiées sont : l'énergie de liaison, l'énergie de séparation d'un et de deux neutrons, les rayons de neutrons, de charge et de protons, le gap d'appariement et la déformation quadripolaire. Les résultats obtenus ont été comparés avec les données expérimentales disponibles et avec les prédictions des autres modèles théoriques, tels que : le modèle de la gouttelette liquide à portée finie (FRDM), le modèle du champ moyen relativiste (RMF) avec la fonctionnelle NL3, ....

Les chaînes isotopiques ciblées dans ce travail sont : Premièrement, les isotopes de Néodyme (Nd,  $Z=60$ ), Molybdène (Mo,  $Z=42$ ) et Plomb (Pb,  $Z=82$ ) étudiés en utilisant la méthode HFB et une nouvelle formule qu'on a proposée pour chacune des trois chaînes et qui donne la valeur optimale de la force d'appariement. Deuxièmement, les isotopes du Platine (Pt,  $Z=78$ ) et de l'Étain (Sn,  $Z=50$ ) étudiés dans le cadre de la théorie covariante de la fonctionnelle de la densité.

## ملخص الأطروحة

تمثل دراسة النوى البعيدة عن الاستقرار حدودًا جديدة في فهمنا للبنية النووية، لأنها لا تكشف فحسب عن خصائص نووية جديدة، مما يثري معرفتنا بالنواة الذرية، ولكنها أيضًا تساعدنا على فهم أصل العناصر الكيميائية في الاصطناع النووي.

في هذه الأطروحة، قمنا بدراسة خصائص الحالة الأساسية لعدة سلاسل من النظائر، من الجانب الغني بالبروتون إلى الجانب الغني بالنوترون، وذلك باستخدام طريقتين مختلفتين، هما : نظرية هارترى فوك بوكوليوبوف (HFB) والنظرية الوظيفية للكثافة المتغيرة (CDFT).

الخصائص المدروسة هي: طاقة الربط، طاقات فصل نوترون واحد ونوترونين، نصف قطر البروتون والنوترون، فجوة الإقران والتشوه الرباعي. قمنا بمقارنة النتائج التي تم الحصول عليها مع البيانات التجريبية المتاحة ومع توقعات النماذج النظرية الأخرى، مثل : نموذج القطرة المحدود (FRDM) ، نموذج الحقل المتوسط النسبية (RMF) وغيرهما.

السلاسل النظائرية المستهدفة في هذا العمل هي: أولاً، نظائر النيوديميوم ( $Z = 60$ ، Nd) ، الموليبيدينوم ( $Z = 42$ ، Mo) والرصاص ( $Z = 82$ ، Pb) والتي تمت دراستها باستخدام طريقة HFB مع صيغة جديدة تم اقتراحها لكل واحدة من السلاسل الثلاث والتي تعطي القيمة المثلى لقوة الإقران. ثانياً، نظائر البلاتين ( $Z = 78$ ، Pt) والقصدير ( $Z = 50$ ، Sn) والتي تمت دراستها في إطار النظرية الوظيفية للكثافة المتغيرة.

*Je dédie cette thèse à ma famille,  
en particulier à ma très chère mère.*



# Remerciements

En préambule à cette thèse, je remercie *ALLAH* qui nous aide et nous donne la patience et le courage durant ces longues années d'étude. Dans ce qui suit, je souhaite adresser mes remerciements les plus sincères aux personnes qui m'ont apporté leur aide et qui ont contribué à l'élaboration de ce travail.

En premier lieu, je voudrais remercier très chaleureusement mon directeur de thèse Mostafa OULNE pour m'avoir accompagné et encadré dans mon travail. Sa grande disponibilité, sa patience, sa passion pour la recherche, ses encouragements constants et ses qualités humaines m'ont permis de passer des années à la fois agréables et enrichissantes au sein du laboratoire de physique des hautes énergies et astrophysique.

Je suis aussi très reconnaissant envers les membres de mon jury pour le temps qu'ils ont accordé à lire ce manuscrit, à assister à ma soutenance, et les discussions intéressantes qui en ont découlées. Je remercie M. Chabab d'avoir présidé le jury, et pour les remarques qu'il a formulées lors de sa lecture du manuscrit en tant que rapporteur. Je remercie A. Antonov et A. Hoummada pour l'honneur qu'ils m'ont fait d'avoir accepté d'être rapporteur de cette thèse, ainsi que pour leurs nombreuses remarques, suggestions, surtout pour l'intérêt qu'ils ont porté à mes travaux. J'exprime toute ma gratitude aux Professeurs F. Fassi, Y. Tayalati et A. Adahchour pour leur participation au jury en tant qu'examineurs.

Je tiens également à exprimer ma gratitude à tous mes collègues pour leurs conseils et leur aide dans la recherche, notamment A. El Batoul, A. Boskri, A. Lahbas, H. Harouiz...

Je finis par remercier ma famille, qui m'accompagne depuis toujours, pour leur soutien du début à la fin, leurs conseils, leur patience, les moments de bonheur qu'ils m'ont apportés. Je remercie tout particulièrement mes parents, mes frères et mes sœurs qui ont toujours été présents pour moi, sans quoi tout cela n'aurait pas été possible.

Merci à tous et à toutes.

Younes EL BASSEM

# Table des matières

<b>Fiche présentative de la thèse</b>	<b>i</b>
<b>Résumé</b>	<b>v</b>
<b>Remerciements</b>	<b>viii</b>
<b>Table des figures</b>	<b>x</b>
<b>Liste des tableaux</b>	<b>xi</b>
<b>Introduction Générale</b>	<b>1</b>
<b>1 Généralités sur la structure nucléaire</b>	<b>5</b>
1.1 Introduction : le noyau atomique . . . . .	5
1.2 Les noyaux exotiques . . . . .	7
1.3 Structure nucléaire et déformation . . . . .	7
1.3.1 La structure nucléaire . . . . .	7
1.3.2 Paramétrisation de la déformation . . . . .	7
1.4 Les modèles nucléaires . . . . .	9
1.4.1 Modèle de la goutte liquide . . . . .	10
1.4.2 Modèle en couches . . . . .	11
<b>2 La théorie de HARTREE-FOCK-BOGOLIUBOV</b>	<b>18</b>
2.1 La théorie de Hartree-Fock . . . . .	18
2.2 Approximation BCS . . . . .	22
2.3 Notion de quasi-particules . . . . .	23
2.4 Les équations de HFB . . . . .	24
2.5 Programme HFBTHO v2.00d . . . . .	27

<b>3</b>	<b>Théorie covariante de la fonctionnelle de la densité</b>	<b>28</b>
3.1	Introduction . . . . .	28
3.2	Le modèle d'échange de mésons . . . . .	28
3.3	Le modèle de couplage ponctuel . . . . .	30
3.4	Programme DIRHB . . . . .	31
<b>4</b>	<b>Propriétés de l'état fondamental des isotopes de Nd, Ce et Sm dans la méthode de HFB</b>	<b>33</b>
4.1	Résumé . . . . .	33
4.2	Détails des calculs . . . . .	33
4.3	Résultats et discussion . . . . .	36
4.3.1	Énergie de liaison . . . . .	37
4.3.2	Énergie de séparation des neutrons . . . . .	40
4.3.3	Rayons de neutrons, de protons et de charges . . . . .	42
4.3.4	Déformation quadrupolaire . . . . .	48
4.4	Conclusion . . . . .	51
<b>5</b>	<b>Calcul HFB des propriétés de l'état fondamental des isotopes de Mo et Ru</b>	<b>53</b>
5.1	Résumé . . . . .	53
5.2	Introduction . . . . .	53
5.3	Détails des calculs . . . . .	54
5.4	Résultats et discussion . . . . .	55
5.4.1	Énergie de liaison . . . . .	56
5.4.2	Énergie de séparation de neutrons . . . . .	61
5.4.3	Rayons de neutron, de proton et de charge . . . . .	62
5.4.4	Le gap d'appariement . . . . .	66
5.4.5	Déformation quadrupolaire . . . . .	70
5.5	Conclusion . . . . .	70
<b>6</b>	<b>Etude de la structure nucléaire des isotopes du Pb à l'aide de la méthode de HFB</b>	<b>73</b>
6.1	Résumé . . . . .	73
6.2	Détails des calculs . . . . .	74
6.3	Résultats et discussion . . . . .	74
6.3.1	Énergie de liaison . . . . .	75

6.3.2	Énergie de séparation de neutrons . . . . .	78
6.3.3	Rayons de neutrons, de protons et de charge . . . . .	79
6.3.4	Déformation quadrupolaire . . . . .	82
6.4	Conclusion . . . . .	86
<b>7</b>	<b>Propriétés de l'état fondamental des isotopes pairs de Sn et de Pt dans la CDFT</b>	<b>88</b>
7.1	Introduction . . . . .	88
7.2	Détails des calculs . . . . .	88
7.3	Étude de la structure nucléaire des isotopes pairs de Sn . . . . .	89
7.3.1	Énergie de liaison . . . . .	89
7.3.2	Énergie de séparation de deux neutrons . . . . .	91
7.3.3	Energie d'appariement . . . . .	92
7.3.4	Déformation quadrupolaire . . . . .	93
7.3.5	Rayons de charge, de protons et de neutrons . . . . .	97
7.4	Propriétés de l'état fondamental des isotopes pairs de Pt . . . . .	100
7.4.1	Énergie de liaison . . . . .	100
7.4.2	Énergie de séparation de deux neutrons . . . . .	102
7.4.3	Déformation quadrupolaire . . . . .	103
7.4.4	Rayons de charge, de proton et de neutron . . . . .	105
7.5	Conclusion . . . . .	107
	<b>Conclusions et Perspectives</b>	<b>110</b>
	<b>Annexe A Programme HFBTHO v2.00d</b>	<b>113</b>
A.1	Fichier de données d'entrée . . . . .	113
A.2	Structure du code . . . . .	119
A.3	Exécution du code . . . . .	120
	<b>Annexe B Structure du paquet de programmes DIRHB</b>	<b>121</b>
B.1	Données d'entrée et de sortie . . . . .	122
B.1.1	Données d'entrée . . . . .	122
B.1.2	Données de sortie . . . . .	123
	<b>Bibliographie</b>	<b>124</b>

# Table des figures

1.1	Charte des noyaux en fonction du nombre de neutrons et de protons . . . . .	6
1.2	Déformations nucléaires dans le plan $(\beta, \gamma)$ . . . . .	9
1.3	Contributions des différents termes dans l'expression de l'énergie de liaison. . . . .	12
1.4	Placement des orbites du modèle en couches . . . . .	14
1.5	Représentation schématique du moment angulaire d'une particule individuelle. . . . .	16
1.6	Energies des états de particules en fonction du paramètre de déformation . . . . .	17
2.1	Représentation des états de particules et de trous dans le spectre HF . . . . .	21
2.2	Représentation du spectre d'un noyau non magique traité avec HF et avec HFB . . . . .	27
4.1	Les forces d'appariement exacte ( $V_{0_{exact}}$ ) et ajustée ( $V_{0_{fit}}$ ). . . . .	36
4.2	Energies de liaison par nucléon des isotopes pairs et impairs de <i>Nd</i> . . . . .	37
4.3	$(BE/A)_{calc}-(BE/A)_{exp}$ . pour les isotopes de <i>Nd</i> . . . . .	39
4.4	$(BE/A)_{calc}-(BE/A)_{exp}$ pour les isotopes de <i>Ce</i> et de <i>Sm</i> . . . . .	39
4.5	Les énergies de liaison totale des isobares de $Nd^{140}$ . . . . .	41
4.6	Comparaison de $S_{2n}$ calculées avec les données expérimentales. . . . .	42
4.7	$R_c$ obtenus par nos calculs HFB comparés aux données expérimentales. . . . .	43
4.8	$\langle r_N^2 \rangle - \langle r_{N=82}^2 \rangle$ en fonction du nombre de neutrons. . . . .	45
4.9	Les rayons de neutrons et de protons des isotopes de <i>Nd</i> , <i>Ce</i> et <i>Sm</i> . . . . .	46
4.10	Les déformations quadrupolaires $\beta_2$ des isotopes de <i>Nd</i> , <i>Ce</i> et <i>Sm</i> . . . . .	50
5.1	$(BE/A)$ des isotopes pairs et impairs de <i>Mo</i> et de <i>Ru</i> . . . . .	60
5.2	$(BE)_{theor} - (BE)_{exp}$ pour les isotopes de <i>Mo</i> et de <i>Ru</i> . . . . .	60
5.3	$S_n$ des isotopes de <i>Mo</i> et de <i>Ru</i> . . . . .	61
5.4	$S_{2n}$ des isotopes de <i>Mo</i> et de <i>Ru</i> . . . . .	62
5.5	Les rayons de charge des isotopes de <i>Mo</i> et de <i>Ru</i> . . . . .	63
5.6	Les rayons de neutrons et de protons des isotopes de <i>Mo</i> et de <i>Ru</i> . . . . .	64

5.7	Les gaps d'appariement des isotopes de <i>Mo</i> et de <i>Ru</i> . . . . .	69
5.8	Les déformations quadrupolaires $\beta_2$ des isotopes de <i>Mo</i> et de <i>Ru</i> . . . . .	70
6.1	BE/A des isotopes du <i>Pb</i> obtenues à partir des calculs HFB avec Sly4 . . . .	75
6.2	$(BE)_{calc} - (BE)_{exp}$ pour les isotopes pairs et impairs de Pb. . . . .	77
6.3	$S_{2n}$ des isotopes de <i>Pb</i> obtenues à partir des calculs HFB avec Sly4. . . . .	79
6.4	$R_c$ des isotopes de <i>Pb</i> obtenus à partir des calculs HFB avec SLy4. . . . .	79
6.5	$(\Delta r_c^2 - \Delta r_{LD}^2)$ des isotopes de <i>Pb</i> obtenus à partir des calculs HFB avec SLy4. . . . .	82
6.6	$(\Delta R = R_n - R_p)$ des isotopes de <i>Pb</i> . . . . .	84
6.7	Les déformations de l'état fondamental, $\beta_2$ , des isotopes de <i>Pb</i> . . . . .	86
7.1	Les énergies de liaison par nucléon pour les isotopes pairs $^{94-168}\text{Sn}$ . . . . .	89
7.2	$(BE)_{thor} - (BE)_{exp}$ pour les isotopes de Sn. . . . .	91
7.3	$S_{2n}$ pour les isotopes $^{94-168}\text{Sn}$ . . . . .	92
7.4	$\delta_{2n}$ des isotopes pairs-pairs de Sn. . . . .	93
7.5	Les énergies d'appariement, $E_{pair}$ , des isotopes $^{94-168}\text{Sn}$ . . . . .	93
7.6	$\beta_2$ des isotopes de Sn . . . . .	94
7.7	Les courbes d'énergie totale de 16 isotopes de Sn obtenues par la CDFT. . . .	96
7.8	$R_c$ obtenus par nos calculs et comparés aux données expérimentales. . . . .	97
7.9	$R_n$ , $R_p$ et $\Delta R = R_n - R_p$ des isotopes de Sn . . . . .	98
7.10	Les énergies de liaison par nucléon des isotopes pairs $^{160-238}\text{Pt}$ . . . . .	100
7.11	$(BE)_{thor} - (BE)_{exp}$ pour les isotopes pairs de Pt. . . . .	102
7.12	$S_{2n}$ pour les isotopes $^{162-238}\text{Pt}$ . . . . .	103
7.13	Les courbes d'énergie totale de $^{160-204}\text{Pt}$ obtenues par la CDFT. . . . .	104
7.14	Surfaces d'énergie potentielle de $^{186-190}\text{Pt}$ dans le plan $(\beta, \gamma)$ . . . . .	106
7.15	$R_c$ obtenus par nos calculs et comparés aux données expérimentales. . . . .	107
7.16	$R_n$ , $R_p$ et $\Delta R = R_n - R_p$ des isotopes de Pt. . . . .	108

# Liste des tableaux

3.1	Les paramètres de DD-ME2 . . . . .	31
3.2	Les paramètres de DD-PC1 . . . . .	32
4.1	Paramètres de la force de Skyrme SLy5 . . . . .	34
4.2	Les énergies de l'état fondamental des isotopes $^{124-161}\text{Nd}$ (en unités de MeV)	35
4.3	Energies de liaison par nucléon des isotopes pairs et impairs de $\text{Nd}$ . . . . .	38
4.4	Les énergies de liaison totale des isobares de $\text{Nd}^{140}$ . . . . .	40
4.5	L'erreur maximale $(S_{2n})_{theor} - (S_{2n})_{exp}$ (en MeV). . . . .	42
4.6	Les rayons de charge des isotopes de Nd (en fm) . . . . .	44
4.7	Les rayons de charge des isotopes de Ce (en fm) . . . . .	44
4.8	Les rayons de charge des isotopes de Sm (en fm) . . . . .	45
4.9	Les rayons de neutrons et de protons des isotopes de Nd (en fm) . . . . .	47
4.10	Les rayons de neutrons et de protons des isotopes de Ce (en fm) . . . . .	48
4.11	Les rayons de neutrons et de protons des isotopes de Sm (en fm) . . . . .	49
4.12	Les déformations quadrupolaires $\beta_2$ des isotopes de Nd. . . . .	51
4.13	Les déformations quadrupolaires $\beta_2$ des isotopes de Ce et Sm. . . . .	52
5.1	Paramètres de la force de Skyrme SLy4. . . . .	55
5.2	Energies de liaison par nucléon pour les isotopes pairs et impairs de $\text{Mo}$ . .	56
5.3	Energies de liaison par nucléon pour les isotopes pairs et impairs de $\text{Ru}$ . .	58
5.4	L'erreur maximale $(BE/A)_{theor} - (BE/A)_{exp}$ (en Mev). . . . .	60
5.5	L'erreur absolue moyenne $(BE)_{theor} - (BE)_{exp}$ . . . . .	61
5.6	L'erreur absolue moyenne $(S_{2n})_{theor} - (S_{2n})_{exp}$ et $(S_n)_{theor} - (S_n)_{exp}$ . . . .	62
5.7	Les rayons de charge des isotopes de Mo. . . . .	63
5.8	Les rayons de charge des isotopes de Ru. . . . .	64
5.9	Les rayons de neutrons et de protons des isotopes de Mo. . . . .	65

5.9	Les rayons de neutrons et de protons des isotopes de Mo (suite...).	66
5.10	Les rayons de neutrons et de protons des isotopes de Ru.	67
5.10	Les rayons de neutrons et de protons des isotopes de Ru (suite...).	68
5.11	Les déformations quadrupolaires $\beta_2$ des isotopes de Mo.	71
5.12	Les déformations quadrupolaires $\beta_2$ des isotopes de Ru.	72
6.1	Les énergies de liaison par nucléon des isotopes du Pb.	76
6.1	Les énergies de liaison par nucléon des isotopes du Pb. (suite...)	77
6.2	rms entre $BE_{calcul}$ et $BE_{exp}$ des isotopes pairs de Pb.	78
6.3	rms entre $BE_{calcul}$ et $BE_{exp}$ des isotopes impairs de Pb.	78
6.4	rms entre $S_{2n}$ (calcul) et $S_{2n}$ (exp) des isotopes pairs de Pb.	78
6.5	Les rayons de charge des isotopes de Pb (en fm).	80
6.5	Les rayons de charge des isotopes de Pb (en fm). (suite...)	81
6.6	Les rayons de neutrons et de protons des isotopes de Pb (en fm).	83
6.6	Les rayons de neutrons et de protons des isotopes de Pb (en fm). (suite...)	84
6.7	Les déformations de l'état fondamental, $\beta_2$ , des isotopes de Pb.	85
7.1	BE/A pour les isotopes pairs $^{94-168}\text{Sn}$ (en MeV).	90
7.2	Les écarts rms des énergies de liaison totales des isotopes de Sn.	91
7.3	Les écarts rms de $S_{2n}$ des isotopes de Sn.	92
7.4	Les énergies d'appariement, $E_{pair}$ , pour les isotopes $^{94-168}\text{Sn}$ .	94
7.5	Les déformations quadrupolaires, $\beta_2$ , des isotopes de Sn.	95
7.6	Les rayons de charge des isotopes de Sn.	98
7.7	Les rayons de neutrons et de protons des isotopes de Sn.	99
7.8	Les énergies de liaison par nucléon des isotopes pairs $^{160-238}\text{Pt}$ .	101
7.9	Les écarts rms des énergies de liaison totales des isotopes de Pt.	102
7.10	Les rayons de charge des isotopes pairs $^{160-238}\text{Pt}$ .	107
7.11	Les rayons de neutrons et de protons des isotopes de Pt.	109



# Introduction Générale

Le noyau atomique est l'un des systèmes physiques les plus complexes et les plus intéressants, présentant une grande variété de comportements tels que la déformation, l'excitation collective ou l'émission de particules. Une compétition intense entre les interactions électromagnétique, forte et faible se produit en son sein. Depuis sa découverte par E. Rutherford [1], il y a plus d'un siècle, de grands efforts expérimentaux et théoriques ont été déployés pour tenter de comprendre ses nombreuses propriétés. Cependant, jusqu'à présent, il n'y a pas de théorie unifiée qui expliquerait tous les phénomènes nucléaires.

Dans la nature, il existe 92 éléments et environ 300 isotopes stables [2] entourés d'environ 2700 isotopes instables. Certains de ces noyaux peuvent être trouvés sur terre, certains sont fabriqués et plusieurs milliers de noyaux sont des espèces exotiques encore inexplorées. Un grand nombre de ces noyaux radioactifs sont caractérisés par une désintégration bêta, tandis que, pour les noyaux plus lourds, les processus tels que l'émission de particules alpha ou la fission spontanée dominent en raison du rôle important joué par l'interaction électromagnétique. Dans la charte nucléaire, en s'éloignant des noyaux stables en ajoutant des protons ou des neutrons, nous atteignons les limites de la stabilité des noyaux, appelées "drip-lines"<sup>1</sup>. Les noyaux au-delà des drip-lines ne sont pas liés contre l'émission de nucléons, c'est-à-dire que pour ces systèmes, l'interaction forte est incapable de lier tous les nucléons dans un noyau.

De nos jours, les recherches en physique nucléaire sont principalement axées sur l'étude des noyaux exotiques très éloignés de la stabilité. Ceux-ci présentent de nouveaux comportements par rapport aux noyaux stables, dont les propriétés sont bien reproduites par les modèles théoriques.

Les données expérimentales jusqu'à aujourd'hui ne sont disponibles que pour les noyaux relativement proches de la ligne de stabilité. Pour beaucoup d'autres, même si elles peuvent être observées, on ne connaît même pas leurs propriétés de base telles que la masse, la forme, la demi-vie et les états d'excitation les plus bas. Le problème réside dans les difficultés expérimentales rencontrées pour obtenir et mesurer les propriétés des systèmes nucléaires à

---

1. La drip-line des neutrons (protons) est la ligne d'émission spontanée de neutron (proton)

courte durée de vie. L'exploration des noyaux loin de la stabilité représente donc une nouvelle frontière dans notre compréhension de la structure nucléaire et de l'astrophysique nucléaire. Pour cette raison, il devient essentiel d'explorer et d'étudier non seulement le comportement du noyau stable bien connu, mais aussi celui des noyaux proches des drip-lines. Dans cette thèse, nous allons explorer les systèmes situés à la limite de la stabilité.

Les noyaux sont décrits par des théories de la structure nucléaire à différents niveaux de raffinement, en partant de méthodes phénoménologiques telles que, par exemple, le modèle microscopique-macroscopique (Mic-Mac) [3–5], en passant par les calculs du modèle en couches (MC) [6–8] et les approches du champ moyen autocohérent (SCMF) [9–11] jusqu'à plusieurs techniques *ab-initio* [12–14] utilisant une interaction nucléon-nucléon (c'est-à-dire, où on résout de manière exacte le problème à N corps). Dans ce qui suit, nous discutons ces différentes méthodes et justifions notre choix d'utiliser celles de Hartree-Fock-Bogoliubov et la théorie covariante de la fonctionnelle de la densité.

Le modèle Mic-Mac, dans lequel l'énergie nucléaire est calculée avec une formule de masse empirique avec des effets quantiques ajoutés en tant que corrections, est appliqué avec succès depuis longtemps au problème de l'énergie de liaison nucléaire ou de la fission [15–17]. Dans cette méthode, on calcule les énergies de particules individuelles dans un potentiel donné qui est ajusté phénoménologiquement aux données nucléaires. Cette méthode ne tient toutefois pas compte des effets autocohérents : les particules créent le potentiel dans lequel elles sont liées et le potentiel influence leur mouvement. Cet effet devrait être de plus en plus important car on considère des systèmes loin de la stabilité.

Le modèle en couches utilisant une interaction de configuration<sup>2</sup> a été étendu aux noyaux moyennement lourds. Ce modèle construit un espace de modélisation dans lequel les particules de valence interagissent via une interaction efficace (éléments de matrice à deux corps). Même si ce dernier est souvent tiré de calculs de matrice G utilisant des forces microscopiques réalistes, certaines combinaisons de ses éléments matriciels sont partiellement reconfigurées sur des données expérimentales dans un espace de configuration donné pour chaque région de masse. En procédant de cette manière, les propriétés spectroscopiques dans l'espace de configuration favorable sont décrites avec une excellente précision [7, 8]. Étant donné que la taille de l'espace modèle augmente rapidement à mesure que les noyaux deviennent plus lourds, l'application de cette méthode est encore limitée dans la région de la masse moyenne.

La théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), souvent appelée "méthode du champ moyen auto-cohérent" (SCMF pour Self-Consistent Mean-Field) [9], est la seule méthode microscopique actuellement applicable à l'ensemble de la charte nucléaire, à l'exception des

---

2. en anglais (configuration interaction - CI) est une méthode post-Hartree-Fock linéaire variationnelle pour la résolution de l'équation de Schrödinger non relativiste dans l'approximation de Born-Oppenheimer.

noyaux très légers, et pour décrire les propriétés de la matière dense (matière uniforme et non uniforme dans les étoiles à neutrons et la supernova). Il convient de souligner que la DFT pour la structure nucléaire représente une application approximative du concept général proposé par Kohn et Sham en physique moléculaire et physique des états condensés[18, 19]. L'ingrédient clé de la DFT est la fonctionnelle de la densité d'énergie qui découle souvent d'une interaction efficace dans le milieu. Cependant, la forme exacte de la fonctionnelle est difficile à déterminer. Une fonctionnelle de densité d'énergie universelle pour le système nucléaire à plusieurs corps est ainsi ajustée phénoménologiquement aux données expérimentales pour les noyaux finis, et les effets de corrélations à plusieurs corps sont récapitulés par l'utilisation d'un potentiel effectif. Au cours des dernières décennies, des DFT non relativistes et relativistes (covariantes) ont été développées et appliquées avec succès à la description d'une grande variété de phénomènes nucléaires, des éléments légers aux plus lourds, de la vallée de stabilité  $\beta$  aux drip-lines, des états fondamentaux aux états excités, avec un grand succès. Il existe trois types de fonctionnelles largement utilisées : la fonctionnelle d'énergie de Skyrme [11, 20, 21], la fonctionnelle d'énergie à portée finie de Gogny/BCP/M3Y [22–27], et la fonctionnelle d'énergie relativiste [28–30].

L'objectif de ce travail de thèse est d'étudier les propriétés de l'état fondamental de plusieurs chaînes isotopiques, allant du côté riche en protons jusqu'au côté riche en neutrons, en utilisant la méthode de Hartree Fock Bogoliubov et la théorie covariante de la fonctionnelle de la densité.

Le présent document est organisé comme suit :

- Le ***premier chapitre*** de ce manuscrit traite de certaines caractéristiques de la structure nucléaire, de la paramétrisation de la déformation du noyau et des deux modèles nucléaires fondamentaux, à savoir : le modèle de la goutte liquide et le modèle en couches.
- Le ***deuxième chapitre*** présente en détails la théorie de Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB), tout en commençant par la méthode de base de Hartree-Fock, puis le traitement des effets d'appariements des nucléons par la méthode de Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS) et enfin les équations de HFB et leur résolution dans le cadre du code HFBTHO (v2.00d) qui utilise des fonctions d'onde transformées de l'oscillateur harmonique comme base de développement des fonctions d'onde du noyau. Une présentation détaillée du code HFBTHO (v2.00d) est donnée en **Annexe A**.
- La théorie covariante de la fonctionnelle de la densité, très efficace dans l'analyse de la structure nucléaire, est présentée dans le ***troisième chapitre***, ainsi que les deux classes des fonctionnelles de la densité utilisés, à savoir : le modèle d'échange de mésons dépendant de la densité (DD-ME) et le modèle de couplage ponctuel dépendant de la densité (DD-PC).

- Dans le *chapitre 4*, nous présentons les résultats de notre étude des propriétés de l'état fondamental de trois chaînes isotopiques, Ne, Ce et Sm dans le cadre de la théorie de Hartree-Fock-Bogoliubov avec la force de Skyrme SLy5. Les calculs ont été faits en utilisant le code HFBTHO (v2.00d) et une nouvelle formule qu'on a proposée et qui donne la valeur de la force d'appariement adéquate pour chaque isotope. Cette formule a permis non seulement de reproduire avec précision les données expérimentales disponibles des noyaux connus, mais aussi de prédire les différentes propriétés de l'état fondamental des noyaux exotiques où les données expérimentales font défaut.
- Dans le *cinquième chapitre*, nous étendons notre étude des propriétés de l'état fondamental en utilisant la théorie HFB à la région des noyaux dont les nombres de neutrons sont proches du nombre magique  $N=50$ , qui présentent des propriétés nucléaires intéressantes. Nous ciblons dans ce chapitre les deux chaînes isotopiques du molybdène (Mo,  $Z = 42$ ) et du ruthénium (Ru,  $Z = 44$ ), en utilisant la force de Skyrme SLy4 et une nouvelle formule de la force d'appariement convenable pour cette région.
- Le *sixième chapitre* présente les résultats de l'étude de la structure nucléaire des isotopes pairs et impairs du plomb ( $^{178-236}\text{Pb}$ ). Les calculs ont été effectués pour une large gamme de nombre de neutrons, en utilisant l'interaction de Skyrme SLy4 et une nouvelle formule proposée de la force d'appariement plus précise pour cette région de noyaux.
- Le *chapitre 7* présente les résultats de l'étude des propriétés de l'état fondamental des isotopes de Sn et de Pt dans le cadre de la théorie covariante de la fonctionnelle de la densité (CDFT) en utilisant les deux fonctionnelles DD-ME2 et DD-PC1 qui donnent une description complète et précise des différents états fondamentaux et excités sur l'ensemble de la charte nucléaire. Ces calculs ont été effectués en utilisant le code informatique DIRHB écrit en langage Fortran par T. Nikšić *et al.* Ce code est présenté en détails en **Annexe B**.
- Enfin, les conclusions et perspectives de ce travail de thèse sont présentées au *chapitre 8*.

# Chapitre 1

## Généralités sur la structure nucléaire

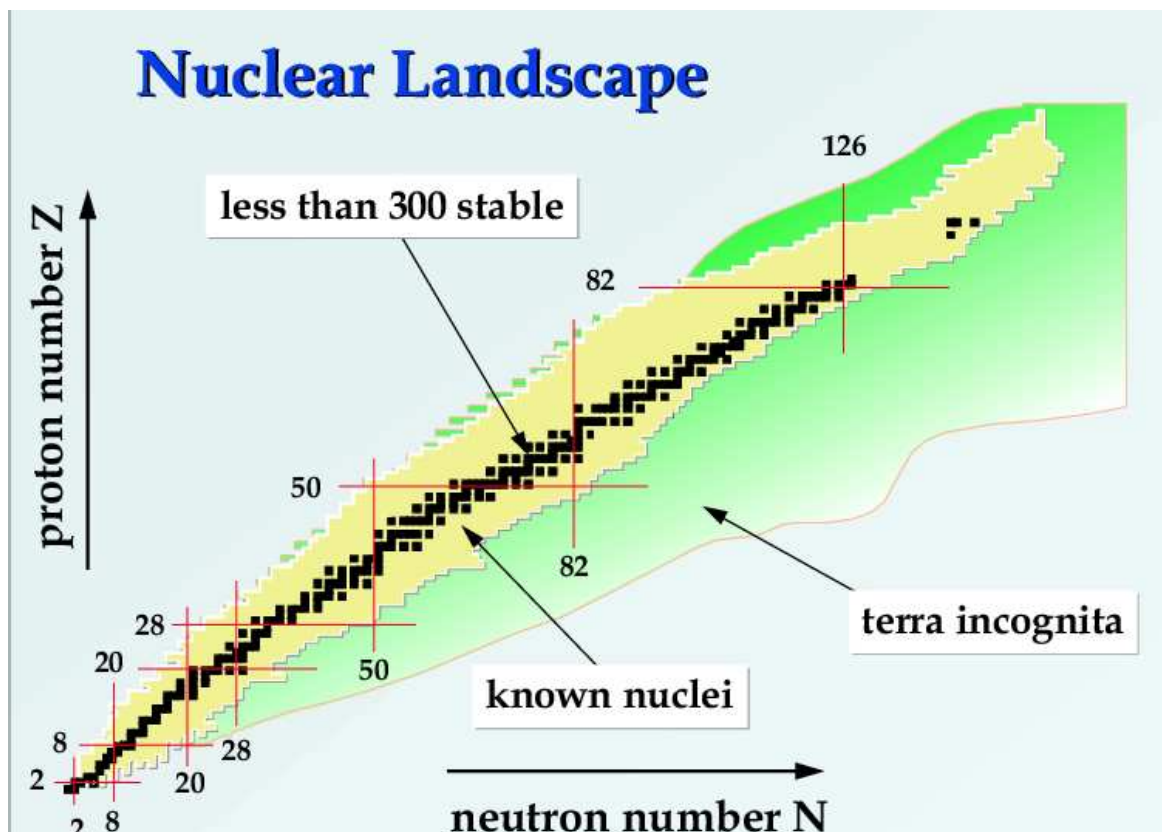
### 1.1 Introduction : le noyau atomique

Le noyau est le cœur de l'atome et contient la majeure partie de sa masse. Il détermine la nature chimique de l'atome à travers sa charge électrique. Les atomes forment les molécules, les composés et les matériaux qui nous entourent, et à partir desquels les êtres vivants sont faits. Comprendre la structure du noyau est un défi majeur.

Le noyau est constitué de  $A$  nucléons avec  $A = N + Z$ , où  $A$  est le nombre de masse,  $N$  et  $Z$  sont respectivement les nombres de neutrons et de protons. Il forme un système lié où les neutrons et les protons sont en forte interaction pour maintenir la cohésion du système.

Il est très fréquent de tracer tous les nucléides connus avec le nombre de neutrons sur l'axe des abscisses et le nombre de protons sur l'axe des ordonnées pour obtenir la dite «charte nucléaire» ou “nuclear landscape” (Fig. 1.1).

La charte nucléaire (Fig. 1.1) montre plusieurs milliers de noyaux qui devraient être liés par la force forte. La région noire montre les noyaux stables, non radioactifs ou à longue durée de vie, avec des demi-vies comparables ou plus longues que l'âge de la terre. Il y a moins de 300 de ces espèces et ils constituent ce qu'on appelle "*la vallée de la stabilité*". Les noyaux légers sont stables si le nombre de protons et le nombre de neutrons sont approximativement égaux. En augmentant le nombre de masse, le nombre de neutrons doit être plus grand que celui de protons afin d'équilibrer la force de répulsion coulombienne entre les protons. En outre, les noyaux avec  $N$  ou  $Z$  égal à certains nombres montrent une stabilité spéciale : les nombres magiques (Ceux qui marquent les lignes rouges horizontales et verticales sur la figure 1.1). Ces noyaux sont de forme sphérique avec des couches nucléaires externes fermées. Alors que d'autres noyaux trouvés loin de la vallée de la stabilité sont également liés, mais ne sont pas complètement stables. Les noyaux avec un excès ou une déficience des neutrons par rapport à la vallée de la stabilité sont instables et donc ils se désintègrent. La région jaune



**FIGURE 1.1** Charte des noyaux en fonction du nombre de neutrons et de protons. Elle montre la vallée de la stabilité des particules et les limites de l'existence nucléaire, ou "drip-lines".

autour de la zone de stabilité de la figure 1.1 indique les noyaux artificiels produits dans les laboratoires avec de courtes demi-vies [31]. Des milliers de noyaux radioactifs avec des rapports de neutrons à protons très petits ou très grands sont encore à explorer, c'est la zone des noyaux instables indiquée en vert sur la figure 1.1 appelée «Terra Incognita», c'est-à-dire en latin «Terre inconnue». En ajoutant des protons ou des neutrons, nous nous éloignons de la vallée de la stabilité, et nous atteignons les limites de la stabilité des particules nucléaires, appelées les "drip-lines" où la liaison nucléaire se termine, les forces entre les protons et les neutrons ne sont plus assez fortes pour les maintenir ensemble. La drip-line des protons est déjà déterminée expérimentalement jusqu'au Protactinium (Pa,  $Z = 91$ ) [32]. Tandis que la drip-line des neutrons est considérablement plus éloignée de la vallée de la stabilité et plus difficile à approcher et elle n'a été déterminée que jusqu'à l'Oxygène (O,  $Z = 8$ ) [33]. La différence de largeur des drip-lines des protons et des neutrons par rapport à la ligne de stabilité s'explique par la force de répulsion de Coulomb, qui devient plus grande à mesure que plus de protons sont ajoutés.

Pour bien comprendre la nature de la structure nucléaire, il devient essentiel d'explorer et d'étudier non seulement le comportement des noyaux stables bien connus, mais aussi ceux exotiques et qui se trouvent à proximité des drip-lines.

## 1.2 Les noyaux exotiques

Les noyaux exotiques sont des noyaux instables présentant de nouveaux comportements et des phénomènes très inattendus par rapport à la vision standard de la structure nucléaire. Le développement de techniques expérimentales de plus en plus performantes permet désormais de produire et d'étudier la structure de ces noyaux. La compréhension des propriétés de ces noyaux exotiques représente actuellement un véritable défi pour les modèles établis à partir des données obtenues sur les noyaux stables. Les expériences menées sur ces noyaux spectaculaires ne suffisent pas pour tester l'universalité des modèles et déduire des informations sur l'interaction nucléaire. Seule une étude systématique au voisinage des noyaux exotiques, le long d'une chaîne isotopique par exemple, permet véritablement d'apporter de nouvelles contraintes sur l'évolution de la structure nucléaire.

## 1.3 Structure nucléaire et déformation

### 1.3.1 La structure nucléaire

La structure nucléaire concerne l'étude des propriétés du noyau. Elle vise à comprendre, à expliquer et à prédire les nombreuses propriétés des noyaux. Le noyau peut être considéré, dans une représentation simple, comme une sphère dont la distribution des neutrons et des protons serait isotrope. Nous retrouvons une telle forme sphérique dans le cas de quelques noyaux et en particulier dans le cas du noyau magique avec des couches nucléaires totalement occupées (8, 20, 28, 50, 82 ...) selon le modèle en couches (Voir Sect. 1.4.2). Néanmoins, afin de minimiser leurs énergies potentielles, la plupart des noyaux s'écartent de la forme sphérique et acquièrent des formes déformées, ce qui leur permet d'être plus stables. Un noyau est considéré comme déformé si sa forme s'écarte de la sphère.

### 1.3.2 Paramétrisation de la déformation

La forme nucléaire peut être exprimée par la paramétrisation suivante du rayon nucléaire qui est, généralement, exprimé en coordonnées sphériques par :

$$R(\theta, \phi) = R_0 \left[ 1 + \sum_{\lambda=1}^{\infty} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} \alpha_{\lambda\mu} Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi) \right] \quad (1.1)$$

avec  $R(\theta, \phi) \in \Re$  et  $R_0$  est le rayon de la sphère du même volume.

Les harmoniques sphériques  $Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi)$  ont les caractéristiques standard :

$$Y_{\lambda\mu}^*(\theta, \phi) = (-1)^\mu Y_{\lambda-\mu}(\theta, \phi) \quad (1.2)$$

et

$$\int Y_{\lambda\mu}^* Y_{\lambda'\mu'} d\Omega = \delta_{\lambda\lambda'} \delta_{\mu\mu'} \quad (1.3)$$

Les paramètres  $\alpha_{\lambda\mu}$  représentent la déformation de la forme. L'équation 1.2 conduit à :

$$\alpha_{\lambda\mu}^*(\theta, \phi) = (-1)^\mu \alpha_{\lambda-\mu}(\theta, \phi) \quad (1.4)$$

avec  $\lambda$  est le mode de déformation (ou degré) et  $\mu$  est l'ordre :

$$\left\{ \begin{array}{l} \lambda = 0 : \text{déformation monopolaire (variation volumique)} \\ \lambda = 1 : \text{déformation dipolaire} \\ \lambda = 2 : \text{déformation quadrupolaire (à symétrie axiale : allongé, aplati)} \\ \lambda = 3 : \text{déformation octupolaire} \\ \lambda = 4 : \text{déformation hexadécapolaire} \end{array} \right.$$

Pour des raisons de symétrie, les paramètres  $\alpha_{\lambda\mu}$  se réduisent à deux variables indépendantes,  $\alpha_{20}$  et  $\alpha_{22} = \alpha_{2-2}$  ;  $\alpha_{21}$  et  $\alpha_{2-1}$  étant nuls. Ces coefficients déterminent l'orientation du noyau dans l'espace et selon les conventions de Hill et Wheeler [34] :

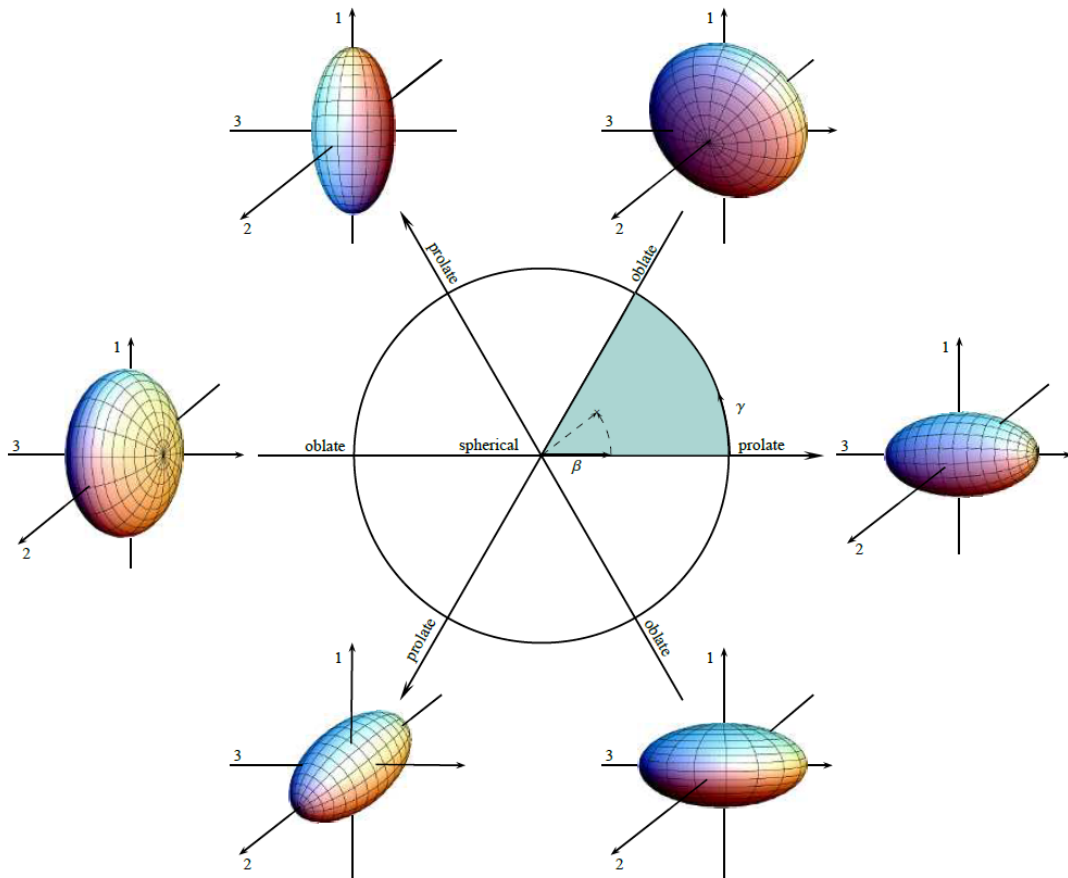
$$\alpha_{20} = \beta \cos(\gamma) \quad \text{et} \quad \alpha_{22} = \frac{1}{\sqrt{2}} \beta \sin(\gamma) \quad (1.5)$$

avec  $\alpha_{20}^2 + 2\alpha_{22}^2 = \beta^2$

$\beta$  est le paramètre de déformation quadrupolaire et  $\gamma$  celui de triaxialité. Les noyaux déformés “prolate”, ayant une forme allongée (l'axe de symétrie est le plus long), sont définis par des valeurs de  $\gamma$  égales à  $0^\circ$ ,  $120^\circ$  ou  $240^\circ$ . En revanche, les noyaux déformés “oblate”, de forme aplatie (l'axe de symétrie est le plus court), sont définis par des valeurs de  $\gamma$  égales à  $60^\circ$ ,  $180^\circ$  ou  $300^\circ$ . Entre ces valeurs du paramètre  $\gamma$ , le noyau devient triaxial, avec trois axes principaux de différentes longueurs.

Un résumé des différentes configurations possibles dans le plan  $(\beta, \gamma)$  est représenté sur la figure 1.2.



FIGURE 1.2 Déformations nucléaires dans le plan  $(\beta, \gamma)$  [35]

## 1.4 Les modèles nucléaires

Après l'avènement de la physique nucléaire dans les années 30 par la découverte d'un noyau atomique chargé par Rutherford [1] en 1911, et l'identification du proton quelques années plus tard, il a fallu attendre 1932 pour que Chadwick mette en évidence l'existence du neutron [36]. Une fois les constituants du noyau ont été identifiés, les physiciens ont alors commencé à proposer des modèles théoriques pour décrire ses propriétés statiques et dynamiques. La plupart de ces modèles sont souvent utilisés localement pour décrire une région spécifique de la charte nucléaire. Tout d'abord, il y avait le modèle de la goutte liquide [37] offrant une description satisfaisante des masses et également capable de donner une première interprétation à la fission des noyaux.

Pour les noyaux légers, le nombre relativement petit de nucléons donne la possibilité d'utiliser l'interaction à deux corps pour reproduire les comportements nucléaires, par exemple : calculs *ab-initio* (fonction de Green - modèle en couches Monte-Carlo) [38]. Les noyaux de masse moyenne jusqu'à  $A \sim 60$  peuvent être traités par le modèle en couche à

grande échelle [6]. Pour les noyaux plus lourds, on utilise des théories de champ moyen soient non relativistes [39, 40] ou relativistes [29, 41].

Dans ce qui suit, certains des modèles précurseurs et plus récents représentant le noyau seront brièvement décrits afin de présenter quelques concepts et formalismes.

### 1.4.1 Modèle de la goutte liquide

Malgré son ancienneté et sa simplicité, le modèle de la goutte liquide (LDM) [37] permet d'excellentes prédictions pour les masses des noyaux. C'est également le premier modèle à donner une interprétation de la fission [42]. Dans ce modèle semi-empirique, le noyau est interprété comme une sphère de liquide visqueux incompressible, composé de nucléons interagissant via l'interaction nucléaire et coulombienne (pour les protons). L'énergie de liaison totale dépend du nombre de protons et neutrons  $Z$  et  $N$  :

$$\begin{aligned}
 B(N, Z) = & \underbrace{a_v A}_{\text{terme de volume}} + \underbrace{a_s A^{2/3}}_{\text{terme de surface}} + \underbrace{a_c \frac{Z^2}{A^{2/3}}}_{\text{term coulombien}} \\
 & + \underbrace{a_a \frac{(N-Z)^2}{A}}_{\text{terme d'asymétrie}} + \underbrace{\delta(A)}_{\text{term d'appariement}}
 \end{aligned} \tag{1.6}$$

Cette expression constitue la formule de Bethe et Weizäcker, obtenue en 1935. Elle fournit l'énergie de liaison d'un noyau quelconque dans un état fondamental. Les termes  $a_v$ ,  $a_s$ ,  $a_c$  et  $a_a$  correspondent respectivement aux coefficients d'énergie de volume, de surface, coulombienne et d'asymétrie.

$$\text{avec : } \left\{ \begin{array}{l}
 a_v : \text{ reflète les interactions entre proches voisins qui à lui seul} \\
 \quad \text{donnerait une énergie de liaison par nucléon constante,} \\
 \quad B/A \approx +16 \text{ MeV.} \\
 a_s : \text{ proportionnel à la surface du noyau } (\propto A^{2/3}), \text{ il traduit le fait} \\
 \quad \text{que les nucléons en surface sont moins liés, puisqu'ils ont un} \\
 \quad \text{nombre de voisins plus faible.} \\
 a_c : \text{ représente la répulsion due à l'interaction coulombienne} \\
 \quad \text{agissant entre les protons } (\propto Z^2). \\
 a_a : \text{ décrit la différence d'énergie créée par des nombres non égaux} \\
 \quad \text{de neutrons et de protons (minimal pour } N = Z).
 \end{array} \right.$$

Les valeurs des coefficients sont ajustées sur des masses mesurées [43]. Elles sont données, ci-dessous, en MeV :

$$a_v = -15.7 \quad ; \quad a_s = 18.6 \quad ; \quad a_c = 0.7 \quad ; \quad a_a = 28.1 \quad . \quad (1.7)$$

Le dernier terme  $\delta(A)$  favorisera en énergie les noyaux à nombres pairs de neutrons et protons et pénalisera les autres cas possibles. Il permet de prendre en compte les corrélations d'appariement. :

$$\delta(A) = \begin{cases} +34 A^{-3/4} & \text{pour les noyaux pairs-pairs,} \\ 0 & \text{pour les noyaux pairs-impairs,} \\ -34 A^{-3/4} & \text{pour les noyaux impairs-impairs.} \end{cases} \quad (1.8)$$

La figure 1.3 représente les contributions des différents termes, à part celui d'appariement, dans la formule de masse 1.6. Nous pouvons voir que, lorsque  $A$  augmente, le terme de surface perd son importance en faveur du terme coulombien. L'énergie de liaison a un large maximum au voisinage de  $A \propto 56$  ce qui correspond aux isotopes de  $Z$  pair du fer et du nickel.

## 1.4.2 Modèle en couches

### 1.4.2.1 Nombres magiques

En observant de plus près les énergies de liaison des nucléides, on trouve que les noyaux ayant des nombres pairs de protons et de neutrons sont plus stables que les noyaux ayant l'un ou l'autre de ces nombres ou les deux impairs. En particulier, certains nombres, de neutrons et de protons, appelés "*nombres magiques*", favorisent la stabilité de ces noyaux. Ces nombres, bien connus dans la littérature, sont 2, 8, 20, 28, 50, 82, 126. Les noyaux, ayant leur nombre de protons ou de neutrons égal à ces valeurs sont appelés "*noyaux magiques*". Si, à la fois, leurs nombres de protons et de neutrons sont des nombres magiques, ces noyaux sont dits "*doublement magiques*". C'est pourquoi, dès le début du XX<sup>ème</sup> siècle, les physiciens ont essayé de reproduire ces résultats expérimentaux par l'élaboration d'un modèle en couches similaire à celui du modèle de l'atome. La saturation de ces couches induit une plus grande stabilité du noyau.

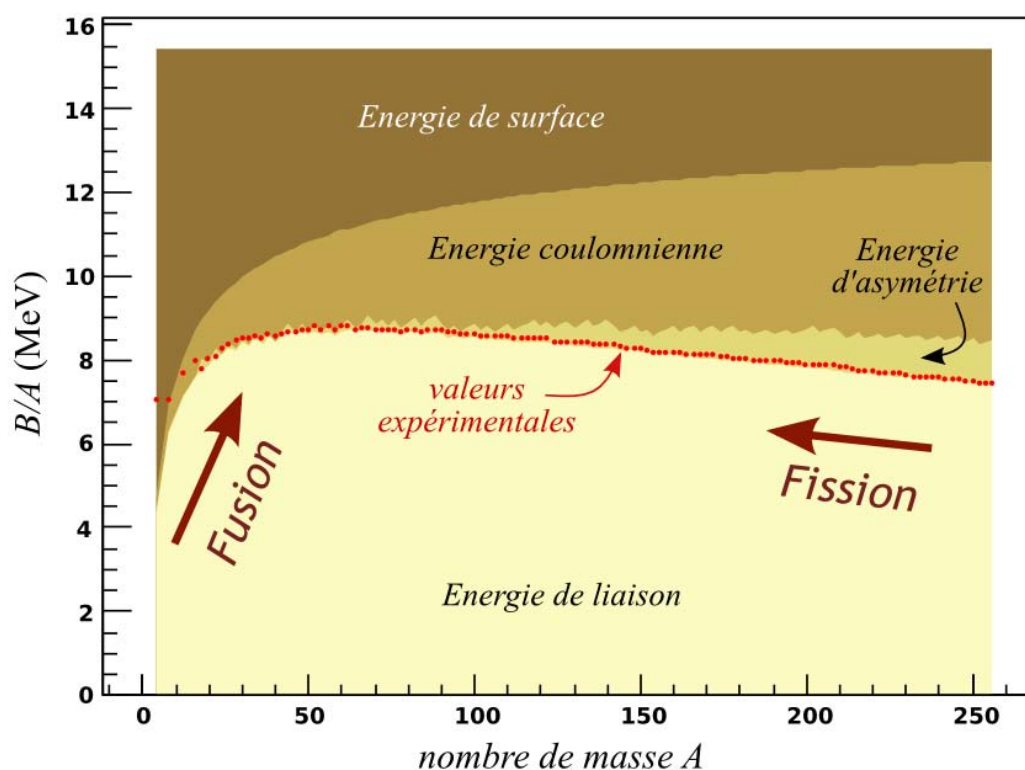


FIGURE 1.3 Contributions des différents termes dans l'expression de l'énergie de liaison.

#### 1.4.2.2 Modèle en couches sphériques

Le modèle en couches [44] a pour objectif de décrire la structure des noyaux connus ainsi que de prédire celle des noyaux non encore étudiés. Donc, en première instance, le modèle en couches doit permettre de retrouver ces nombres magiques établis pour des noyaux stables.

Le modèle en couches décrit des particules indépendantes se déplaçant dans un potentiel moyen engendré par l'ensemble des nucléons. En première approximation, les particules se déplacent librement, sans aucune interaction entre elles. Nous nous trouvons donc confrontés à la résolution d'un problème à 1 corps où chaque particule obéit à l'équation de Schrödinger. Dans le cas du modèle en couches sphériques, l'hamiltonien est constitué d'un potentiel harmonique, donc central. Le choix classique de potentiel moyen central est celui de l'oscillateur harmonique isotrope, invariant par rotation :

$$U(r) = -U_0 + \frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2 \quad (1.9)$$

où  $U_0$  est la profondeur du puits,  $\mu$  la masse réduite du nucléon :  $\mu = m \frac{A-1}{A}$ ,  $m$  étant la masse du nucléon libre et  $r$  la distance entre le nucléon et l'origine du référentiel,  $\omega$  est la fréquence de l'oscillateur harmonique. En raison de la symétrie sphérique, la fonction d'onde d'un nucléon peut être réécrite en séparant les parties angulaire et radiale comme suit :

$$\psi(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (1.10)$$

où  $R_{nl}(r)$  est la fonction radiale et  $Y_{lm}(\theta, \phi)$  sont les fonctions harmoniques sphériques,  $n$  étant le nombre quantique principal et  $l$  et  $m$  sont respectivement le moment angulaire orbital et sa projection sur l'axe de quantification. Les valeurs propres, ou les énergies des états, sont données par :

$$E_{nl} = \left(2n + l - \frac{1}{2}\right)\hbar\omega = \left(N + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega \quad (1.11)$$

avec  $N = 2(n - 1) + l$  le nombre de quanta excités de l'oscillateur harmonique.  $l$  prend des valeurs de 0 à  $N$ . La notation spectroscopique fait correspondre aux valeurs de  $l = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6 \dots$  les lettres :  $s, p, d, f, g, h, i \dots$ . Différentes valeurs de  $n$  et de  $l$  peuvent conduire à une valeur identique de  $N$  ; ces états sont donc dégénérés en énergie, ce qui conduit à la situation se trouvant à l'extrême gauche sur la figure (1.4 (a)) caractérisée par les nombres quantiques  $n$  (nombre de phonons de l'oscillateur). La dégénérescence correspond au nombre de nucléons que peut contenir la couche considérée :  $g = 2(2l + 1)$ . Avec cette formule, le nombre de nucléons dans un noyau avec couches remplies est **2, 8, 20, 40, 70, 112, ...**. On trouve donc les trois premiers nombres magiques mais pas plus.

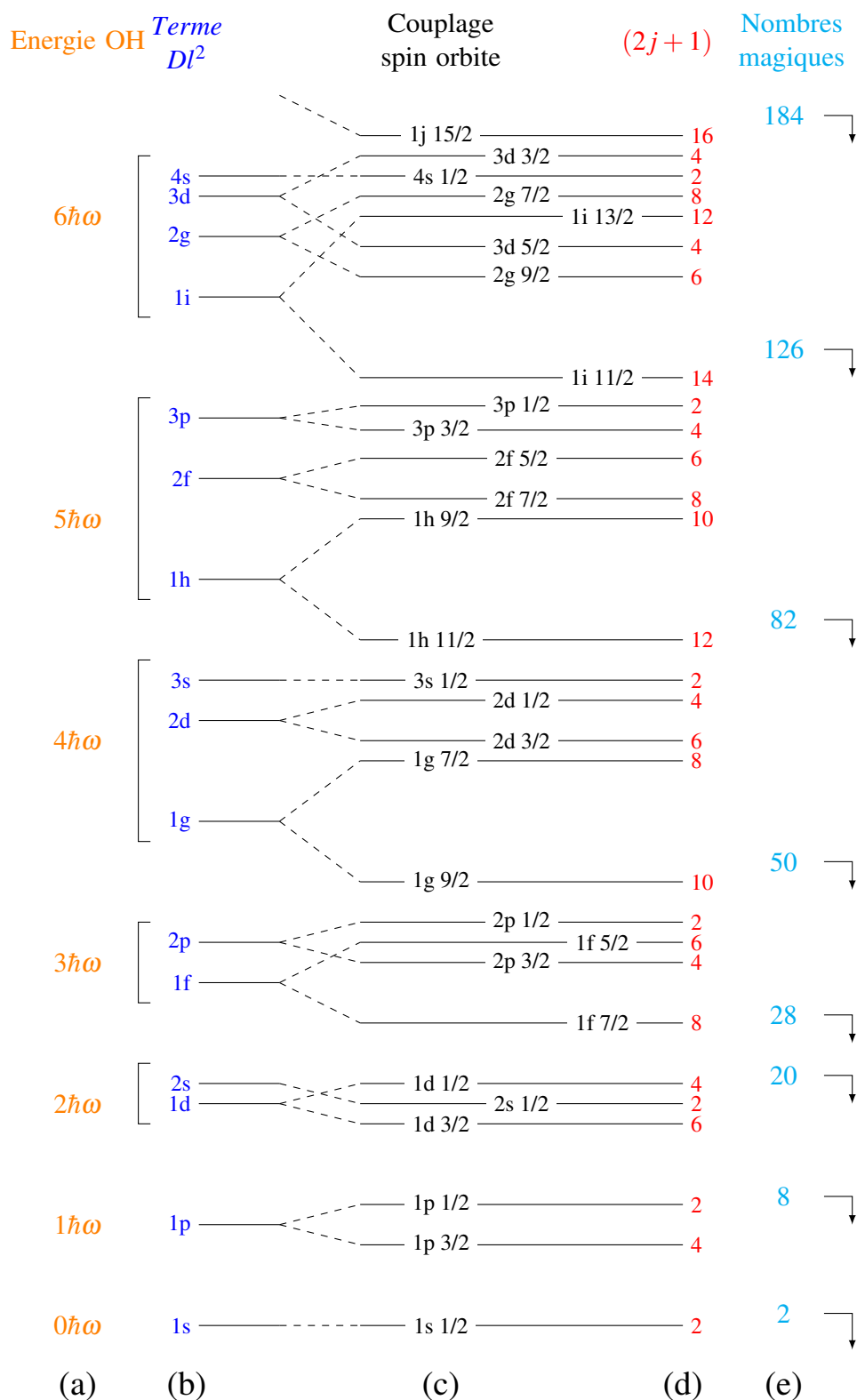
Un potentiel un peu plus compliqué et plus réaliste que celui de l'oscillateur harmonique qui tend vers l'infini, est le potentiel de Woods-Saxon [45]. Il modélise la forme aplatie du fond du puits de potentiel et ainsi reproduit mieux la forme du noyau. Il est paramétrisé par :

$$U(r) = \frac{-U_0}{1 + e^{\frac{r-R_0}{a}}} \quad (1.12)$$

où  $r$  est la distance radiale du potentiel,  $a$  est un paramètre de diffusivité et  $R_0$  est le rayon dans lequel  $U(R) = -U_0/2$  où  $U_0$  définit la profondeur du puits de potentiel. Les valeurs typiques de ces paramètres sont  $U_0 \sim -50 \text{ MeV}$ ,  $R_0 = r_0 A^{1/3}$  avec  $r_0 \sim 1.2 \text{ fm}$  et  $a \sim 0.7 \text{ fm}$ .

L'utilisation de ce potentiel comme potentiel moyen ressenti par chaque nucléon permet de lever la dégénérescence en  $l$  ; les états de plus grande valeur de  $l$  étant plus liés, ils sont plus bas en énergie (voir figure 1.4(b)). Considérer un potentiel de Woods-Saxon est équivalent à ajouter au potentiel de l'oscillateur harmonique un terme en  $l^2$ .

Même en utilisant un potentiel plus proche de la réalité, tel que le potentiel de Woods-Saxon, les nombres magiques ne sont pas reproduits, sauf les 3 premiers (**2, 8, 20**). Il était



**FIGURE 1.4** (a) Energies des états de particules de l'oscillateur harmonique (O.H.) en fonction de  $N$ . (b) Représentation schématique des énergies des états de particules dans le potentiel de Woods-Saxon, ce qui est équivalent à ajouter au potentiel O.H un terme en  $I^2$ . (c) Représentation schématique de la levée de dégénérescence due au terme de couplage spin-orbite; les labels des états sont les nombres quantiques  $nlj$ . (d) Nombre de particules identiques  $(2j+1)$  qui peuvent occuper un état. (e) Au niveau des "gap" en énergie, les nombres magiques sont reproduits.

assez clair qu'un potentiel central n'arrive pas à lui seul à reproduire tous les nombres magiques.

C'est pourquoi, en 1948, M. G. Mayer [46] et, indépendamment, D. Haxel, J. Jensen et H. Suess [47], ont adjoint au potentiel de Woods-Saxon, un potentiel dit de spin-orbite  $U_{so}$ , reflétant l'existence d'un couplage entre le moment angulaire orbital  $\vec{l}$  et le spin  $\vec{s}$  du nucléon :

$$U_{so}(r) = f(r) \vec{l} \cdot \vec{s} \quad (1.13)$$

$f(r)$  est la constante de couplage et  $\vec{s}$  est le spin du nucléon et représente son mouvement intrinsèque.  $\vec{l}$  et  $\vec{s}$  étant couplés, ils ne sont pas de bons nombres quantiques de l'hamiltonien. C'est le moment angulaire total  $\vec{j} = \vec{l} + \vec{s}$  qui est un invariant de  $H$ . Le couplage spin-orbite est dû à l'interaction nucléon-nucléon qui ne dépend pas seulement de la position et du spin des nucléons, mais également de leur vitesse relative. Avec le terme de spin-orbite, les énergies des états  $l$  sont séparées pour  $j = l \pm 1/2$ , les états de plus grand  $j$  étant les plus liés (voir figure 1.4(c)). Le nombre de particules identiques qui peuvent occuper un état quantique, soit la dégénérescence d'une orbitale ( $nlj$ ), est donné par  $2j + 1$  (voir figure 1.4(d)). Avec cette modélisation de l'hamiltonien, la séquence des nombres magiques est alors reproduite (voir figure 1.4(e)). Cependant, ce modèle n'est valable que pour les noyaux sphériques.

#### 1.4.2.3 Modèle en couches déformées de Nilsson

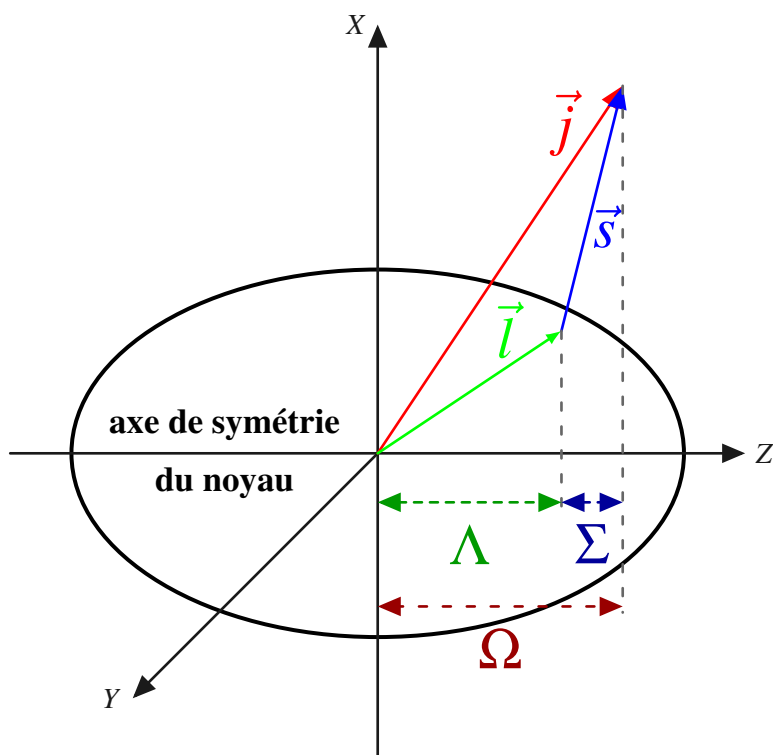
Sous l'influence des nucléons occupant les orbitales non remplies, les noyaux peuvent se déformer afin de minimiser leurs énergies. Une représentation plus adaptée aux noyaux déformés est obtenue avec le modèle en couches déformées de Nilsson [48]. Le raffinement proposé consiste à introduire un potentiel à 3 degrés de liberté. Dans le cas de la symétrie axiale, l'Hamiltonien s'écrit :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \frac{1}{2m}(\omega_{\perp}^2(x^2 + y^2) + \omega_z^2 z^2) - D\vec{l}^2 - C\vec{l} \cdot \vec{s} \quad (1.14)$$

Les fréquences de rotation  $\omega_{\perp}$  et  $\omega_z$  dépendent du paramètre de déformation  $\epsilon$ , par  $\omega_{\perp} = \omega_0(1 + \frac{2}{3}\epsilon)^{\frac{1}{2}}$  et  $\omega_z = \omega_0(1 - \frac{4}{3}\epsilon)^{\frac{1}{2}}$ . Dans ce cas, la symétrie est selon l'axe  $z$ . De plus, nous avons :  $\omega_x = \omega_y = \omega_{\perp}$ .

Les états propres de l'hamiltonien (Eq. 1.14) sont des fonctions d'onde qui dépendent des nombres quantiques  $\Omega^{\pi}[Nn_z\Lambda]$ , représentés sur la figure 1.5 :

- ★  $N$  est le nombre quantique total de l'oscillateur harmonique,
- ★  $n_z$  est le nombre d'oscillations sur l'axe de symétrie,



**FIGURE 1.5** Représentation schématique du moment angulaire  $\vec{j} = \vec{l} + \vec{s}$  d'une particule individuelle. La projection sur l'axe de symétrie du moment orbital  $\vec{l}$  et du spin  $\vec{s}$  sont respectivement  $\Lambda$  et  $\Sigma$ . La projection du moment angulaire total  $\vec{j}$  est  $\Omega$ .

- ★  $\Lambda$  est la projection du moment angulaire orbital  $\vec{l}$  sur l'axe de symétrie,
- ★  $\Omega = \Lambda + \Sigma$  avec  $\Sigma$  la projection du spin intrinsèque sur l'axe de symétrie,
- ★  $\pi$  est la parité de la fonction d'onde et vérifie :  $\pi = (-1)^N = (-1)^l$ .

L'introduction du paramètre de déformation permet la levée de dégénérescence en  $2j + 1$  par rapport au modèle sphérique. Cela est illustré sur le diagramme des énergies des états de particules en fonction du paramètre de déformation  $\epsilon$  dans la région  $Z = 82$  de protons (voir figure 1.6).

La déformation a deux effets. En plus de la levée de la dégénérescence sur la valeur absolue de  $n_z$ , elle favorise en énergie les états de grand  $n_z$  pour des déformations de type prolate, et les états de faible  $n_z$  pour des déformations de type oblate.





## Chapitre 2

# La théorie de HARTREE-FOCK-BOGOLIUBOV

Avant d'aller plus loin, il serait utile de passer en revue les techniques théoriques et les outils de calcul que nous avons utilisés dans notre recherche. Ce chapitre et le suivant seront consacrés à cette tâche.

La théorie standard de Hartree-Fock (HF) est le précurseur du formalisme de Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB). Le premier, basé sur l'image à une seule particule, ne tient pas compte des corrélations d'appariement. Cela n'a pas un grand impact lorsqu'on traite des noyaux proches de la stabilité. Cependant, les effets d'appariement sont plus forts pour les noyaux situés aux extrêmes de la vallée de stabilité et ils doivent être incorporés. Le dernier comprend des corrélations d'appariement auto-cohérentes, ce qui permet à HFB de traiter correctement l'effet d'appariement.

Afin d'avoir une bonne compréhension de la théorie HFB, il est utile de passer en revue un bref résumé de la théorie la plus générale de Hartree-Fock et de la théorie de BCS (Bardeen-Cooper-Schrieffer) de l'appariement [49].

### 2.1 La théorie de Hartree-Fock

De manière similaire à d'autres techniques utilisées en physique nucléaire théorique, la méthode de Hartree-Fock (HF) [43, 9, 50] a été formulée pour la première fois par *Hartree* en 1928 [51], pour décrire de façon plus précise la structure électronique des atomes, en tenant compte de l'interaction électrostatique à deux corps entre les électrons. Mais dans son évaluation, *Hartree* n'a pas inclus les effets du principe de Pauli. *Fock* les a introduit en 1930 [52] par l'antisymétrisation de la relation de *Hartree*. En conséquence, la fonction d'onde peut

être approchée par un produit antisymétrisé des fonctions individuelles. L'approche a été appliquée en physique nucléaire pour la première fois en 1963 par *Kelson* [53].

La méthode de Hartree-Fock (HF) est basée sur l'hypothèse que les nucléons composant le noyau peuvent être considérés comme indépendants dans un champ moyen construit de manière auto-cohérente. Ceci s'explique par la nature quantique des nucléons, le principe de Pauli et la partie fortement répulsive à courte portée de l'interaction nucléon-nucléon. Ainsi, on peut considérer les nucléons comme des particules indépendantes se déplaçant dans un potentiel moyen qu'ils créent eux-mêmes. Contrairement aux approches phénoménologiques de type modèle en couches dans lesquelles le champ moyen nucléaire est postulé sous une forme paramétrisée, les théories auto-cohérentes visent à dériver directement ce champ moyen à partir des interactions entre les nucléons. L'ingrédient de base de ces théories est l'hamiltonien microscopique qui régit la dynamique des nucléons individuels plongés dans un potentiel moyen qu'ils créent collectivement. Cet hamiltonien peut s'écrire sous la forme :

$$H = \sum_{ij} T_{ij} a_i^\dagger a_j + \frac{1}{4} \sum_{ijkl} V_{ijkl} a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k \quad (2.1)$$

où le premier terme correspond à l'énergie cinétique et  $V_{ijkl}$  est l'élément de matrice à deux corps de l'interaction effective. Les opérateurs  $a_i^\dagger$  et  $a_i$  représentent respectivement les opérateurs de création et d'annihilation de fermions dans l'état à un corps  $|i\rangle$ . Ces opérateurs respectant les règles d'anticommutation,

$$[a_i^\dagger, a_j^\dagger]_+ = [a_i, a_j]_+ = 0 \quad \text{et} \quad [a_i, a_j^\dagger]_+ = [a_i^\dagger, a_j]_+ = \delta_{i,j} \quad (2.2)$$

Plusieurs interactions effectives phénoménologiques ont été développées ces dernières années. Ce type d'interaction est représenté sous une forme analytique paramétrisable puis ajusté sur des propriétés générales du milieu nucléaire. Les paramètres sont alors définis une fois pour toutes. Les deux grandes familles de forces utilisées actuellement sont :

- Les forces de portée nulle de type Skyrme [54]. La portée nulle permet de simplifier les calculs numériques. Ces forces sont représentées, mathématiquement, par une distribution de Dirac  $\delta(\vec{r})$  [55] :

$$\begin{aligned} V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = & t_0(1 + x_0 P_\sigma) \delta(\vec{r}) + \frac{1}{2} t_1(1 + x_1 P_\sigma) [\vec{P}^{*2} \delta(\vec{r}) + \delta(\vec{r}) \vec{P}^2] \\ & + t_2(1 + x_2 P_\sigma) \vec{P}^* \cdot \delta(\vec{r}) \vec{P} + \frac{1}{6} t_3(1 + x_3 P_\sigma) [\rho(\vec{R})]^\alpha \delta(\vec{r}) \\ & + iW_0 \vec{\sigma} \cdot [\vec{P}^* \wedge \delta(\vec{r}) \vec{P}]. \end{aligned} \quad (2.3)$$

- Les forces de portée finie basées sur l'interaction de Gogny [22] développée à Bruyères-le-Châtel. Cette fois-ci ce n'est plus la distribution de Dirac qui est utilisée mais une

somme de gaussiennes permettant de traiter de manière plus réaliste la portée à courte distance.

$$V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \sum_{i=1}^2 [W_i + B_i P_\sigma - H_i P_\tau - M_i P_\sigma P_\tau] e^{-\frac{r_i^2}{\mu_i}} + t_3 (1 + x_3 P_\sigma) [\rho(\vec{R})]^\alpha \delta(\vec{r}) \\ + iW_0 \vec{\sigma} \cdot [\vec{P}^* \wedge \delta(\vec{r}) \vec{P}]. \quad (2.4)$$

avec :  $x_i, t_i, \alpha, M_i, H_i, B_i, W_0$  sont les paramètres de l'interaction,

$\vec{P} = \frac{1}{2i}(\nabla_1 - \nabla_2)$ ,  $\vec{P}^*$  le complexe conjugué de  $\vec{P}$  agissant sur la gauche,  $r = r_1 - r_2$ ,  $R = \frac{1}{2}(r_1 + r_2)$ ,  $\sigma = \sigma_1 + \sigma_2$  l'opérateur de spin et  $P_\sigma = \frac{1}{2}(1 + \sigma_1 \cdot \sigma_2)$ .

Après avoir choisi l'interaction effective nucléon-nucléon utilisée, les équations de Hartree-Fock peuvent être résolues de manière auto-cohérente. L'état fondamental du noyau est alors recherché sous la forme d'un produit anti-symétrique des fonctions d'onde individuelles, et peut s'écrire sous la forme d'un déterminant de Slater :

$$|\Psi_{HF}\rangle = \det[\Phi_{\alpha 1}(x_1) \cdot \Phi_{\alpha 2}(x_2) \dots \Phi_{\alpha A}(x_A)] \quad (2.5)$$

avec  $|\Psi_{HF}\rangle$  la fonction d'onde du noyau. Les équations de Hartree-Fock s'obtiennent en minimisant l'énergie totale du noyau :

$$E^{HF} = \frac{\langle \Psi_{HF} | H | \Psi_{HF} \rangle}{\langle \Psi_{HF} | \Psi_{HF} \rangle} \quad (2.6)$$

Nous obtenons ainsi un système auto-cohérent de  $A$  équations non-linéaires définies par :

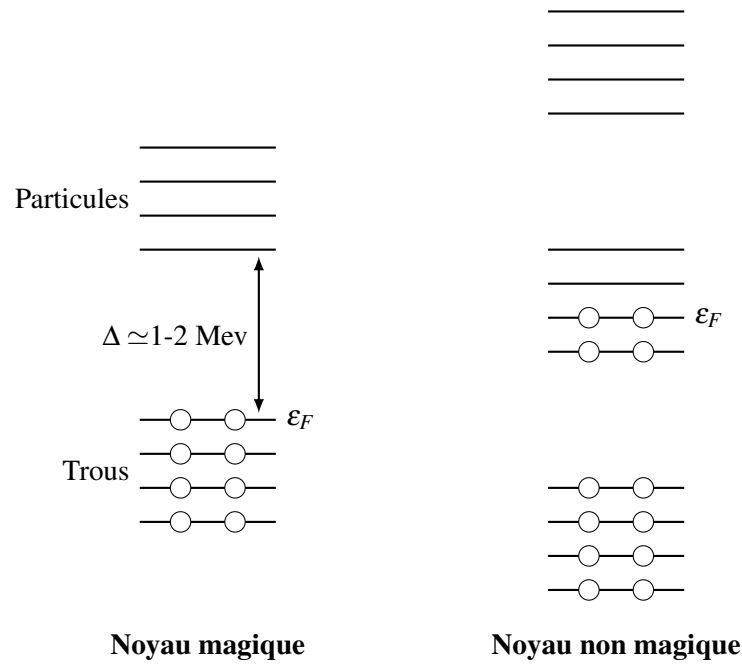
$$h\Phi_{\beta_i} = \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U_{HF}[\Phi_\alpha] \right\} \Phi_{\beta_i} = \epsilon_{\beta_i} \quad i = 1, \dots, A \quad (2.7)$$

avec  $h$  le hamiltonien de Hartree-Fock et  $U_{HF}$  le champ moyen Hartree-Fock qui dépend lui-même des fonctions d'onde individuelles.

Pour résoudre ce système d'équations, il faudrait déjà connaître la solution ! On procède donc de manière itérative en postulant une solution (fonction test) et en l'injectant dans le système, ce qui permet de construire le premier hamiltonien  $HF$  que l'on diagonalise. Les états propres et fonctions propres obtenus sont ensuite utilisés pour reconstruire un nouvel hamiltonien, et ainsi de suite, jusqu'à ce que la variation du jeu de fonctions d'onde entre deux itérations successives soit inférieure à une valeur fixée.

Malheureusement, la méthode HF présente quelques faiblesses qu'il faut garder à l'esprit. Les résultats sont corrects si toutes les autres interactions résiduelles, non prises en compte dans la méthode de Hartree-Fock, peuvent être négligées, et s'il existe un "gap" important

autour du niveau de Fermi, c'est-à-dire s'il existe un écart en énergie important entre le dernier niveau individuel occupé et le premier niveau inoccupé (voir figure 2.1). Cette méthode donnera donc de bons résultats pour les noyaux pair-pairs doublement magiques qui correspondent à des couches remplies. Si au contraire les états individuels de particules sont proches les uns des autres autour du niveau de Fermi, alors plusieurs configurations seront possibles pour l'état fondamental du noyau conduisant à plusieurs fonctions d'onde  $|\Psi_{HF}\rangle$  dégénérées ou quasi-dégénérées. L'introduction des corrélations d'appariement permet de restaurer un "gap" en énergie entre états de "quasi-particules", et ainsi de redonner une bonne solution pour l'état fondamental du noyau.



**FIGURE 2.1** Représentation schématique des états de particules et de trous dans le spectre HF d'un noyau magique (gauche) et d'un noyau non magique (droite). Dans le cas où le niveau de Fermi  $\varepsilon_F$  se situe à la fermeture de couche, il existe un gap important entre celui-ci et l'énergie du premier état individuel vide. Ce n'est pas le cas pour un noyau non magique.

Un autre inconvénient des approches du champ moyen en physique nucléaire est la brisure de symétries (rotation, translation, renversement du temps, ...). Ceci conduit au fait que le Hamiltonien de HF ne garde pas nécessairement les mêmes symétries que celles de l'Hamiltonien effectif (2.1).

## 2.2 Approximation BCS

Expérimentalement, tous les noyaux pairs-pairs possèdent un état fondamental de spin nul, ce qui indique que les nucléons ont tendance à se coupler deux à deux dans des états de spin opposé. Une description réaliste des noyaux doit prendre en compte ces corrélations. Ce qui n'est pas le cas dans l'approximation de Hartree-Fock où l'interaction résiduelle de l'appariement est négligée. C'est pourquoi la méthode de Hartree-Fock est généralement utilisée avec l'approximation BCS [49], proposée par J. Bardeen, L.N. Cooper et J.R. Schrieffer en 1957, qui permet de décrire des corrélations similaires dans la matière condensée supraconductrice. Le concept d'appariement a été introduit en physique de la matière condensée, où, sous l'action d'une interaction attractive (efficace), les électrons peuvent se coupler pour former les paires de Cooper, responsables à basse température du phénomène de supraconductivité.

Dans la théorie BCS, la fonction d'onde de l'état fondamental d'un système pair-pair est approximée par l'expression suivante :

$$|BCS\rangle = \prod_{k>0} (u_k + v_k a_k^\dagger a_{\bar{k}}^\dagger) |0\rangle \quad (2.8)$$

où  $k$  et  $\bar{k}$  représentent des états appariés à une seule particule et sont reliés par l'opérateur de renversement du sens de temps, de telle sorte que l'espace des états à un corps est partitionné en des états  $k > 0$  et des états  $\bar{k} < 0$ .  $u_k$  et  $v_k$  sont les amplitudes d'occupation ( $|v_k|^2$  est la probabilité que la paire  $(k, \bar{k})$  soit occupée et  $|u_k|^2 + |v_k|^2 = 1$ ).

Le système est donc décrit en terme de paires indépendantes, et non en terme de particules indépendantes.

Le nombre de particules dans la théorie BCS n'est pas conservé ; il n'est fixé qu'en valeur moyenne par (en contraignant le système par un multiplicateur de Lagrange  $\lambda$ ) :

$$\langle BCS | \hat{N} | BCS \rangle = \sum_{k>0} 2v_k^2 = N \quad (2.9)$$

Cette violation du nombre de particules n'a pas beaucoup d'importance en physique du solide, où le nombre de particules est typiquement de l'ordre ou proche du nombre d'Avogadro ( $N \simeq 10^{23}$ ). La dispersion qu'on peut montrer être égale à  $1/\sqrt{N}$ , est donc faible. Ceci n'est pas le cas en physique nucléaire où  $N \approx 10 - 100$  et donc le problème devient réel.

L'approximation BCS permet donc un traitement approché des effets d'appariement. Cependant, elle brise une symétrie (celle de la conservation du nombre de particules) qui s'ajoute aux symétries déjà brisées dans l'approximation de HF, ce qui est un point de défaut.

En plus, cette approche présente l'inconvénient de ne pas être adaptée pour le cas des noyaux impairs. Il est nécessaire de la généraliser selon la méthode de Hartree-Fock-Bogolyubov (HFB).

## 2.3 Notion de quasi-particules

Pour tenir compte des effets d'appariement dans le noyau, on doit considérer un état à N corps plus général qu'un déterminant de Slater. Pour cela, on incorpore dans la méthode de Hartree-Fock la gestion des effets de paires dans le noyau à travers le concept de quasi-particules de Bogoliubov dont les opérateurs de création et d'annihilation sont définis par la transformation de Bogoliubov suivante :

$$\begin{cases} \beta_\alpha = \sum_i U_{i\alpha}^* a_i + V_{i\alpha}^* a_i^\dagger \\ \beta_\alpha^\dagger = \sum_i U_{i\alpha} a_i^\dagger + V_{i\alpha} a_i \end{cases} \quad (2.10)$$

On peut noter que :

- Les coefficients  $U_{i\alpha}$  et  $V_{i\alpha}$  sont normés, et on a :

$$\sum_\alpha U_{i\alpha}^2 + V_{i\alpha}^2 = 1$$

- A la limite, pour un état vide - *état de particule* - on a  $U_{i\alpha} = 1$  et  $V_{i\alpha} = 0$ , et pour un état occupé - *état de trou* - on a  $U_{i\alpha} = 0$  et  $V_{i\alpha} = 1$ ,
- $V_{i\alpha}$  est le facteur d'occupation de l'état  $\alpha$ , et on a :

$$\sum_{i,\alpha} V_{i\alpha}^2 = \langle \hat{N} \rangle$$

La transformation de Bogoliubov mélange les opérateurs  $a$  et  $a^\dagger$  pour construire les nouveaux opérateurs de création/annihilation,  $\beta$  et  $\beta^\dagger$ , qui ne correspondent pas à des états de particule mais de quasi-particule.

Les équations (2.10) peuvent être écrites sous forme matricielle :

$$\begin{pmatrix} \beta \\ \beta^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U^\dagger & V^\dagger \\ V^T & U^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ a^\dagger \end{pmatrix} = \mathcal{W}^\dagger \begin{pmatrix} \beta \\ \beta^\dagger \end{pmatrix}, \quad (2.11)$$

où  $\mathcal{W}$  est la matrice des coefficients  $U_{i\alpha}$  et  $V_{i\alpha}$ . Elle est appelée *matrice de Bogoliubov*. La transformation de Bogoliubov préserve les relations d'anticommution. Le calcul des anticommutateurs entre les opérateurs de création  $\beta_i^\dagger$  et d'annihilation  $\beta_j$  de quasi-particules

permet de montrer que la matrice  $\mathcal{W}$  est unitaire :

$$\mathcal{W}\mathcal{W}^\dagger = \mathcal{W}^\dagger\mathcal{W} = \mathbb{1} \quad (2.12)$$

c'est à dire :

$$\begin{aligned} U^\dagger U + V^\dagger V &= 1, & UU^\dagger + V^*V^T &= 1, \\ U^T V + V^T U &= 0, & UV^\dagger + V^*U^T &= 0. \end{aligned} \quad (2.13)$$

## 2.4 Les équations de HFB

Dans l'approximation HFB, l'hamiltonien est essentiellement réduit à deux potentiels : le potentiel moyen auto-cohérent  $\Lambda$  de la théorie de Hartree-Fock, et un champ d'appariement supplémentaire  $\Delta$ , connu de la théorie BCS.

L'état HFB, noté  $|\Phi\rangle$ , est défini comme le vide associé aux opérateurs d'annihilation de quasi-particules  $\beta_i$ . Il vérifie donc, pour tout  $i$  :

$$\beta_i|\Phi\rangle = 0 \quad (2.14)$$

On impose de plus à cet état d'être normé :

$$\langle\Phi|\Phi\rangle = 1 \quad (2.15)$$

L'hamiltonien nucléaire  $H$ , qui décrit le système de  $Z + N = A$  nucléons, contient un terme cinétique  $T$  à un corps et une série de termes  $V^{(n)}$  qui décrivent les interactions simultanées de  $n$  nucléons entre eux :

$$H = T + V^{(2)} + V^{(3)} + \dots + V^{(A)} \quad (2.16)$$

Le terme cinétique  $T$  décrit un système de  $A$  particules libres. Le terme à deux corps décrit l'interaction entre chaque paire de particules :

$$V^{(2)} \equiv \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^A v_{ij} \quad (2.17)$$

où l'opérateur  $v_{ij}$  décrit l'interaction à deux corps entre la particule  $i$  et la particule  $j$ . Les termes décrivant les interactions à trois corps ou plus seront négligés. L'hamiltonien nucléaire  $H$  se réécrit :

$$H \equiv \sum_{i=1}^A t_i + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^A v_{ij} \quad (2.18)$$



et en seconde quantification :

$$H = \sum_{ij} t_{ij} a_i^\dagger a_j + \frac{1}{4} \sum_{ijkl} v_{ijkl} a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k \quad (2.19)$$

avec  $v_{ijkl}$ , les éléments de matrice de l'interaction NN antisymétrisée :

$$v_{ijkl} = \langle ij|v|kl\rangle - \langle ij|v|lk\rangle \quad (2.20)$$

Pour un état HFB  $|\Phi\rangle$  donné, l'énergie moyenne  $E_{HFB}$  de cette configuration sera donnée par :

$$E_{HFB} = \langle \Phi|H|\Phi\rangle = \sum_{ij} t_{ij} \rho_{ij} + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} v_{ijkl} \left[ \rho_{ki} \rho_{lj} + \frac{1}{2} \kappa_{ij}^* \kappa_{kl} \right] \quad (2.21)$$

où  $\rho$  est la matrice densité du système, définie par :

$$\rho_{ij} = \langle \Phi|a_j^\dagger a_i|\Phi\rangle = \sum_m V_i^{m*} V_j^m \quad (2.22)$$

La densité  $\rho$  est une observable, elle est donc hermitienne, soit :  $\rho^\dagger = \rho$ . La trace de la matrice densité correspond au nombre total de particules qu'il contient :

$$N = Tr[\rho] = \sum_{im} V_i^{m*} V_i^m \quad (2.23)$$

La norme du vecteur  $V_i$  donne la contribution des quasi-particules au nombre total de particules  $N$  dans le système. Lorsque  $|V_i|^2 > 1/2$ , c'est un état de trou et lorsque  $|V_i|^2 < 1/2$  c'est un état de particule, en moyenne.

Le terme  $\kappa$  est le tenseur d'appariement (ou densité anormale) définie par :

$$\kappa_{ij} = \langle \Phi|a_j^\dagger a_i|\Phi\rangle = \sum_m V_i^{m*} U_j^m \quad (2.24)$$

Ce tenseur est antisymétrique  $\kappa^\dagger = -\kappa^*$ .

Le terme en  $\kappa^* \kappa$ , dans l'équation de l'énergie  $E_{HFB}$  (Eq. 2.21), représente la contribution des corrélations d'appariement à l'énergie. Dans la limite où l'appariement est nul, on retrouve l'énergie moyenne de la théorie HF.

Il est également utile de définir la matrice densité généralisée, notée  $\mathcal{R}$ , qui permet de regrouper la matrice densité à un corps,  $\rho$ , et le tenseur d'appariement,  $\kappa$ , en une seule matrice. Elle est définie comme :

$$\mathcal{R} = \begin{pmatrix} \rho & \kappa \\ -\kappa^* & 1 - \rho^* \end{pmatrix} \quad (2.25)$$

et dont les vecteurs propres sont les coefficients  $\begin{pmatrix} u_i \\ v_i \end{pmatrix}$  définissant la transformation unitaire de Bogoliubov.  $\mathcal{R}$  est diagonale dans la base de Bogoliubov :

$$\mathcal{W}^\dagger \mathcal{R} \mathcal{W} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.26)$$

On en déduit que  $\mathcal{R}$  est un projecteur hermitien :

$$\mathcal{R}^2 = \mathcal{R} \quad \text{et} \quad \mathcal{R}^\dagger = \mathcal{R} \quad (2.27)$$

On minimise l'énergie  $E_{HFB}$  de la même manière que pour HF, en utilisant un principe variationnel. On obtient alors les équations HFB qui s'écrivent sous forme matricielle :

$$H_{HFB} \begin{pmatrix} u_i \\ v_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} h & \Delta \\ -\Delta^* & -h^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_i \\ v_i \end{pmatrix} = E_i \begin{pmatrix} u_i \\ v_i \end{pmatrix}, \quad (2.28)$$

$$H_{HFB} \begin{pmatrix} u_i^* \\ v_i^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} h & \Delta \\ -\Delta^* & -h^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_i^* \\ v_i^* \end{pmatrix} = -E_i \begin{pmatrix} u_i^* \\ v_i^* \end{pmatrix}, \quad (2.29)$$

où  $h$  est le champ particule-trou (champ Hartree-Fock) défini par :

$$h_{ik} = \frac{\delta(E - \lambda_p Z - \lambda_n N)}{\delta \rho_{ki}} = h_{ki}^* \quad (2.30)$$

et  $\Delta$  est le champ d'appariement dont les éléments de matrices sont :

$$\Delta_{ij} = \frac{\delta(E - \lambda_p Z - \lambda_n N)}{\delta \kappa_{ji}^*} = \Delta_{ji}^* \quad (2.31)$$

$\lambda_p$  et  $\lambda_n$  sont les multiplicateurs de Lagrange correspondant respectivement aux potentiels chimiques des protons et neutrons :

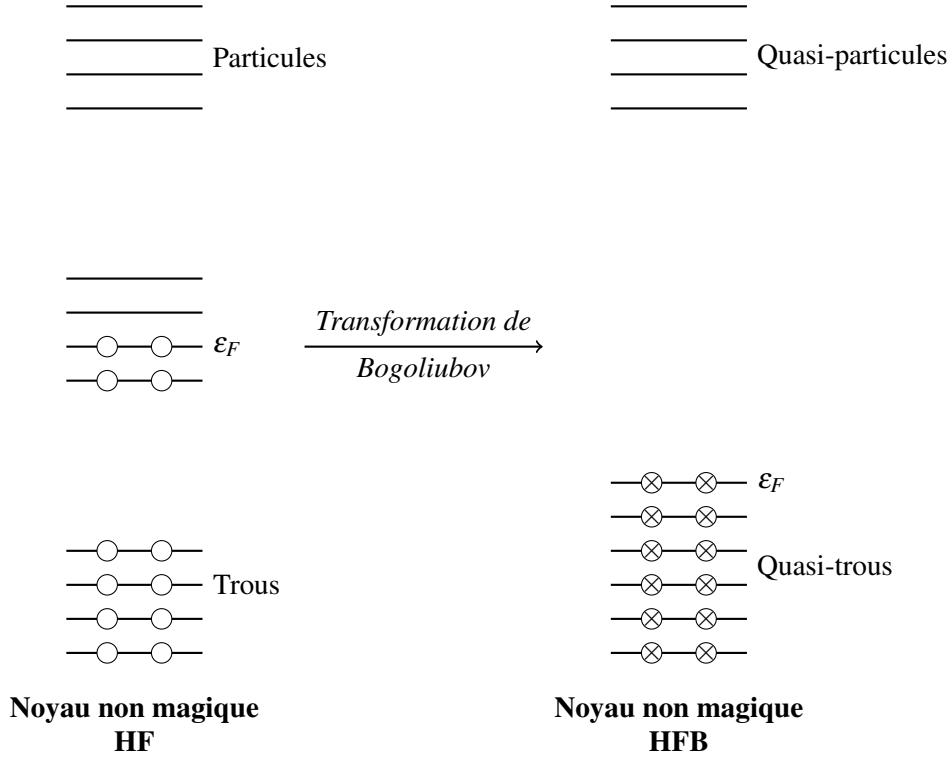
$$\lambda_p = \frac{\delta E}{\delta Z}, \quad \lambda_n = \frac{\delta E}{\delta N} \quad (2.32)$$

ce qui donne pour une force à deux corps ne dépendant pas de la densité, d'après la définition de l'Hamiltonien nucléaire (Eq. 2.19) :

$$h_{ik} = t_{ik} + \sum_{jl} v_{ijkl} \rho_{lj} \quad (2.33)$$

$$\Delta_{ij} = \frac{1}{2} \sum_{kl} v_{ijkl} \kappa_{kl} \quad (2.34)$$

Pour conclure, la théorie HFB permet, grâce à la prise en compte des corrélations d'appariement, d'améliorer la fonction d'onde approchant l'état fondamental dans les noyaux non magiques, et ceci en régénérant un gap au-dessus du niveau de Fermi similaire à celui observé dans les noyaux magiques à l'approximation HF à travers une transformation de Bogoliubov (Comme on peut le voir schématiquement sur la figure 2.2).



**FIGURE 2.2** Représentation schématique du spectre d'un noyau non magique traité avec la théorie HF (gauche) et avec HFB (droite). Un gap entre les états de quasi-trous et quasi-particules est généré via la transformation de Bogoliubov.

## 2.5 Programme HFBTHO v2.00d

La résolution des équations HFB n'est pas une tâche facile, et beaucoup d'efforts sont consacrés au développement de codes informatiques capables de la faire. Un de ces codes a été utilisé pour produire une grande partie des résultats dans cette thèse, ce code est : **HFBTHO v2.00d** [56]. Une présentation bien détaillée de ce code est donnée en Annexe A.

## Chapitre 3

# Théorie covariante de la fonctionnelle de la densité

### 3.1 Introduction

Une approche alternative du système nucléaire à plusieurs corps est possible grâce à la théorie covariante de la fonctionnelle de la densité (CDFT) [57–61], basée sur le concept de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) largement utilisée en physique atomique, physique moléculaire et physique de la matière condensée.

La théorie covariante de la fonctionnelle de la densité (CDFT) est très efficace dans l'analyse de la structure nucléaire [62–69] ainsi que dans la description très détaillée des états fondamentaux et excités dans l'ensemble de la charte nucléaire [70–75]. Dans ce travail de thèse, deux classes de modèles fonctionnelles de densité sont utilisées : le modèle d'échange de mésons dépendant de la densité (DD-ME) et le modèle de couplage ponctuel dépendant de la densité (DD-PC). Les principales différences entre ces deux modèles résident dans le traitement de la portée de l'interaction. DD-ME possède une interaction de portée finie, tandis que DD-PC utilise une interaction de portée nulle avec un terme de gradient supplémentaire dans le canal scalaire-isoscalaire.

### 3.2 Le modèle d'échange de mésons

Dans le cadre du modèle d'échange de mésons, le noyau est considéré comme un système de nucléons de Dirac, qui interagissent via l'échange de mésons de masses finies conduisant à une interaction à portée finie [76, 77].

Le modèle d'échange de mésons est défini par la densité lagrangienne standard suivante :

$$\begin{aligned} \mathcal{L} = & \bar{\Psi} [\gamma(i\partial - g_\omega \omega - g_\rho \vec{\rho} \vec{\tau} - eA) - m - g_\sigma \sigma] \Psi + \frac{1}{2}(\partial \sigma)^2 - \frac{1}{2}m_\sigma^2 \sigma^2 \\ & - \frac{1}{4}\Omega_{\mu\nu}\Omega^{\mu\nu} + \frac{1}{2}m_\omega^2 \omega^2 - \frac{1}{4}\vec{R}_{\mu\nu}\vec{R}^{\mu\nu} + \frac{1}{2}m_\rho^2 \vec{\rho}^2 - \frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} \end{aligned} \quad (3.1)$$

avec  $m$  est la masse du nucléon, et  $\Psi$  désigne les spineurs de Dirac. Les masses  $m_\sigma$ ,  $m_\omega$ , et  $m_\rho$  sont celles des mésons  $\sigma$ ,  $\omega$ , et  $\rho$  avec les constantes de couplage  $g_\sigma$ ,  $g_\omega$ , et  $g_\rho$ , respectivement.  $e$  est la charge des protons et qui s'annule pour les neutrons.  $\Omega^{\mu\nu}$ ,  $\vec{R}^{\mu\nu}$  et  $F^{\mu\nu}$  sont les tenseurs des champs vecteurs  $\omega$ ,  $\rho$  et le proton :

$$\Omega^{\mu\nu} = \partial^\mu \omega^\nu - \partial^\nu \omega^\mu, \quad (3.2)$$

$$\vec{R}^{\mu\nu} = \partial^\mu \vec{\rho}^\nu - \partial^\nu \vec{\rho}^\mu, \quad (3.3)$$

$$\mathbf{F}^{\mu\nu} = \partial^\mu \mathbf{A}^\nu - \partial^\nu \mathbf{A}^\mu. \quad (3.4)$$

Dans les expressions ci-dessus, les isovecteurs sont désignés par des flèches et les symboles en gras sont utilisés pour les vecteurs dans un espace tridimensionnel ordinaire.

À partir de la densité Lagrangienne, nous obtenons la densité Hamiltonienne  $\mathcal{H}(r)$  [29]. En l'intégrant dans l'espace  $\vec{r}$ , nous obtenons l'énergie totale, qui dépend des spineurs de Dirac et des champs de mésons.

$$E[\Psi, \bar{\Psi}, \sigma, \omega^\mu, \vec{\rho}^\mu, \mathbf{A}^\mu] = \int d^3r \mathcal{H}(\mathbf{r}). \quad (3.5)$$

Ce modèle linéaire a été introduit pour la première fois par Walecka [78, 79]. Cependant, ce modèle simple n'a pas réussi à décrire les propriétés de surface des noyaux réalistes. En particulier, l'incompressibilité de la matière nucléaire infinie qui en résulte est beaucoup trop grande [80] et les déformations nucléaires sont trop petites [81]. Par conséquent, pour une description réaliste des propriétés d'un système nucléaire complexe, on peut introduire soit un auto-couplage non linéaire, soit une dépendance de densité dans les constantes de couplage.

Pour l'auto-couplage non linéaire, Boguta et Bodmer [80] ont introduit une dépendance de densité via un couplage de méson non linéaire remplaçant le terme  $\frac{1}{2}m_\sigma^2 \sigma^2$  dans l'équation (3.1) par :

$$U(\sigma) = \frac{1}{2}m_\sigma^2 \sigma^2 + \frac{1}{3}g_2 \sigma^3 + \frac{1}{4}g_3 \sigma^4. \quad (3.6)$$

Ce modèle a été utilisé avec succès dans plusieurs études [82–84].

Dans le cas des constantes de couplage dépendantes de la densité, on définit la dépendance comme :

$$g_i(\rho) = g_i(\rho_{\text{sat}})f_i(x) \quad \text{pour } i = \sigma, \omega, \rho \quad (3.7)$$

$i$  peut être l'un des trois mésons  $\sigma$ ,  $\omega$  et  $\rho$ . Il n'y a pas de termes non linéaires dans le méson  $\sigma$ , c'est-à-dire  $g_2 = g_3 = 0$ . La dépendance de densité est donnée par

$$f_i(x) = a_i \frac{1 + b_i(x + d_i)^2}{1 + c_i(x + d_i)^2} \quad (3.8)$$

pour  $\sigma$  et  $\omega$ , et pour le méson  $\rho$  par :

$$f_\rho(x) = \exp(-a_\rho(x - 1)) \quad (3.9)$$

$x$  est défini comme le rapport entre la densité baryonique  $\rho$  à un endroit spécifique et la densité baryonique à saturation  $\rho_{\text{sat}}$  en matière nucléaire symétrique. Les paramètres dans Eq. (3.8) sont contraints comme suit :

$$f_i(1) = 1, \quad f''_\sigma(1) = f''_\omega(1), \quad \text{and } f'_i(0) = 0. \quad (3.10)$$

Ces contraintes réduisent à trois le nombre de paramètres indépendants pour la dépendance à la densité.

Dans le chapitre 7, on va utiliser la très efficace fonctionnelle de l'énergie relativiste par échange de mésons dépendant de la densité DD-ME2 [58] avec les paramètres donnés dans le tableau 3.1.

### 3.3 Le modèle de couplage ponctuel

Le modèle de couplage ponctuel représente une formulation alternative du cadre RMF auto-cohérent [85–88]. Le lagrangien du modèle de couplage ponctuel dépendant de la densité [60, 89] est donné par :

$$\begin{aligned} \mathcal{L} = & \bar{\psi}(i\gamma \cdot \partial - m)\psi - \frac{1}{2}\alpha_S(\hat{\rho})(\bar{\psi}\psi)(\bar{\psi}\psi) - \frac{1}{2}\alpha_V(\hat{\rho})(\bar{\psi}\gamma^\mu\psi)(\bar{\psi}\gamma_\mu\psi) \\ & - \frac{1}{2}\alpha_{TV}(\hat{\rho})(\bar{\psi}\vec{\tau}\gamma^\mu\psi)(\bar{\psi}\vec{\tau}\gamma_\mu\psi) - \frac{1}{2}\delta_S(\partial_\nu\bar{\psi}\psi)(\partial^\nu\bar{\psi}\psi) \\ & - e\bar{\psi}\gamma \cdot \mathbf{A}\frac{(1 - \tau_3)}{2}\psi \end{aligned} \quad (3.11)$$

Il contient le Lagrangien à nucléon libre, les termes d'interaction du couplage de points, et le couplage du proton au champ électromagnétique. Les termes dérivés dans Eq. (3.11)

TABLE 3.1 Les paramètres de DD-ME2

Parameter	DD-ME2
$m$	939
$m_\sigma$	550.1238
$m_\omega$	783.000
$m_\rho$	763.000
$g_\sigma$	10.5396
$g_\omega$	13.0189
$g_\rho$	3.6836
$a_\sigma$	1.3881
$b_\sigma$	1.0943
$c_\sigma$	1.7057
$d_\sigma$	0.4421
$a_\omega$	1.3892
$b_\omega$	0.9240
$c_\omega$	1.4620
$d_\omega$	0.4775
$a_\rho$	0.5647

expliquent les principaux effets de l'interaction à portée finie, qui sont essentiels pour une description quantitative des propriétés nucléaires. La forme fonctionnelle des couplages ponctuels choisis est :

$$\alpha_i(\rho) = a_i + (b_i + c_i x)e^{-d_i x}, \quad (i = S, V, TV) \quad (3.12)$$

où  $x = \rho/\rho_{sat}$ , et  $\rho_{sat}$  désigne la densité de nucléons à saturation en matière nucléaire symétrique.

Ce modèle contient des interactions isoscalaire-scalaire, isoscalaire-vecteur et isovecteur-vecteur, par analogie avec les modèles DD-ME. Dans le présent travail, nous avons utilisé l'interaction de couplage ponctuel dépendant de la densité DD-PC1 [60] récemment développée, avec les paramètres cités dans le tableau 3.2.

### 3.4 Programme DIRHB

Dans cette partie de thèse nous avons utilisé le paquet DIRHB[57] qui se compose de trois codes informatiques Fortran pour le calcul des propriétés de l'état fondamental des noyaux atomiques pairs, dans le cadre des modèles de champ moyen autocohérents relativistes. Chaque code correspond à un choix particulier de symétrie spatiale : Les codes DIRHBS, DIRHBZ et DIRHBT sont utilisés pour étudier les noyaux avec une symétrie sphérique,

**TABLE 3.2** Les paramètres de DD-PC1

Parameter	DD-PC1
$m$	939
$a_\sigma$	-10.04616
$b_\sigma$	-9.15042
$c_\sigma$	-6.42729
$d_\sigma$	1.37235
$a_\omega$	5.91946
$b_\omega$	8.86370
$d_\omega$	0.65835
$b_\rho$	1.83595
$d_\rho$	0.64025

axiale et triaxiale, respectivement. La symétrie de réflexion est supposée dans les trois cas. Les dernières fonctionnelles de densité d'énergie nucléaire relativistes sont implémentées dans les codes, permettant ainsi des calculs efficaces et précis sur toute la charte nucléaire. Une présentation bien détaillée de ce code est donnée en Annexe [B](#).



## Chapitre 4

# Propriétés de l'état fondamental des isotopes pairs et impairs de Nd, Ce et Sm dans la méthode de Hartree-Fock-Bogoliubov

### 4.1 Résumé

Dans ce travail, nous avons étudié les propriétés de l'état fondamental des isotopes pairs-pairs et impairs de Néodyme (Nd,  $Z=60$ ) par la méthode de Hartree-Fock-Bogoliubov avec la force de Skyrme SLy5. La force d'appariement utilisée dans ce calcul a été généralisée avec une nouvelle formule qu'on a proposée. Nous avons calculé les énergies de liaison, les énergies de séparation de deux neutrons, les déformations quadrupolaires, les rayons de charge, de neutrons et de protons. Afin de vérifier la validité de notre formule de la force d'appariement, des calculs similaires ont été effectués pour les isotopes de Cérium (Ce,  $Z=58$ ) et de Samarium (Sm,  $Z=62$ ). Les résultats ont été comparés avec les données expérimentales disponibles et avec les prédictions de certains modèles nucléaires tels que Hartree-Fock-Bogoliubov basé sur l'interaction efficace nucléon-nucléon de Gogny D1S, le modèle de la gouttelette liquide à portée finie (Finite Range Droplet Model, FRDM) et la théorie du champ moyen relativiste (RMF).

### 4.2 Détails des calculs

Dans cette partie, une forme paramétrique de l'énergie totale HFB avec la force de Skyrme SLy5 a été utilisée comme dans Ref. [56]. Les propriétés de l'état fondamental des

isotopes pairs-pairs et impairs de Néodyme,  $^{124-161}\text{Nd}$ , ont été reproduites en utilisant le code HFBTHO (v2.00d) qui utilise la base à une seule particule de l'oscillateur harmonique transformé axialement (THO). Il diagonalise itérativement l'hamiltonien HFB sur la base des densités d'énergie généralisées de type Skyrme et des interactions d'appariement à portée nulle jusqu'à ce qu'une solution auto-cohérente soit trouvée. Voir l'article [90] pour plus de détails.

Il existe différents ensembles de paramètres des forces de Skyrme pour la prédiction des propriétés de l'état fondamental du noyau. L'ensemble de paramètres SLy5 [91] utilisé dans cette étude est présenté dans le tableau 4.1.

TABLE 4.1 Paramètres de la force de Skyrme SLy5

Parameter	SLy5
$t_0$ (MeV fm <sup>3</sup> )	-2484.88
$t_1$ (MeV fm <sup>5</sup> )	462.18
$t_2$ (MeV fm <sup>5</sup> )	-448.61
$t_3$ (MeV fm <sup>4</sup> )	13673
$x_0$	0.825
$x_1$	-0.465
$x_2$	-1.0
$x_3$	1.355
$W_0$ (MeV fm <sup>3</sup> )	126
$\sigma$	1/6

Dans le fichier de données d'entrée du programme HFBTHO (v2.00d) [56], nous avons modifié les valeurs de la force d'appariement pour les neutrons  $V_0^n$  et les protons  $V_0^p$  (en MeV), qui peuvent être différentes, mais dans notre étude nous avons utilisé la même force d'appariement  $V_0^{n,p}$  pour les deux. À chaque fois, nous avons exécuté le programme et comparé l'énergie de l'état fondamental obtenue avec la valeur expérimentale. Cette procédure a été répétée jusqu'à ce que nous trouvions la valeur de  $V_0^{n,p}$  qui donne l'énergie de l'état fondamental la plus proche de celle expérimentale.

Les énergies calculées de l'état fondamental des isotopes  $^{124-161}\text{Nd}$ , obtenues dans ce travail avec les forces d'appariement correspondantes  $V_0^{n,p}$  et les données expérimentales [92] sont indiquées dans le tableau 4.2.

D'après le tableau 4.2, on peut constater qu'il y a une relation entre la force d'appariement  $V_0^{n,p}$  et le nombre de masse  $A$ . En ajustant les valeurs obtenues de  $V_0^{n,p}$  aux nombres de masses  $A$ , nous avons trouvé la formule suivante :

$$V_0^{n,p} = 170.95 A^{\frac{1}{6}} \quad (4.1)$$

**TABLE 4.2** Les énergies à l'état fondamental des isotopes  $^{124-161}\text{Nd}$  (en unités de MeV) obtenues dans ce travail en utilisant la méthode HFB avec la force de Skyrme SLy5.

Noyaux	Experience	Calcul	$V_0^{n,p}$
$^{124}\text{Nd}$	998.4480	998.4436	380.9
$^{125}\text{Nd}$	1009.6250	1009.6251	389.8
$^{126}\text{Nd}$	1022.9940	1022.9924	381.8
$^{127}\text{Nd}$	1033.6530	1033.6392	389.4
$^{128}\text{Nd}$	1046.5280	1046.5205	384.0
$^{129}\text{Nd}$	1056.5100	1056.5037	392.4
$^{130}\text{Nd}$	1068.9263	1068.9317	386.3
$^{131}\text{Nd}$	1078.1693	1078.1600	390.6
$^{132}\text{Nd}$	1089.8989	1089.8940	384.1
$^{133}\text{Nd}$	1098.8726	1098.8726	392.3
$^{134}\text{Nd}$	1110.2623	1110.2661	382.0
$^{135}\text{Nd}$	1118.9002	1118.9133	387.1
$^{136}\text{Nd}$	1129.9573	1129.9546	380.8
$^{137}\text{Nd}$	1138.4138	1138.4186	388.2
$^{138}\text{Nd}$	1148.9190	1148.9115	379.9
$^{139}\text{Nd}$	1156.9873	1156.9768	386.1
$^{140}\text{Nd}$	1167.2976	1167.2870	370.4
$^{141}\text{Nd}$	1175.3083	1175.3016	391.5
$^{142}\text{Nd}$	1185.1361	1185.1350	377.7
$^{143}\text{Nd}$	1191.2596	1191.2528	393.1
$^{144}\text{Nd}$	1199.0767	1199.0689	376.7
$^{145}\text{Nd}$	1204.8319	1204.8252	392.9
$^{146}\text{Nd}$	1212.3972	1212.3944	386.4
$^{147}\text{Nd}$	1217.6894	1217.6898	392.9
$^{148}\text{Nd}$	1225.0219	1225.0129	385.6
$^{149}\text{Nd}$	1230.0607	1230.0599	392.2
$^{150}\text{Nd}$	1237.4358	1237.4304	387.7
$^{151}\text{Nd}$	1242.7704	1242.7757	398.0
$^{152}\text{Nd}$	1250.0480	1250.0499	392.9
$^{153}\text{Nd}$	1255.3010	1255.3112	403.9
$^{154}\text{Nd}$	1261.7220	1261.7247	396.1
$^{155}\text{Nd}$	1266.3965	1266.3885	405.4
$^{156}\text{Nd}$	1272.6636	1272.6725	398.8
$^{157}\text{Nd}$	1276.7177	1276.7125	406.8
$^{158}\text{Nd}$	1282.3280	1282.3388	399.1
$^{159}\text{Nd}$	1286.1510	1286.1507	406.7
$^{160}\text{Nd}$	1291.6800	1291.6796	400.3
$^{161}\text{Nd}$	1295.0840	1295.0885	408.0

qui donne pour chaque isotope de nombre de masse  $A$ , la valeur optimale de la force d'appariement  $V_0^{n,p}$ .

Sur la figure 4.1, nous présentons deux courbes qui montrent la variation de  $V_0$  en fonction du nombre de masse  $A$ . La courbe solide (rouge) est obtenue à partir des données du tableau 4.2 (Colonne 4), et la courbe en pointillé (bleue) est la représentation graphique de l'équation (4.1). L'écart moyen entre  $V_{0_{fit}}$  et  $V_{0_{exact}}$  est d'environ 5.05 MeV.

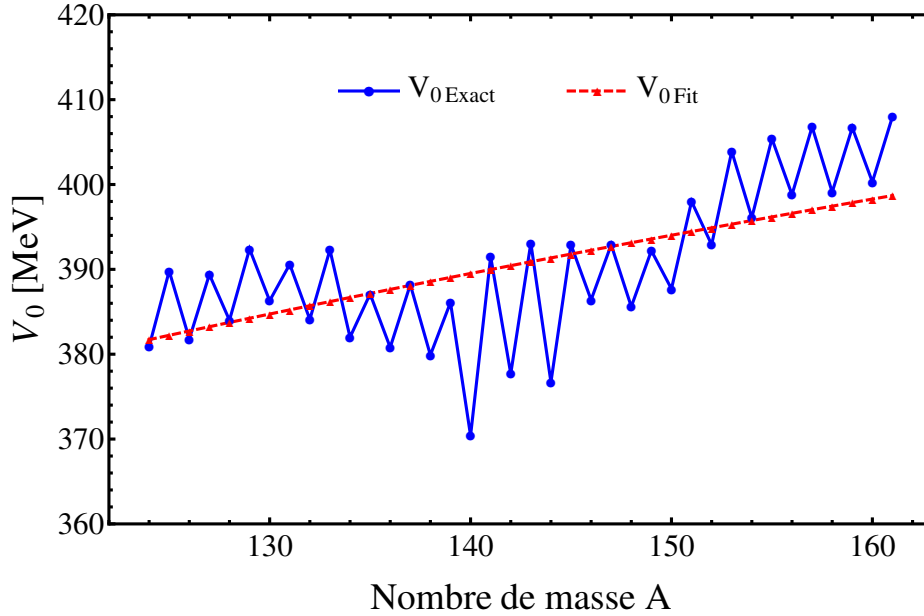


FIGURE 4.1 Les forces d'appariement exacte ( $V_{0_{exact}}$ ) et ajustée ( $V_{0_{fit}}$ ).

Afin de vérifier la validité de l'équation (4.1), nous l'avons utilisée pour générer la force d'appariement  $V_0^{n,p}$  que nous avons incluse dans le code HFBTHO (v2.00d) afin de calculer les propriétés de l'état fondamental des isotopes pairs et impairs de Néodyme  $^{124-161}\text{Nd}$ . En outre, les mêmes calculs ont été effectués pour les isotopes de Samarium,  $^{128-165}\text{Sm}$ , et de Cérium,  $^{119-157}\text{Ce}$ . Les résultats obtenus sont présentés dans la section suivante.

### 4.3 Résultats et discussion

Dans cette section, nous présentons les résultats numériques de ce travail, en particulier pour l'énergie de liaison, les énergies de séparation de deux neutrons, les rayons de charge et de neutrons et la déformation quadrupolaire pour les isotopes  $^{124-161}\text{Nd}$ ,  $^{128-165}\text{Sm}$  et  $^{119-157}\text{Ce}$ . Dans tous nos calculs, nous avons utilisé la force de Skyrme SLy5 et l'équation (4.1) pour la force d'appariement.

### 4.3.1 Énergie de liaison

La figure 4.2 montre l'énergie de liaison par nucléon ( $BE/A$ ) calculée pour les isotopes de Nd en utilisant la force d'appariement générée par l'équation (4.1) ainsi que par des calculs directs utilisant la force d'appariement prédéfinie dans le code HFBTHO (v2.00d). A titre de comparaison, nous présentons aussi sur la figure 4.2 les énergies de liaison expérimentales par nucléon [92], les résultats des calculs HFB basés sur la force de Gogny D1S [93] et les résultats obtenus dans la référence [94] dans laquelle les auteurs ont utilisé l'ancienne version du code HFBTHO (v1.66p) [95] pour reproduire les propriétés de l'état fondamental des isotopes pairs-pairs  $^{142-164}\text{Nd}$ . Les valeurs numériques des énergies de liaison par nucléon sont présentées dans le tableau 4.3.

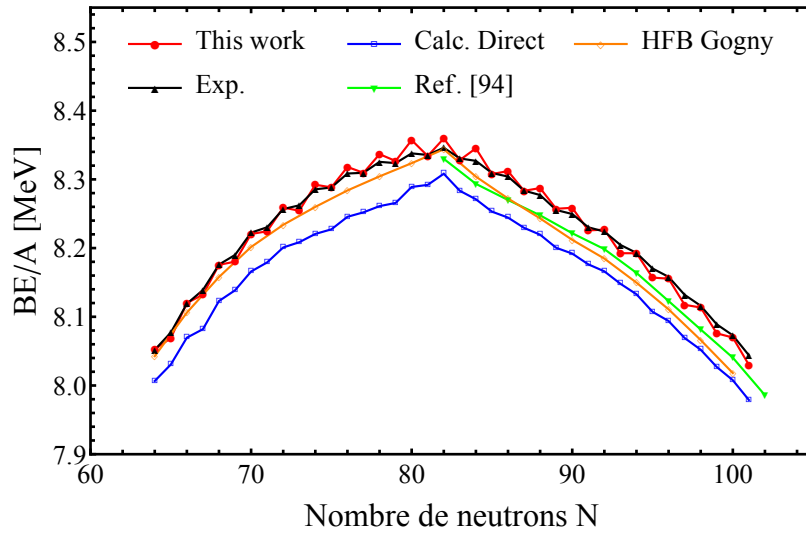


FIGURE 4.2 Energies de liaison par nucléon pour les isotopes pairs et impairs de Nd.

A partir de la figure 4.2, on note que le maximum dans les énergies de liaison par nucléon est observé au nombre magique de neutrons  $N = 82$  dans les données expérimentales ainsi que dans les résultats théoriques. Il convient également de noter que l'utilisation de l'équation (4.1) donne des résultats améliorés de l'énergie de liaison, en comparaison avec les résultats obtenus directement sans modifier  $V_0$ .

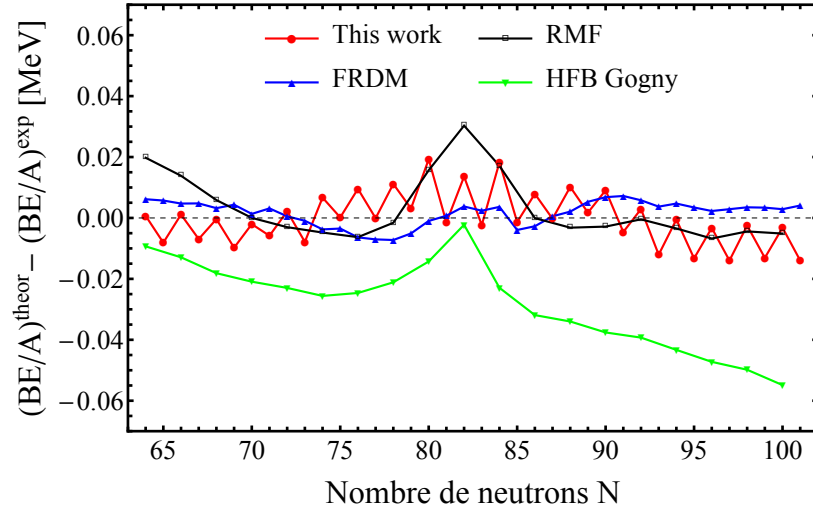
Les différences entre les  $BE/A$  expérimentales et les résultats calculés obtenus dans ce travail, en utilisant Eq. (4.1), sont montrées en fonction du nombre de neutrons  $N$  dans la figure 4.3. Les calculs HFB basés sur la force de Gogny D1S [93] ainsi que les prédictions des modèles FRDM [96] et RMF(NL3) [97] sont incluses à des fins de comparaison.

Comme on peut le voir sur la figure 4.3, les énergies de liaison par nucléon calculées pour les isotopes de Nd sont en bon accord avec les données expérimentales. L'erreur maximale

TABLE 4.3 Energies de liaison par nucléon des isotopes pairs et impairs de *Nd*.

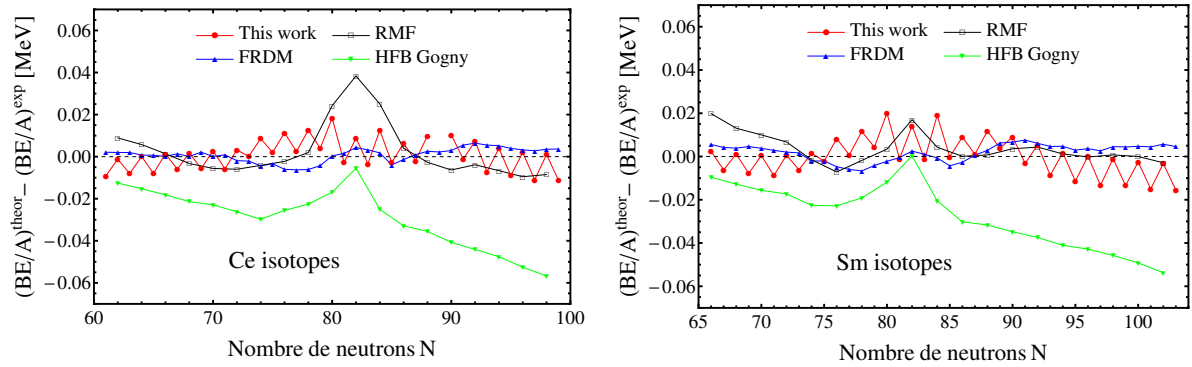
Nombre de Neutrons	This work	Calc Direct	HFB Gogny	Exp	Ref [94]
64	8.0527	8.0066	8.0427	8.0520	-----
65	8.0689	8.0305	-----	8.0770	-----
66	8.1201	8.0696	8.1061	8.1190	-----
67	8.1321	8.0820	-----	8.1390	-----
68	8.1756	8.1230	8.1579	8.1760	-----
69	8.1802	8.1385	-----	8.1900	-----
70	8.2205	8.1659	8.2016	8.2225	-----
71	8.2245	8.1792	-----	8.2303	-----
72	8.2590	8.2009	8.2338	8.2568	-----
73	8.2543	8.2085	-----	8.2622	-----
74	8.2922	8.2206	8.2599	8.2855	-----
75	8.2883	8.2273	-----	8.2881	-----
76	8.3181	8.2455	8.2839	8.3085	-----
77	8.3095	8.2520	-----	8.3096	-----
78	8.3367	8.2611	8.3044	8.3255	-----
79	8.3268	8.2657	-----	8.3236	-----
80	8.3571	8.2890	8.3236	8.3378	-----
81	8.3340	8.2920	-----	8.3355	-----
82	8.3596	8.3082	8.3438	8.3460	8.3299
83	8.3281	8.2834	-----	8.3305	-----
84	8.3452	8.2710	8.3040	8.3269	8.2935
85	8.3078	8.2530	-----	8.3092	-----
86	8.3120	8.2444	8.2722	8.3041	8.2700
87	8.2833	8.2294	-----	8.2836	-----
88	8.2874	8.2195	8.2432	8.2772	8.2477
89	8.2572	8.2004	-----	8.2554	-----
90	8.2587	8.1920	8.2120	8.2496	8.2216
91	8.2257	8.1763	-----	8.2303	-----
92	8.2269	8.1661	8.1847	8.2240	8.1985
93	8.1925	8.1481	-----	8.2046	-----
94	8.1925	8.1328	8.1497	8.1930	8.1639
95	8.1570	8.1072	-----	8.1703	-----
96	8.1555	8.0938	8.1109	8.1581	8.1229
97	8.1174	8.0691	-----	8.1320	-----
98	8.1135	8.0521	8.0662	8.1160	8.0815
99	8.0759	8.0269	-----	8.0890	-----
100	8.0698	8.0077	8.0181	8.0730	8.0405
101	8.0300	7.9789	-----	8.0440	-----

est d'environ 0.019 *MeV* par particule, ce qui correspond approximativement à 2.697 *MeV* pour l'énergie de liaison totale.



**FIGURE 4.3** Les différences entre les résultats calculés pour les énergies de liaison par nucléon et les données expérimentales [92].

Afin de s'assurer de la validité de l'équation (4.1), nous l'avons utilisée pour générer la force d'appariement des neutrons et des protons pour calculer les propriétés de l'état fondamental des deux chaînes isotopiques  $^{119-157}\text{Ce}$  et  $^{128-165}\text{Sm}$  qui se trouvent à proximité de  $Nd$ . Les différences entre nos résultats, calculés des énergies de liaison par nucléon dans la théorie HFB, et les valeurs expérimentales sont présentées sur la figure 4.4. Les résultats des calculs HFB basés sur la force de Gogny DLS [93] ainsi que les prédictions des modèles FRDM [96] et RMF [97] sont présentés aussi à titre de comparaison.



**FIGURE 4.4** Les différences entre les résultats calculés pour les énergies de liaison par nucléon et les données expérimentales [92] pour les isotopes de *Ce* (à gauche) et de *Sm* (à droite).

D'après la figure 4.4, les  $BE/A$  calculées pour les isotopes de *Ce* et de *Sm* dans la théorie HFB avec la force de Skyrme SLy5 sont en bon accord avec les données expérimentales en comparaison avec les prédictions des autres modèles théoriques.

Les erreurs maximales par particule sont approximativement de  $0.018 \text{ MeV}$  et  $0.020 \text{ MeV}$  pour les isotopes de *Ce* et *Sm*, respectivement.

Comme une vérification supplémentaire de la validité de l'équation (4.1), nous l'avons utilisée pour générer la force d'appariement pour le nombre de masse  $A = 140$  afin de calculer l'énergie de liaison totale pour les isobares pairs et impairs de  $^{140}\text{Nd}$ , à partir de  $^{140}_{53}\text{I}_{91}$  jusqu'à  $^{140}_{69}\text{Tm}_{75}$ . Les énergies de liaison totale calculées ainsi que les données expérimentales [92] pour cette série d'isobares sont dressées dans le tableau 4.4 et présentées sur la figure 4.5 en fonction du nombre de protons  $Z$ . Les calculs directs ainsi que les calculs HFB basés sur la force de Gogny D1S [93] et les prédictions des théories RMF [97] et FRDM [96] sont présentés à titre de comparaison.

TABLE 4.4 Les énergies de liaison totale des isobares de  $\text{Nd}^{140}$  (en MeV)

Nombre de protons	This work	FRDM	RMF	Exp	Calc Direct	Gogny
53	1165.7123	1166.1800	-----	1166.1120	1159.1188	-----
54	1178.4479	1177.0800	1177.2100	1176.8947	1169.4051	1170.1020
55	1181.4608	1182.5700	-----	1182.5107	1176.0389	-----
56	1191.3726	1190.3800	1190.2600	1190.2248	1182.9421	1184.8240
57	1191.0760	1192.4600	-----	1192.5259	1184.9573	-----
58	1198.2403	1197.1300	1197.9000	1197.3253	1189.2716	1192.5870
59	1195.4836	1196.3600	-----	1196.8616	1189.2307	-----
60	1201.7106	1199.1600	1201.5400	1199.0768	1191.0291	1195.7740
61	1194.6732	1196.3000	-----	1195.9625	1188.3337	-----
62	1197.7767	1196.0900	1198.1800	1195.7296	1190.2221	1195.7660
63	1187.0572	1188.1800	-----	1188.6005	1181.6986	-----
64	1186.9504	1183.5400	1184.6200	1183.9594	1176.8896	1182.6410
65	1173.3021	1173.4700	-----	1173.7858	1166.5271	-----
66	1169.4458	1166.6700	1167.9700	1167.2050	1159.2488	1165.6150
67	1154.2595	1154.1000	-----	1154.4624	1147.6305	-----
68	1146.9662	1146.0000	1147.0100	1145.6640	1136.5950	1143.8530
69	1128.6010	1131.9000	-----	1130.4000	1122.4856	-----

A partir de la figure 4.5, nous remarquons que nos résultats, calculés pour les énergies de liaison totale des isobares du  $^{140}\text{Nd}$ , sont en bon accord avec ceux des données expérimentales et des modèles FRDM et RMF(NL3). L'utilisation de l'équation (4.1) a amélioré les résultats des énergies de liaison totales par rapport à ceux des calculs directs. L'erreur absolue moyenne entre les données expérimentales et les résultats de ce travail est de 1.436 MeV, alors que c'est 0.347 MeV, 1.076 MeV, 3.123 et 7.392 MeV dans FRDM [96], RMF(NL3) [97], calculs HFB basés sur la force de Gogny D1S [93] et les calculs directs, respectivement.

### 4.3.2 Énergie de séparation des neutrons

Les énergies de séparation d'un neutron et de deux neutrons sont des quantités importantes pour montrer la structure nucléaire en couches. Dans le présent travail, nous avons calculé les



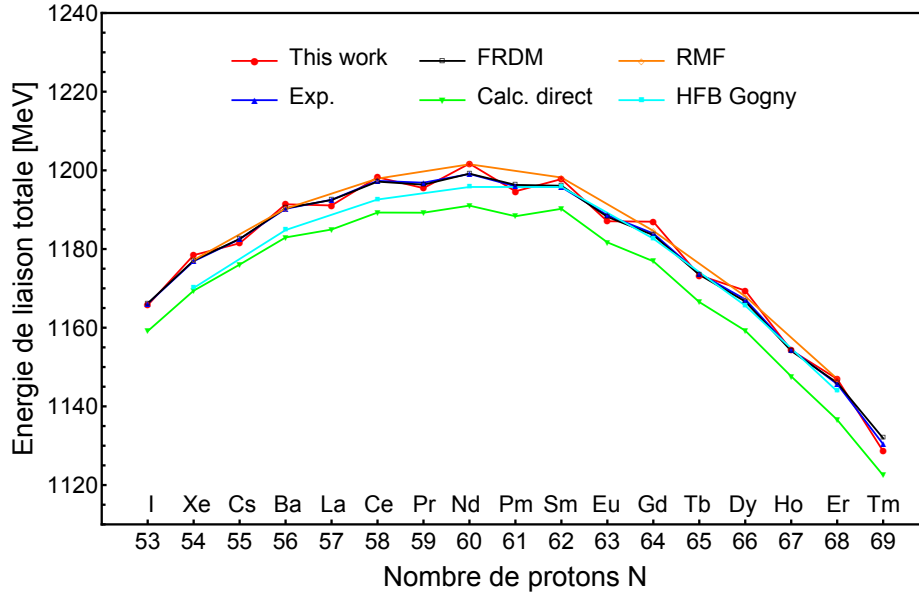


FIGURE 4.5 Les énergies de liaison totale des isobares de Nd<sup>140</sup>

énergies de séparation de deux neutrons ( $S_{2n}$ ) pour les isotopes de *Nd*, *Ce* et *Sm* en utilisant la paramétrisation SLy5 et la force d'appariement  $V_0^{n,p}$  générée par l'équation (4.1).

L'énergie de séparation de deux neutrons est définie comme :

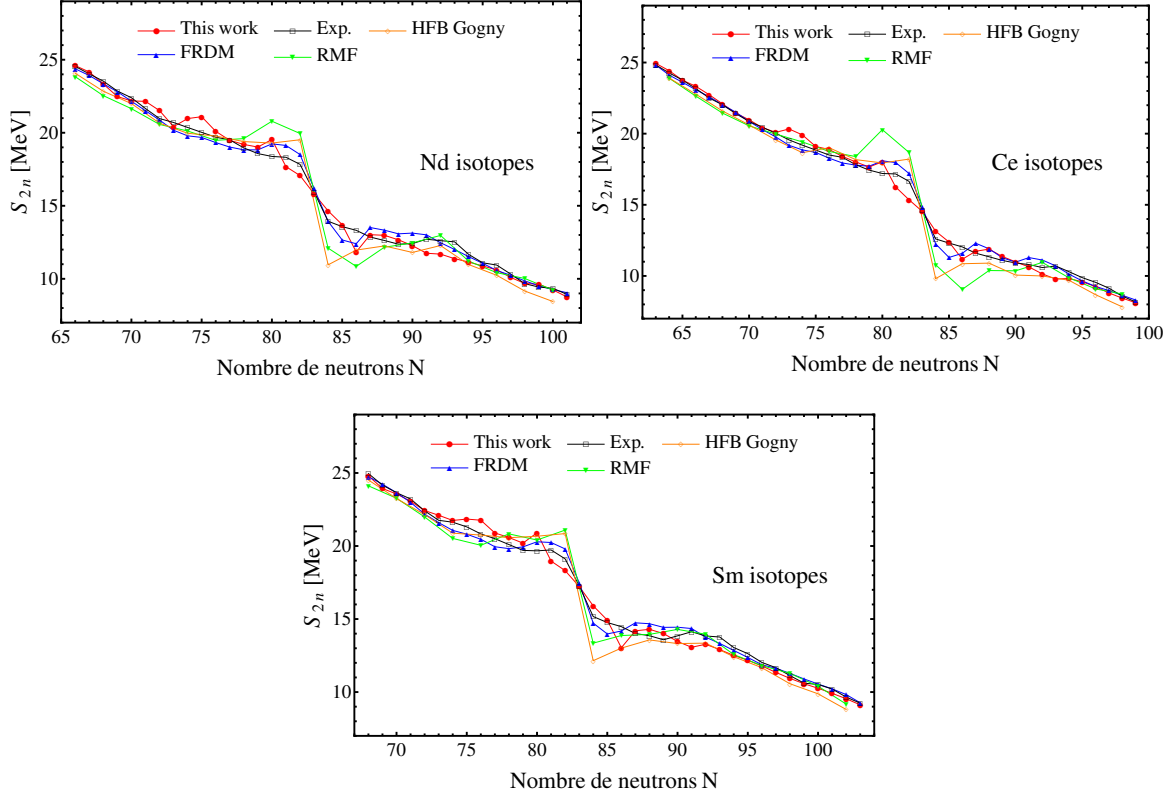
$$S_{2n}(Z, N) = BE(Z, N) - BE(Z, N - 2) \quad (4.2)$$

A noter que lorsqu'on utilise cette équation, toutes les énergies de liaison doivent être impliquées avec un signe positif.

Les énergies de séparation de deux neutrons,  $S_{2n}$ , calculées pour les isotopes de *Nd*, *Ce* et *Sm* ainsi que les données expérimentales [92], les prédictions des modèles RMF(NL3) [97] et FRDM [96] et les calculs HFB basés sur la force de Gogny D1S [93] sont présentés sur la figure 4.6.

Comme on peut la voir sur la figure 4.6, une forte diminution de  $S_{2n}$  au niveau du nombre magique de neutrons  $N = 82$  correspond à la couche fermée. De plus, les énergies de séparation à deux neutrons calculées pour les noyaux *Nd*, *Ce* et *Sm* dans la méthode HFB avec la force de Skyrme SLy5 ainsi que les prédictions de la théorie RMF(NL3) et du modèle FRDM sont en bon accord avec les données expérimentales.

Les erreurs maximales approximatives de  $S_{2n}$  entre les résultats calculés dans la présente étude et les données expérimentales pour les trois noyaux *Nd*, *Ce* et *Sm* sont énumérées dans le tableau 4.5. Les erreurs des modèles FRDM et RMF ainsi que celles des calculs HFB, basés sur la force de Gogny D1S [93], sont également répertoriés à titre de comparaison.



**FIGURE 4.6** Comparaison des énergies de séparation de deux neutrons  $S_{2n}$  calculées avec les données expérimentales [92], les résultats de RMF [97], FRDM [96] et HFB basés sur la force de Gogny D1S [93] sont aussi présentés.

**TABLE 4.5** L'erreur maximale  $(S_{2n})_{theor} - (S_{2n})_{exp}$  (en MeV).

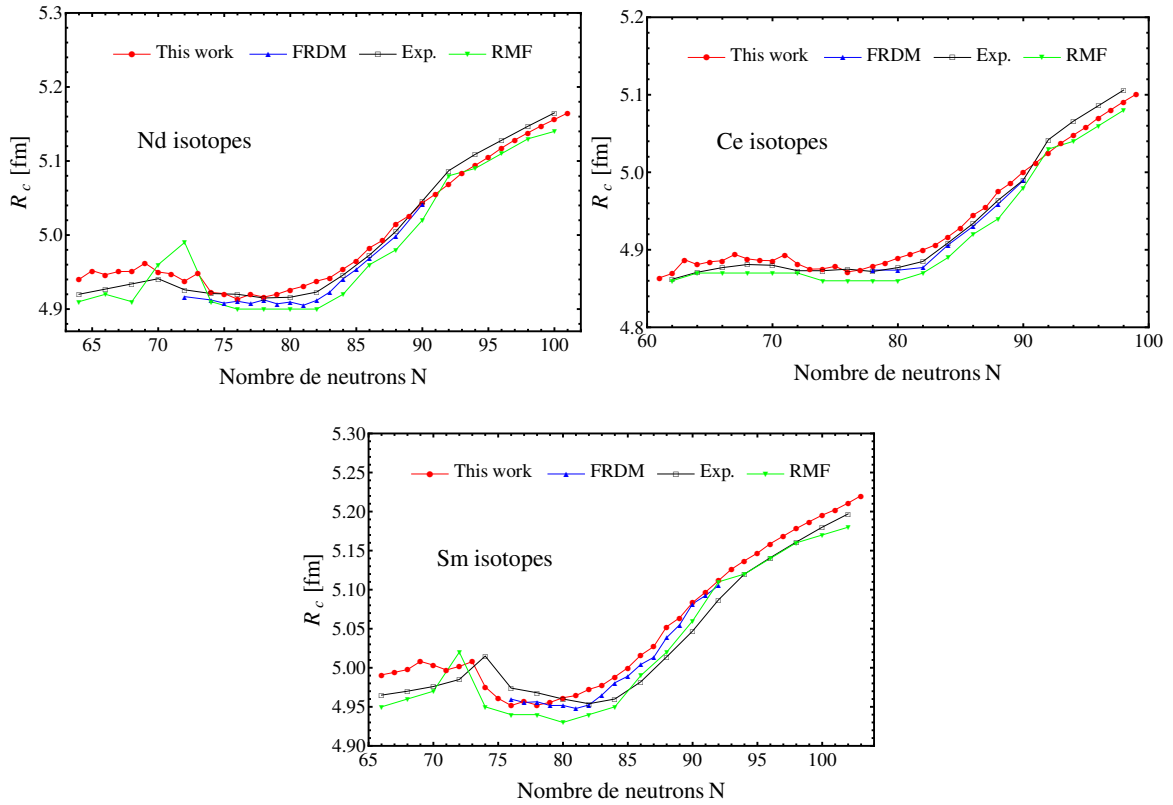
Noyau	Ce travail	RMF	FRDM	HFB <sub>Gogny</sub>
Nd	1.4782	2.4705	0.9205	2.98460
Ce	1.29951	3.07735	1.01289	2.78419
Sm	1.44676	1.96853	0.84682	3.02534

### 4.3.3 Rayons de neutrons, de protons et de charges

Le rayon quadratique moyen de charge (rms),  $R_c$ , est liée au rayon du proton,  $R_p$ , par

$$R_c^2 = R_p^2 + 0.64 \text{ (fm)} \quad (4.3)$$

où le facteur 0.64 dans l'équation (4.3) tient compte des effets de taille finie du proton. Dans la figure 4.7, les rayons de charge quadratique prédits par nos calculs HFB sont comparés avec les données expérimentales disponibles [98], les prédictions de la théorie RMF [97] et les calculs HFB basés sur la force de Gogny D1S [93]. Les valeurs numériques des rayons de charge sont présentées dans les tableaux 4.6, 4.7, et 4.8.



**FIGURE 4.7** Les rayons de charge obtenus par nos calculs HFB comparés aux données expérimentales disponibles [98], les prédictions de la théorie RMF [97] et les calculs HFB basés sur la force de Gogny D1S [93].

Un bon accord entre la théorie et l'expérience peut être clairement vu dans la figure 4.7. On voit aussi que les rayons de charge diminuent légèrement en passant des isotopes plus légers aux plus lourds jusqu'au nombre magique. Par conséquent, les isotopes les plus légers ont des rayons de charge plus importants que l'isotope le plus lourd à couche de neutrons fermée ( $N = 82$ ). Les rayons de charge, des isotopes les plus lourds que le noyau magique, augmentent quand le nombre de neutrons augmente.

Afin de mieux comprendre l'évolution de la structure des isotopes de *Nd* avec l'augmentation du nombre de neutrons, les différences entre les carrés des rayons de charge de l'état fondamental des isotopes de *Nd* et celui du noyau de référence (Le nombre magique de neutrons  $N = 82$ ) ont été calculées. Les mêmes calculs ont été effectués pour les isotopes  $^{128-165}\text{Sm}$  et  $^{119-157}\text{Ce}$ . Nos résultats obtenus ainsi que les données expérimentales disponibles [98] de  $\langle r_N^2 \rangle - \langle r_{N=82}^2 \rangle$  sont montrées sur la figure 4.8. Les prédictions de la théorie RMF [97] et les calculs HFB basés sur la force de Gogny D1S [93], sont présentés à titre de comparaison.

TABLE 4.6 Les rayons de charge des isotopes de Nd (en fm)

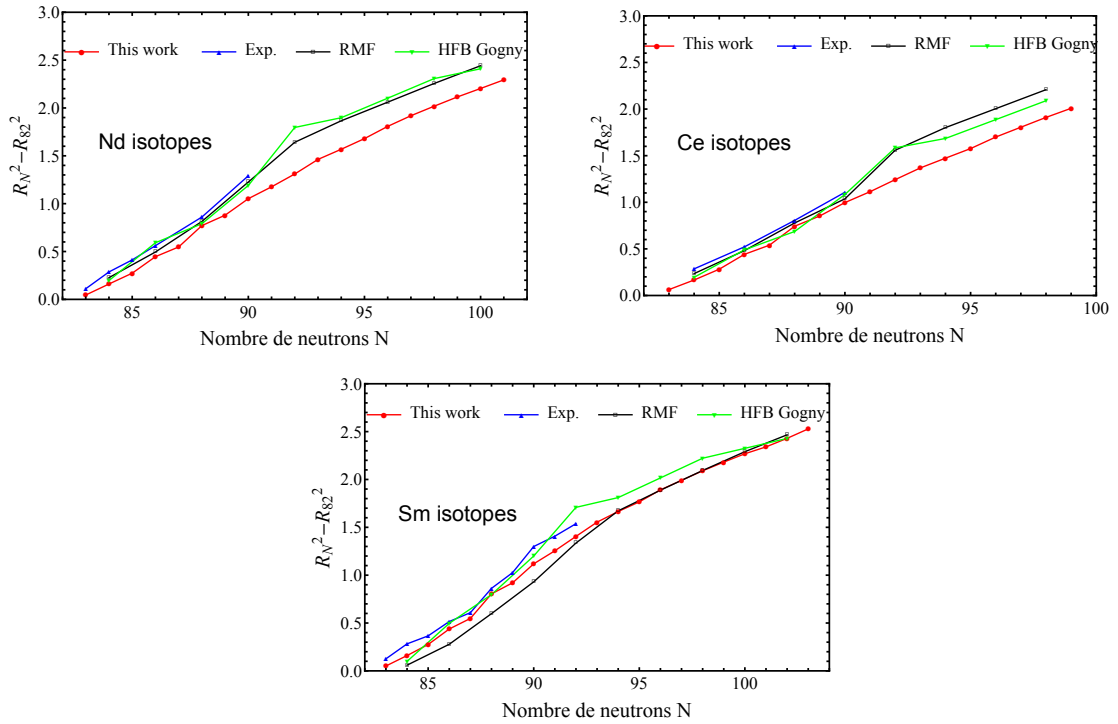
N	This work	RMF	Exp	Gogny	N	This work	RMF	Exp	Gogny
64	4.940	4.920	----	4.910	83	4.942	----	4.923	----
65	4.952	----	----	----	84	4.954	4.946	4.941	4.920
66	4.946	4.927	----	4.920	85	4.965	----	4.954	----
67	4.951	----	----	----	86	4.983	4.973	4.969	4.960
68	4.951	4.934	----	4.910	87	4.993	----	----	----
69	4.962	----	----	----	88	5.015	5.005	4.999	4.980
70	4.950	4.941	----	4.960	89	5.026	----	----	----
71	4.948	----	----	----	90	5.043	5.046	5.042	5.020
72	4.938	4.926	4.917	4.990	91	5.055	----	----	----
73	4.948	----	----	----	92	5.069	5.087	----	5.080
74	4.923	4.921	4.912	4.910	93	5.084	----	----	----
75	4.921	----	4.908	----	94	5.094	5.109	----	5.090
76	4.913	4.920	4.911	4.900	95	5.105	----	----	----
77	4.920	----	4.908	----	96	5.118	5.128	----	5.110
78	4.916	4.915	4.912	4.900	97	5.128	----	----	----
79	4.920	----	4.907	----	98	5.138	5.147	----	5.130
80	4.926	4.916	4.910	4.900	99	5.148	----	----	----
81	4.931	----	4.905	----	100	5.156	5.165	----	5.140
82	4.938	4.923	4.912	4.900	101	5.165	----	----	----

TABLE 4.7 Les rayons de charge des isotopes de Ce (en fm)

N	This work	RMF	Exp	Gogny	N	This work	RMF	Exp	Gogny
61	4,864	----	----	----	80	4,889	4,877	4,874	4,860
62	4,869	4,862	----	4,860	81	4,894	----	----	----
63	4,887	----	----	----	82	4,900	4,885	4,877	4,870
64	4,881	4,871	----	4,870	83	4,906	----	----	----
65	4,885	----	----	----	84	4,917	4,909	4,906	4,890
66	4,886	4,877	----	4,870	85	4,929	----	----	----
67	4,894	----	----	----	86	4,945	4,934	4,930	4,920
68	4,888	4,881	----	4,870	87	4,955	----	----	----
69	4,886	----	----	----	88	4,975	4,964	4,959	4,940
70	4,886	4,880	----	4,870	89	4,986	----	----	----
71	4,894	----	----	----	90	5,001	4,990	4,989	4,980
72	4,882	4,873	----	4,870	91	5,012	----	----	----
73	4,875	----	----	----	92	5,025	5,042	----	5,030
74	4,875	4,873	----	4,860	93	5,038	----	----	----
75	4,879	----	----	----	94	5,048	5,066	----	5,040
76	4,871	4,875	----	4,860	95	5,058	----	----	----
77	4,874	----	----	----	96	5,070	5,086	----	5,060
78	4,879	4,872	4,8739	4,860	97	5,081	----	----	----
79	4,883	----	----	----	98	5,091	5,106	----	5,080

TABLE 4.8 Les rayons de charge des isotopes de Sm (en fm)

N	This work	RMF	Exp	Gogny	N	This work	RMF	Exp	Gogny
66	4.991	4.965	----	4.950	85	5.000	----	4.989	----
67	4.994	----	----	----	86	5.016	4.982	5.004	4.990
68	4.998	4.970	----	4.960	87	5.027	----	5.013	----
69	5.008	----	----	----	88	5.053	5.014	5.039	5.020
70	5.003	4.976	----	4.970	89	5.064	----	5.055	----
71	4.997	----	----	----	90	5.084	5.047	5.082	5.060
72	5.002	4.985	----	5.020	91	5.097	----	5.093	----
73	5.008	----	----	----	92	5.112	5.087	5.105	5.110
74	4.975	5.015	----	4.950	93	5.126	----	----	----
75	4.961	----	----	----	94	5.137	5.120	----	5.120
76	4.952	4.974	4.960	4.940	95	5.147	----	----	----
77	4.957	----	4.956	----	96	5.159	5.141	----	5.140
78	4.952	4.968	4.957	4.940	97	5.169	----	----	----
79	4.956	----	4.952	----	98	5.178	5.161	----	5.160
80	4.962	4.960	4.952	4.930	99	5.187	----	----	----
81	4.964	----	4.948	----	100	5.195	5.180	----	5.170
82	4.972	4.954	4.952	4.940	101	5.202	----	----	----
83	4.977	----	4.965	----	102	5.211	5.197	----	5.180
84	4.988	4.960	4.981	4.950	103	5.220	----	----	----

FIGURE 4.8 Les différences entre les carrés des rayons de charge de l'état fondamental :  $\langle r_N^2 \rangle - \langle r_{N=82}^2 \rangle$  en fonction du nombre de neutrons.

A partir de la figure 4.8, on voit un bon accord entre les résultats calculés de  $\langle r_N^2 \rangle - \langle r_{N=82}^2 \rangle$ , les prédictions de RMF [97], les calculs HFB basés sur la force de Gogny D1S [93] et les données expérimentales disponibles [98].

La figure 4.9 montre les rayons de neutrons et de protons des isotopes de *Nd*, *Ce* et *Sm* obtenus dans nos calculs. Les prédictions de la théorie de RMF et les calculs de HFB basés sur la force de Gogny DIS [93] sont également donnés à titre de comparaison. Nous avons tracé les rayons de neutrons et de protons ( $R_n$  et  $R_p$ ) ensemble afin de voir la différence entre eux. Les valeurs numériques des rayons de neutrons et de protons des isotopes de *Nd*, *Ce* et *Sm* sont dressées dans les tableaux 4.9, 4.10 et 4.11, respectivement.

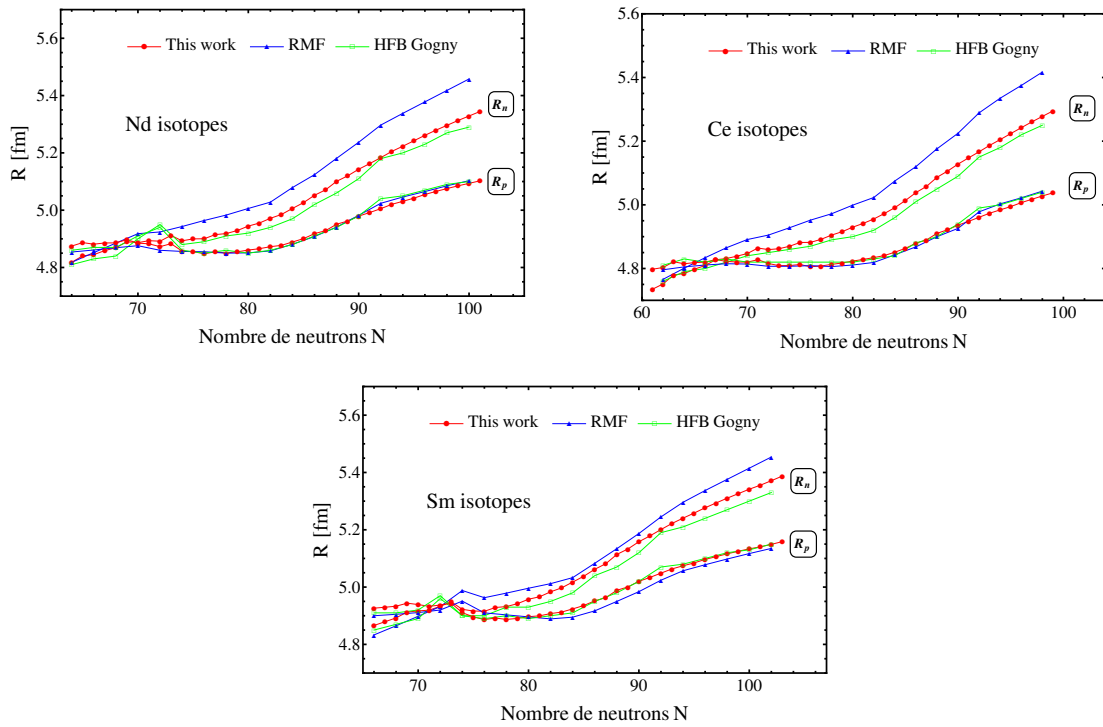


FIGURE 4.9 Les rayons de neutrons et de protons des isotopes de *Nd*, *Ce* et *Sm*.

Au voisinage de la ligne de stabilité  $\beta$  ( $N \approx Z$ ), les rayons de neutrons et de protons sont presque les mêmes. Mais à mesure que le nombre de neutrons augmente, la différence entre le rayon des neutrons et celui des protons commence à augmenter en faveur du développement d'une peau de neutrons.

Cette différence atteint 0.242 fm pour  $^{161}\text{Nd}$ , 0.257 fm pour  $^{157}\text{Ce}$  et 0.228 fm pour  $^{165}\text{Sm}$ , ce qui peut être considéré comme une indication d'un éventuel halo neutronique dans les isotopes de *Nd*, *Ce* et *Sm*.

TABLE 4.9 Les rayons de neutrons et de protons des isotopes de Nd (en fm)

Nombre de Neutrons	Rn			Rp		
	This work	RMF	HFB Gogny	This work	RMF	HFB Gogny
64	4,818	4,818	4,810	4,875	4,854	4,860
65	4,841	----	----	4,887	----	----
66	4,845	4,852	4,830	4,881	4,861	4,870
67	4,859	----	----	4,886	----	----
68	4,869	4,885	4,840	4,886	4,869	4,870
69	4,890	----	----	4,897	----	----
70	4,887	4,918	4,900	4,885	4,876	4,910
71	4,894	----	----	4,883	----	----
72	4,892	4,924	4,950	4,873	4,860	4,940
73	4,912	----	----	4,883	----	----
74	4,893	4,943	4,880	4,857	4,856	4,860
75	4,900	----	----	4,855	----	----
76	4,900	4,964	4,890	4,848	4,855	4,850
77	4,915	----	----	4,854	----	----
78	4,918	4,983	4,910	4,851	4,850	4,860
79	4,929	----	----	4,855	----	----
80	4,944	5,006	4,920	4,861	4,851	4,850
81	4,955	----	----	4,866	----	----
82	4,972	5,028	4,940	4,873	4,858	4,860
83	4,985	----	----	4,877	----	----
84	5,006	5,079	4,970	4,889	4,881	4,880
85	5,026	----	----	4,901	----	----
86	5,052	5,124	5,020	4,918	4,908	4,910
87	5,071	----	----	4,928	----	----
88	5,101	5,181	5,060	4,951	4,941	4,940
89	5,120	----	----	4,962	----	----
90	5,143	5,237	5,110	4,979	4,982	4,980
91	5,162	----	----	4,992	----	----
92	5,183	5,297	5,180	5,005	5,024	5,040
93	5,205	----	----	5,020	----	----
94	5,223	5,338	5,200	5,031	5,046	5,050
95	5,242	----	----	5,042	----	----
96	5,261	5,378	5,230	5,055	5,065	5,070
97	5,279	----	----	5,065	----	----
98	5,296	5,418	5,270	5,075	5,085	5,090
99	5,313	----	----	5,085	----	----
100	5,329	5,458	5,290	5,094	5,103	5,100
101	5,345	----	----	5,102	----	----

TABLE 4.10 Les rayons de neutrons et de protons des isotopes de Ce (en fm)

Nombre de Neutrons	Rn			Rp		
	This work	RMF	HFB Gogny	This work	RMF	HFB Gogny
61	4.735	----	----	4.798	----	----
62	4.751	4.766	4.760	4.803	4.796	4.810
63	4.780	----	----	4.821	----	----
64	4.784	4.801	4.790	4.815	4.805	4.830
65	4.798	----	----	4.819	----	----
66	4.810	4.834	4.800	4.820	4.811	4.820
67	4.827	----	----	4.828	----	----
68	4.831	4.865	4.820	4.822	4.815	4.830
69	4.839	----	----	4.820	----	----
70	4.847	4.891	4.840	4.820	4.814	4.820
71	4.864	----	----	4.828	----	----
72	4.859	4.905	4.850	4.816	4.807	4.820
73	4.862	----	----	4.809	----	----
74	4.870	4.928	4.860	4.809	4.807	4.820
75	4.882	----	----	4.813	----	----
76	4.882	4.952	4.870	4.805	4.809	4.820
77	4.892	----	----	4.808	----	----
78	4.905	4.972	4.890	4.813	4.806	4.820
79	4.916	----	----	4.817	----	----
80	4.930	4.999	4.900	4.823	4.811	4.820
81	4.942	----	----	4.829	----	----
82	4.956	5.023	4.920	4.834	4.819	4.830
83	4.973	----	----	4.841	----	----
84	4.991	5.075	4.960	4.851	4.843	4.840
85	5.014	----	----	4.863	----	----
86	5.038	5.120	5.010	4.880	4.868	4.880
87	5.058	----	----	4.890	----	----
88	5.086	5.176	5.050	4.910	4.900	4.900
89	5.106	----	----	4.922	----	----
90	5.128	5.225	5.090	4.936	4.926	4.940
91	5.148	----	----	4.948	----	----
92	5.167	5.289	5.150	4.961	4.978	4.990
93	5.187	----	----	4.974	----	----
94	5.205	5.335	5.180	4.984	5.003	5.000
95	5.224	----	----	4.995	----	----
96	5.242	5.375	5.220	5.007	5.022	5.020
97	5.261	----	----	5.017	----	----
98	5.278	5.417	5.250	5.028	5.043	5.040
99	5.295	----	----	5.038	----	----

#### 4.3.4 Déformation quadrupolaire

Les déformations des noyaux jouent un rôle crucial dans la détermination de leurs propriétés telles que le moment quadrupolaire, les tailles nucléaires et les déplacements isotopiques.

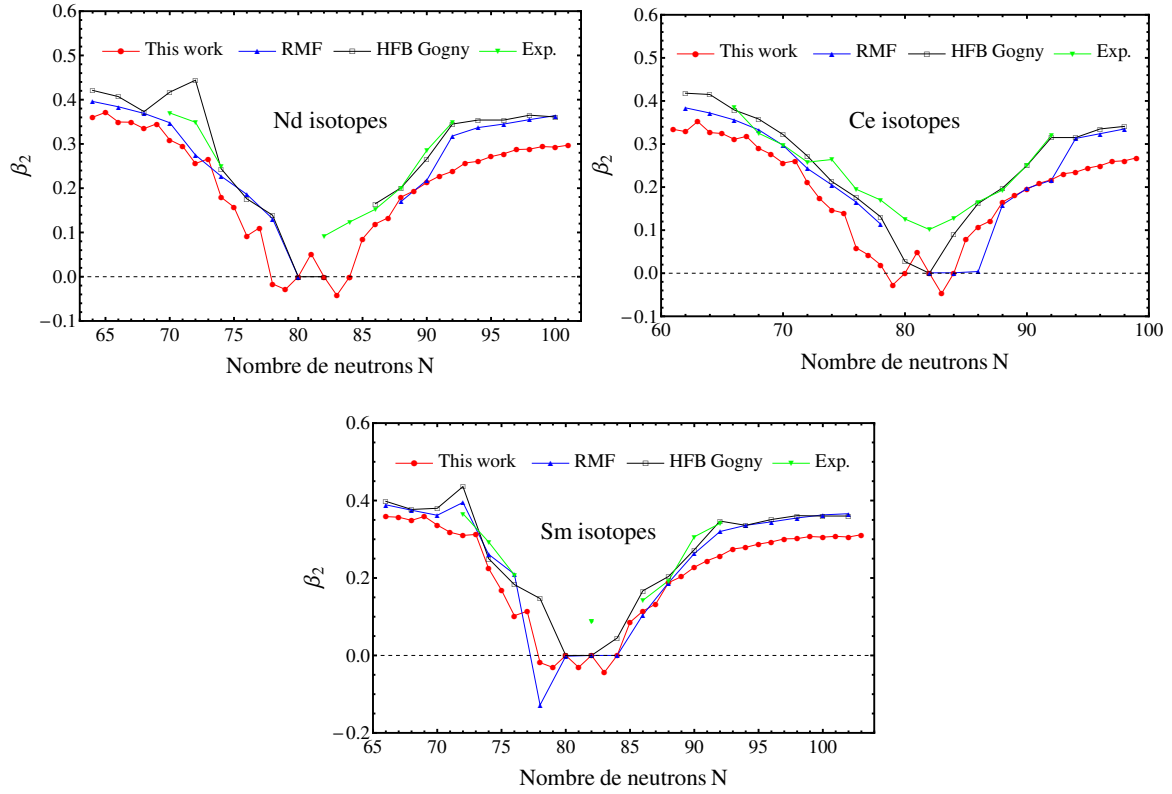


TABLE 4.11 Les rayons de neutrons et de protons des isotopes de Sm (en fm)

Nombre de Neutrons	Rn			Rp		
	This work	RMF	HFB Gogny	This work	RMF	HFB Gogny
66	4.866	4.833	4.850	4.926	4.900	4.910
67	4.879	----	----	4.930	----	----
68	4.892	4.865	4.870	4.933	4.905	4.910
69	4.913	----	----	4.944	----	----
70	4.917	4.898	4.890	4.939	4.911	4.920
71	4.919	----	----	4.933	----	----
72	4.933	4.932	4.960	4.937	4.920	4.970
73	4.949	----	----	4.944	----	----
74	4.922	4.988	4.900	4.911	4.951	4.900
75	4.917	----	----	4.896	----	----
76	4.916	4.963	4.900	4.887	4.910	4.890
77	4.929	----	----	4.892	----	----
78	4.932	4.979	4.930	4.887	4.903	4.900
79	4.942	----	----	4.891	----	----
80	4.958	4.996	4.930	4.897	4.896	4.890
81	4.966	----	----	4.900	----	----
82	4.983	5.012	4.950	4.908	4.889	4.900
83	4.997	----	----	4.913	----	----
84	5.017	5.033	4.980	4.924	4.895	4.910
85	5.038	----	----	4.936	----	----
86	5.062	5.083	5.040	4.952	4.917	4.950
87	5.082	----	----	4.963	----	----
88	5.114	5.134	5.070	4.989	4.950	4.980
89	5.133	----	----	5.000	----	----
90	5.158	5.187	5.120	5.020	4.984	5.020
91	5.179	----	----	5.034	----	----
92	5.201	5.245	5.190	5.049	5.024	5.070
93	5.222	----	----	5.063	----	----
94	5.241	5.296	5.210	5.074	5.057	5.080
95	5.258	----	----	5.084	----	----
96	5.277	5.337	5.240	5.097	5.078	5.100
97	5.294	----	----	5.106	----	----
98	5.310	5.376	5.270	5.116	5.098	5.120
99	5.326	----	----	5.125	----	----
100	5.342	5.415	5.300	5.133	5.117	5.130
101	5.356	----	----	5.140	----	----
102	5.371	5.454	5.330	5.149	5.135	5.150
103	5.388	----	----	5.159	----	----

Dans cette partie, nous comparons les paramètres de déformation quadrupolaire,  $\beta_2$ , obtenus par nos calculs avec les données expérimentales disponibles [99]. Les valeurs de  $\beta_2$  des trois chaînes isotopiques considérées dans ce travail sont incluses dans les tableaux 4.12 et 4.13 et

sont présentées dans la figure 4.10. Les résultats de la théorie RMF [100] et des calculs HFB, basés sur la force de Gogny D1S [93], sont également présentés à titre de comparaison.



**FIGURE 4.10** Les déformations quadrupolaires  $\beta_2$  des isotopes de Nd, Ce et Sm.

Comme on peut le voir sur la figure 4.10, l'accord entre les différents calculs théoriques et les données expérimentales est assez bon en général. Les valeurs de  $\beta_2$  montrent un minimum au nombre magique de neutrons  $N = 82$  comme prévu, car presque tous les noyaux avec  $N = 82$  sont sphériques. Une autre caractéristique bien connue vue sur la figure 4.10 est que les noyaux pairs-impairs ont tendance à se déformer bien que leurs voisins pairs-pairs soient sphériques. Les valeurs de  $\beta_2$  obtenues dans ce travail ainsi que celles de la théorie RMF [100], les calculs HFB basés sur la force de Gogny D1S [93] et les données expérimentales disponibles [99] manifestent un changement intéressant de forme des noyaux en dessous et au-dessus du nombre magique de neutrons  $N = 82$ . Pour les isotopes ayant un nombre de neutron inférieur à  $N = 82$ , les trois chaînes isotopiques montrent une transition de la forme allongée (ou prolate) à la forme sphérique, et pour les noyaux ayant un nombre de neutrons supérieur à  $N = 82$ , la déformation allongée augmente et se sature à une valeur proche de  $\beta_2 = 0.29$ ,  $\beta_2 = 0.30$  et  $\beta_2 = 0.26$  pour les isotopes de Nd, Sm et Ce, respectivement.

Il convient de noter que la coexistence de formes et les phénomènes de mélange de formes ne sont pas étudiés dans le présent travail, car nous avons limité nos calculs au

**TABLE 4.12** Les déformations quadrupolaires  $\beta_2$  des isotopes de Nd.

N	This work	RMF	Exp	Gogny	N	This work	RMF	Exp	Gogny
64	0.3603	0.4210		0.4210	83	-0.0420	----	----	----
65	0.3712	----	----	----	84	0.0000	0.0760	0.1237	0.0760
66	0.3496	0.4070		0.4070	85	0.0856	----	----	----
67	0.3491	----	----	----	86	0.1193	0.1650	0.1524	0.1650
68	0.3347	0.3730		0.3730	87	0.1332	----	----	----
69	0.3456	----	----	----	88	0.1800	0.2010	0.2013	0.2010
70	0.3092	0.4170	0.3700	0.4170	89	0.1940	----	----	----
71	0.2950	----	----	----	90	0.2127	0.2660	0.2853	0.2660
72	0.2558	0.4440	0.3490	0.4440	91	0.2277	----	----	----
73	0.2663	----	----	----	92	0.2381	0.3450	0.3490	0.3450
74	0.1795	0.2440	0.2490	0.2440	93	0.2571	----	----	----
75	0.1572	----	----	----	94	0.2607	0.3540	----	0.3540
76	0.0922	0.1760	----	0.1760	95	0.2714	----	----	----
77	0.1108	----	----	----	96	0.2780	0.3540	----	0.3540
78	-0.0163	0.1390	----	0.1390	97	0.2873	----	----	----
79	-0.0288	----	----	----	98	0.2883	0.3650	----	0.3650
80	0.0000	0.0000	----	0.0000	99	0.2940	----	----	----
81	0.0514	----	----	----	100	0.2929	0.3610	----	0.3610
82	0.0000	0.0000	0.0917	0.0000	101	0.2973	----	----	----

cadre axiale. Pour étudier ces caractéristiques, des modèles au delà du champ moyen sont utilisés, tels que la méthode de la coordonnées génératrice (GCM) [101] et l'Hamiltonien de Bohr [102].

## 4.4 Conclusion

La théorie HFB avec la force de Skyrme SLy5 a été utilisée pour étudier les propriétés de l'état fondamental des chaînes isotopiques pairs et impairs de *Nd*, *Ce* et *Sm*. Les énergies de liaison, les énergies de séparation de deux neutrons, les déformations quadrupolaires et les rayons de charge, de protons et de neutrons ont été calculés. Ces calculs ont été effectués au moyen d'une nouvelle formule généralisée de la force d'appariement  $V_0^{n,p}$  pour les neutrons et les protons. L'utilisation de cette formule a amélioré la précision des résultats des propriétés de l'état fondamental des noyaux. Les énergies de liaison des isotopes de *Nd*, *Ce* et *Sm* ont été décrites avec succès dans ce travail. Le comportement parabolique des énergies de liaison par nucléon a été bien reproduit par rapport à la courbe expérimentale. Un halo de neutrons possible a été observé dans les trois séries d'isotopes *Nd*, *Ce* et *Sm*. La déformation

quadrupolaire de Nd, Ce et Sm est bien décrite avec de petites différences par rapport aux résultats expérimentaux.

**TABLE 4.13** Les déformations quadrupolaires  $\beta_2$  des isotopes de Ce et Sm.

Sm					Ce				
N	This work	RMF	Exp	Gogny	N	This work	RMF	Exp	Gogny
66	0,3585	0,3980	----	0,3890	61	0,3341	----	----	----
67	0,3570	----	----	----	62	0,3288	0,3840	----	0,4180
68	0,3488	0,3770	----	0,3750	63	0,3522	----	----	----
69	0,3589	----	----	----	64	0,3266	0,3720	----	0,4150
70	0,3367	0,3800	----	0,3620	65	0,3244	----	----	----
71	0,3180	----	----	----	66	0,3110	0,3560	0,3850	0,3790
72	0,3099	0,4360	0,3660	0,3950	67	0,3177	----	----	----
73	0,3124	----	----	----	68	0,2900	0,3330	0,3250	0,3580
74	0,2244	0,2500	0,2930	0,2610	69	0,2764	----	----	----
75	0,1685	----	----	----	70	0,2558	0,2970	0,2980	0,3220
76	0,1027	0,1830	0,2080	0,2100	71	0,2611	----	----	----
77	0,1140	----	----	----	72	0,2105	0,2430	0,2580	0,2720
78	-0,0185	0,1470	----	-0,1280	73	0,1733	----	----	----
79	-0,0310	----	----	----	74	0,1467	0,2050	0,2640	0,2130
80	0,0000	0,0000	----	-0,0020	75	0,1395	----	----	----
81	-0,0307	----	----	----	76	0,0590	0,1650	0,1950	0,1760
82	0,0000	0,0000	0,0874	0,0000	77	0,0424	----	----	----
83	-0,0437	----	----	----	78	0,0194	0,1140	0,1700	0,1310
84	0,0000	0,0450	----	0,0000	79	-0,0271	----	----	----
85	0,0857	----	----	----	80	0,0000	0,0010	0,1259	0,0270
86	0,1145	0,1670	0,1423	0,1050	81	0,0488	----	----	----
87	0,1329	----	----	----	82	0,0000	0,0010	0,1015	0,0000
88	0,1881	0,2040	0,1931	0,1880	83	-0,0470	----	----	----
89	0,2036	----	----	----	84	0,0000	0,0010	0,1277	0,0900
90	0,2278	0,2730	0,3064	0,2630	85	0,0789	----	----	----
91	0,2447	----	----	----	86	0,1081	0,0040	0,1660	0,1620
92	0,2573	0,3470	0,3410	0,3200	87	0,1215	----	----	----
93	0,2748	----	----	----	88	0,1654	0,1590	0,1930	0,1980
94	0,2792	0,3360	----	0,3360	89	0,1807	----	----	----
95	0,2874	----	----	----	90	0,1951	0,1970	0,2510	0,2500
96	0,2932	0,3510	----	0,3450	91	0,2088	----	----	----
97	0,3010	----	----	----	92	0,2171	0,2160	0,3200	0,3150
98	0,3017	0,3610	----	0,3550	93	0,2311	----	----	----
99	0,3071	----	----	----	94	0,2347	0,3130	----	0,3150
100	0,3056	0,3600	----	0,3630	95	0,2442	----	----	----
101	0,3075	----	----	----	96	0,2498	0,3240	----	0,3350
102	0,3059	0,3600	----	0,3660	97	0,2594	----	----	----
103	0,3118	----	----	----	98	0,2611	0,3350	----	0,3410

## Chapitre 5

# Calcul HFB des propriétés de l'état fondamental des isotopes pairs et impairs de Mo et Ru

### 5.1 Résumé

Dans le chapitre précédent, nous avons étudié les propriétés de l'état fondamental des isotopes de Nd, Ce et Sm en utilisant la méthode de Hartree-Fock-Bogoliubov avec la force de Skyrme SLy5 et dont la force d'appariement a été généralisée par une nouvelle formule proposée. Dans ce chapitre, nous avons étudié les propriétés de l'état fondamental des deux chaînes isotopiques pairs et impairs du Molybdène (Mo) et du Ruthénium (Ru). Pour cela, nous avons utilisé la méthode de Hartree-Fock-Bogoliubov avec la force de skyrme SLy4 et une nouvelle formule de la force d'appariement qui est plus précise pour cette région de noyaux. Les résultats ont été comparés aux données expérimentales disponibles et avec les résultats des calculs de Hartree-Fock-Bogoliubov basés sur l'interaction efficace nucléon-nucléon de Gogny D1S et les prédictions de certains modèles nucléaires tels que le modèle de la gouttelette liquide à portée finie (Finite Range Droplet Model, FRDM) et la théorie du champ moyen relativiste (RMF).

### 5.2 Introduction

L'un des principaux objectifs de la recherche en physique nucléaire est de faire des prédictions fiables avec un seul modèle nucléaire afin de décrire les propriétés de l'état fondamental de tous les noyaux dans la charte nucléique. Plusieurs approches ont été développées pour étudier les propriétés des états excités et de l'état fondamental des noyaux pairs-pairs et

impairs. En raison du manque de compréhension totale de l'interaction forte et des difficultés numériques dans le traitement du problème nucléaire à plusieurs corps, les théories de champ moyen non-relativiste [91, 103–106] et relativiste [29, 107] ont reçu beaucoup d'attention pour décrire les propriétés de l'état fondamental des noyaux. L'une des approches phénoménologiques les plus importantes et largement utilisées dans les calculs de structure nucléaire est la méthode de Hartree-Fock-Bogoliubov [108], qui unifie la description auto-cohérente des orbitales nucléaires, telle qu'elle est donnée par Hartree-Fock (HF) et la théorie de l'appariement de Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS) [49] en une seule théorie variationnelle.

Le molybdène (Mo,  $Z = 42$ ) et le ruthénium (Ru,  $Z = 44$ ), ainsi que tous les noyaux dont les nombres de neutrons sont proches du nombre magique  $N = 50$ , présentent de nombreuses propriétés nucléaires intéressantes telles qu'un comportement anormal dans les déplacements isotopiques et les grands changements de forme [107, 109].

### 5.3 Détails des calculs

Dans ce qui suit, nous nous intéressons au calcul et à l'analyse de certaines propriétés de l'état fondamental des isotopes pairs et impairs du Molybdène pour une large gamme de nombres de neutrons, en utilisant la méthode de Skyrme-Hartree-Fock-Bogoliubov et une nouvelle formule généralisée de la force d'appariement. Les propriétés de l'état fondamental sur lesquelles nous nous sommes concentrés sont l'énergie de liaison, les énergies de séparation d'un et de deux neutrons, les rayons de charge, de protons et de neutrons, le gap d'appariement et la déformation quadrupolaire. Nous avons également effectué des calculs similaires pour les isotopes de *Ru* qui est dans les environs de *Mo*.

Dans le présent travail, parmi plusieurs ensembles de paramètres pour la prédiction des propriétés de l'état fondamental nucléaire [110, 111], nous avons utilisé la force de Skyrme SLy4 [91] qui est largement utilisée dans les calculs de la structure nucléaire. La force de Skyrme SLy4 a été développée par E. Chabanat et ses collaborateurs. Elle fait partie de la famille de forces SLyx. Pour déterminer l'ensemble des paramètres de cette force (10 au total), les auteurs ont suivi un protocole d'ajustement incluant certaines propriétés de la matière nucléaire infinie (valeur de saturation  $\rho_0$  et coefficient d'incompressibilité) et quelques propriétés de la matière nucléaire finie (masses et rayons de quelques noyaux doublement magiques). Cette force a été construite pour des conditions extrêmes d'isospin et de densité. Néanmoins, elle conduit à de très bons résultats pour les noyaux de la vallée de stabilité et les noyaux fortement déformés.

L'ensemble des paramètres SLy4 [91] utilisés dans cette étude est présenté dans le tableau 5.1.

TABLE 5.1 Paramètres de la force de Skyrme SLy4.

Parameter	SLy4
$t_0$ (MeV fm <sup>3</sup> )	-2488.91
$t_1$ (MeV fm <sup>5</sup> )	486.82
$t_2$ (MeV fm <sup>5</sup> )	-546.39
$t_3$ (MeV fm <sup>4</sup> )	13777.0
$x_0$	0.834
$x_1$	-0.344
$x_2$	-1.000
$x_3$	1.354
$W_0$ (MeV fm <sup>3</sup> )	123.0
$\sigma$	1/6

Comme dans le chapitre 4, dans le fichier des données d'entrée du programme HFBTHO (v2.00d) [56], nous avons modifié les valeurs de la force d'appariement des neutrons  $V_0^n$  et des protons  $V_0^p$  (en MeV), qui peuvent être différentes, mais dans notre étude, nous avons utilisé la même force d'appariement  $V_0^{n,p}$  pour les deux. À chaque fois, nous avons exécuté le programme et comparé l'énergie de l'état fondamental obtenue à la valeur expérimentale. Cette procédure a été répétée jusqu'à ce que nous trouvions la valeur de  $V_0^{n,p}$  qui donne l'énergie de l'état fondamental la plus proche de celle expérimentale. Pour plus de détails, voir la section 4.2 du Chapitre 4.

En ajustant les valeurs obtenues de  $V_0^{n,p}$  au nombre de masse  $A$ , nous avons trouvé la formule suivante :

$$V_0^{n,p} = 155.88A^{\frac{1}{6}} \quad (5.1)$$

Afin de calculer les propriétés de l'état fondamental des isotopes pairs-pairs et impairs  $^{84-140}\text{Mo}$ , l'équation (5.1) a été utilisée pour générer la force d'appariement  $V_0^{n,p}$  que nous avons incluse dans le code HFBTHO (v2.00d). Les mêmes calculs ont été effectués pour les isotopes  $^{88-144}\text{Ru}$ . Les résultats sont présentés dans le paragraphe suivant.

## 5.4 Résultats et discussion

Dans ce paragraphe, nous présentons les résultats numériques de ce travail, particulièrement pour l'énergie de liaison, les énergies de séparation de neutrons, les rayons de charge, de neutrons et de protons, le gap d'appariement et la déformation quadrupolaire pour les isotopes  $^{84-140}\text{Mo}$  et  $^{88-144}\text{Ru}$ .

Dans tous nos calculs, nous avons utilisé la force de Skyrme (SLy4) et l'équation (5.1) pour la force d'appariement.

### 5.4.1 Énergie de liaison

Les énergies de liaison par nucléon ( $BE/A$ ) des isotopes de *Mo* et de *Ru*, calculées en utilisant les forces d'appariement générées par l'équation (5.1), sont dressées dans les tableaux (5.2 et 5.3) et tracées dans la figure 5.1 en fonction du nombre de neutrons  $N$ . Les valeurs expérimentales des énergies de liaison par nucléon [92], ainsi que les calculs HFB basés sur la force de Gogny D1S [93], les prédictions du modèle de la gouttelette liquide à portée finie (FRDM) [96] et du modèle de champ moyen relativiste (RMF) avec le fonctionnel NL3 [97] sont aussi donnés dans la figure 5.1 pour comparaison.

TABLE 5.2 Energies de liaison par nucléon pour les isotopes pairs et impairs de *Mo* (en MeV).

Nombre de neutrons	This work	Exp	HFB Gogny	RMF	FRDM
42	8.3247	8.3290	8.3028	8.2863	8.2974
43	8.3677	8.3613	----	----	8.3407
44	8.4425	8.4347	8.4216	8.3829	8.4187
45	8.4762	8.4624	----	----	8.4526
46	8.5400	8.5239	8.5212	8.4894	8.5184
47	8.5664	8.5450	----	----	8.5444
48	8.6197	8.5970	8.6037	8.5827	8.6001
49	8.6397	8.6136	----	----	8.6160
50	8.6827	8.6577	8.6702	8.6557	8.6617
51	8.6309	8.6514	----	----	8.6491
52	8.6761	8.6623	8.6508	8.6371	8.6616
53	8.6558	8.6487	----	----	8.6416
54	8.6576	8.6540	8.6233	8.6234	8.6478
55	8.6311	8.6351	----	----	8.6259
56	8.6295	8.6352	8.6025	8.6119	8.6284
57	8.5956	8.6078	----	----	8.6028
58	8.5884	8.6046	8.5613	8.5739	8.6026
59	8.5493	8.5729	----	----	8.5749
60	8.5406	8.5685	8.5173	8.5433	8.5708
61	8.5051	8.5384	----	----	8.5414
62	8.4955	8.5280	8.4707	8.5000	8.5320
63	8.4541	8.4950	----	----	8.4980
64	8.4439	8.4796	8.4193	8.4518	8.4832
65	8.4021	8.4423	----	----	8.4452

Suite à la page suivante



TABLE 5.2 Suite de la page précédente

Nombre de neutrons	This work	Exp	HFB Gogny	RMF	FRDM
66	8.3854	8.4223	8.3641	8.4056	8.4271
67	8.3338	8.3815	----	----	8.3880
68	8.3136	8.3594	8.3018	8.3503	8.3688
69	8.2724	8.3153	----	----	8.3277
70	8.2491	8.2910	8.2325	8.2842	8.3028
71	8.2107	8.2480	----	----	8.2508
72	8.1985	8.2200	8.1571	8.2164	8.2259
73	8.1460	8.1750	----	----	8.1815
74	8.1357	8.1460	8.0868	8.1480	8.1549
75	8.0735	8.1000	----	----	8.1105
76	8.0636	----	8.0145	8.0720	8.0821
77	8.0100	----	----	----	8.0376
78	7.9872	----	7.9403	7.9954	8.0075
79	7.9334	----	----	----	7.9616
80	7.9083	----	7.8646	7.9259	7.9278
81	7.8552	----	----	----	7.8941
82	7.8287	----	7.7880	7.8490	7.8642
83	7.7509	----	----	----	7.8023
84	7.7231	----	7.6685	7.7477	7.7537
85	7.6529	----	----	----	7.6900
86	7.6130	----	7.5506	7.6366	7.6397
87	7.5395	----	----	----	7.5664
88	7.4944	----	7.4333	----	7.5175
89	7.4261	----	----	----	7.4536
90	7.3744	----	7.3178	----	7.4070
91	7.3126	----	----	----	7.3480
92	7.2634	----	7.2022	----	7.3020
93	7.1970	----	----	----	7.2430
94	7.1511	----	----	----	7.1965
95	7.0834	----	----	----	7.1368
96	7.0327	----	----	----	7.0905
97	6.9706	----	----	----	7.0315
98	6.9270	----	----	----	6.9852

TABLE 5.3 Energies de liaison par nucléon pour les isotopes pairs et impairs de *Ru* (en MeV).

Nombre de neutrons	This work	Exp	HFB Gogny	RMF	FRDM
44	8.3010	8.2980	8.2813	8.2548	8.2800
45	8.3470	8.3370	----	----	8.3262
46	8.4226	8.4098	8.4065	8.3892	8.4031
47	8.4615	8.4429	----	----	8.4404
48	8.5252	8.5048	8.5138	8.4960	8.5068
49	8.5580	8.5315	----	----	8.5334
50	8.6108	8.5837	8.6039	8.5887	8.5889
51	8.5745	8.5875	----	----	8.5861
52	8.6238	8.6094	8.6038	8.5890	8.6083
53	8.6131	8.6043	----	----	8.5984
54	8.6242	8.6203	8.5969	8.5993	8.6168
55	8.6074	8.6087	----	----	8.6035
56	8.6164	8.6193	8.5962	8.5966	8.6140
57	8.5926	8.6013	----	----	8.5970
58	8.5995	8.6074	8.5735	8.5780	8.6027
59	8.5723	8.5843	----	----	8.5824
60	8.5709	8.5874	8.5427	8.5534	8.5848
61	8.5395	8.5619	----	----	8.5606
62	8.5382	8.5609	8.5100	8.5288	8.5580
63	8.5030	8.5334	----	----	8.5307
64	8.4998	8.5272	8.4741	8.4979	8.5236
65	8.4621	8.4962	----	----	8.4934
66	8.4652	8.4863	8.4338	8.4662	8.4804
67	8.4236	8.4529	----	----	8.4486
68	8.4157	8.4392	8.3845	8.4258	8.4368
69	8.3722	8.4027	----	----	8.4023
70	8.3613	8.3853	8.3293	8.3733	8.3863
71	8.3171	8.3485	----	----	8.3480
72	8.3117	8.3269	8.2708	8.3160	8.3289
73	8.2668	8.2860	----	----	8.2903
74	8.2556	8.2650	8.2140	8.2595	8.2696
75	8.2104	8.2240	----	----	8.2309
76	8.1959	8.2010	8.1546	8.1959	8.2082

Suite à la page suivante

TABLE 5.3 Suite de la page précédente

Nombre de neutrons	This work	Exp	HFB Gogny	RMF	FRDM
77	8.1487	8.1590	----	----	8.1696
78	8.1316	8.1370	8.0930	8.1347	8.1447
79	8.0838	8.0950	----	----	8.1041
80	8.0701	8.0710	8.0293	8.0697	8.0825
81	8.0167	----	----	----	8.0490
82	7.9954	----	7.9636	8.0041	8.0238
83	7.9193	----	----	----	7.9663
84	7.8958	----	7.8518	7.9072	7.9222
85	7.8298	----	----	----	7.8626
86	7.7878	----	7.7402	7.8001	7.8170
87	7.7230	----	----	----	7.7496
88	7.6816	----	7.6295	7.7096	7.7029
89	7.6162	----	----	----	7.6435
90	7.5750	----	7.5190	7.6151	7.5985
91	7.5086	----	----	----	7.5423
92	7.4673	----	7.4068	7.5197	7.5002
93	7.4030	----	----	----	7.4437
94	7.3585	----	7.2943	7.4251	7.4008
95	7.2937	----	----	----	7.3447
96	7.2526	----	7.1820	7.3307	7.3020
97	7.1880	----	----	----	7.2462
98	7.1485	----	7.0705	----	7.2027
99	7.0829	----	----	----	7.1477
100	7.0447	----	6.9608	----	7.1049

A partir de la figure 5.1, on voit que les énergies de liaison par particule des isotopes de *Mo* et de *Ru* produites par nos calculs en utilisant HFB avec les paramètres SLy4 sont en bon accord avec les données expérimentales. Nous notons aussi que les maximums des énergies de liaison par nucléon ( $BE/A$ ), pour les isotopes de *Mo* et de *Ru*, sont observés aux nombres magiques de neutrons  $N = 50$  et  $N = 82$ .

Les erreurs maximales approximatives des énergies de liaison par nucléon ( $BE/A$ ) entre les résultats théoriques et les données expérimentales pour *Mo* et *Ru* sont listées dans le tableau 5.4.

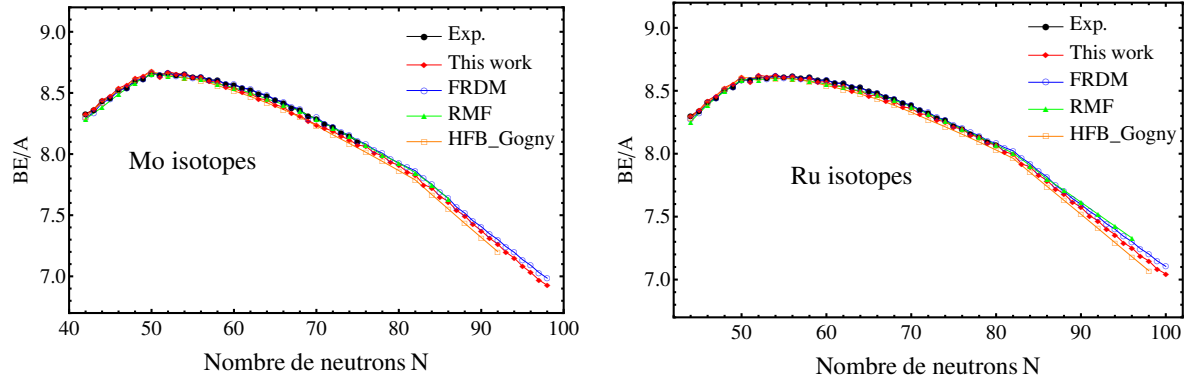


FIGURE 5.1 Energies de liaison par nucléon pour les isotopes pairs et impairs de *Mo* et de *Ru* (en MeV).

TABLE 5.4 L'erreur maximale  $(BE/A)_{theor} - (BE/A)_{exp}$  (en MeV).

Nuclei	This work	RMF	FRDM	HFB <sub>Gogny</sub>
Mo	0.04772	0.05180	0.03162	0.06286
Ru	0.03415	0.04323	0.01800	0.05613

Afin de montrer à quel point nos résultats sont exacts, les différences entre les énergies expérimentales totales de liaison et les résultats calculés obtenus dans ce travail en utilisant l'équation (5.1), sont présentées dans la figure 5.2 en fonction du nombre de neutrons  $N$ . Les calculs HFB basés sur la force de Gogny D1S [93] ainsi que les prédictions des modèles FRDM [96] et RMF(NL3)[97] sont incluses pour comparaison. Nous soulignons que cette comparaison est faite uniquement pour les isotopes ayant des données expérimentales disponibles.

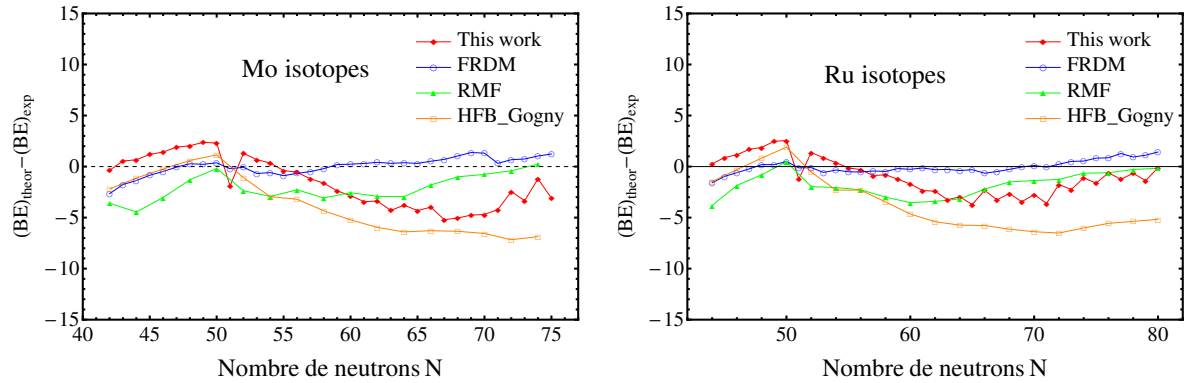


FIGURE 5.2 Les différences entre les énergies de liaison totales théoriques et celles expérimentales pour les isotopes de *Mo* et de *Ru*.

L'erreur absolue moyenne entre les données expérimentales et les résultats de ce travail sont listées dans le tableau 5.5. Les prédictions des modèles FRDM et RMF ainsi que

les calculs HFB basés sur la force de Gogny D1S sont également répertoriés à titre de comparaison.

**TABLE 5.5** L'erreur absolue moyenne  $(BE)_{theor} - (BE)_{exp}$  (en Mev).

Noyau	This work	RMF	FRDM	HFB <sub>Gogny</sub>
Mo	1.5777	2.0809	0.0295	3.7749
Ru	0.9790	1.7599	0.0313	3.7027

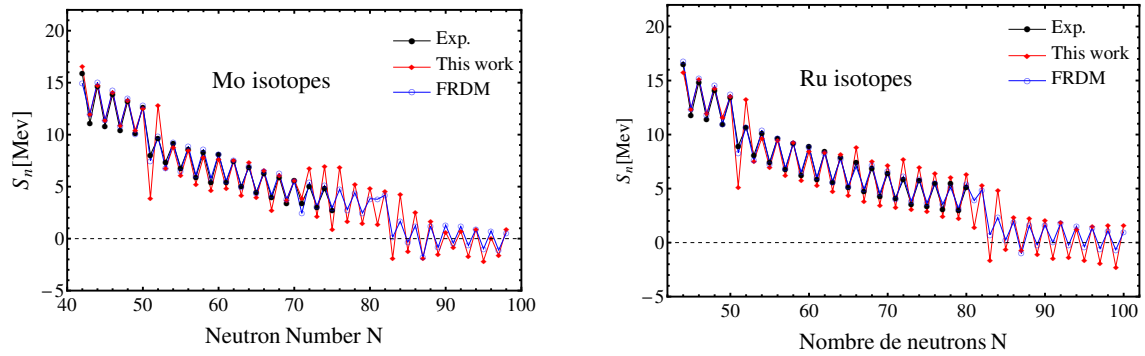
### 5.4.2 Énergie de séparation de neutrons

Les énergies de séparation d'un neutron et de deux neutrons sont très importantes dans l'étude de la structure nucléaire. Dans ce travail, nous les avons calculées pour les isotopes pairs et impairs de *Mo* et de *Ru* dans la paramétrisation SLy4 avec la force d'appariement  $V_0^{n,p}$  générée par l'équation (5.1).

L'énergies de séparation de deux neutrons,  $S_{2n}$ , est donnée par l'Eq (4.2), et l'énergie de séparation d'un neutron,  $S_n$ , est définie comme suit :

$$S_n(Z, N) = BE(Z, N) - BE(Z, N - 1) \quad (5.2)$$

Les énergies  $S_n$  et  $S_{2n}$  calculées pour les isotopes de *Mo* et de *Ru* sont affichées sur les figures 5.3 et 5.4, respectivement. Les données expérimentales disponibles [92], les calculs HFB basés sur la force de Gogny D1S [93] et les prédictions des modèles RMF [97] et FRDM [96] sont aussi présentés à titre de comparaison.



**FIGURE 5.3** Les énergies de séparation d'un neutron,  $S_n$ , des isotopes de *Mo* et de *Ru*.

D'après les figures 5.3 et 5.4, on voit clairement que les énergies de séparation expérimentales sont bien reproduites par nos calculs. Malgré les légères différences dans le cas de certains isotopes, nos résultats ont l'erreur moyenne absolue la plus faible par rapport aux autres modèles, comme nous pouvons le voir dans le tableau 5.6. De plus, on observe

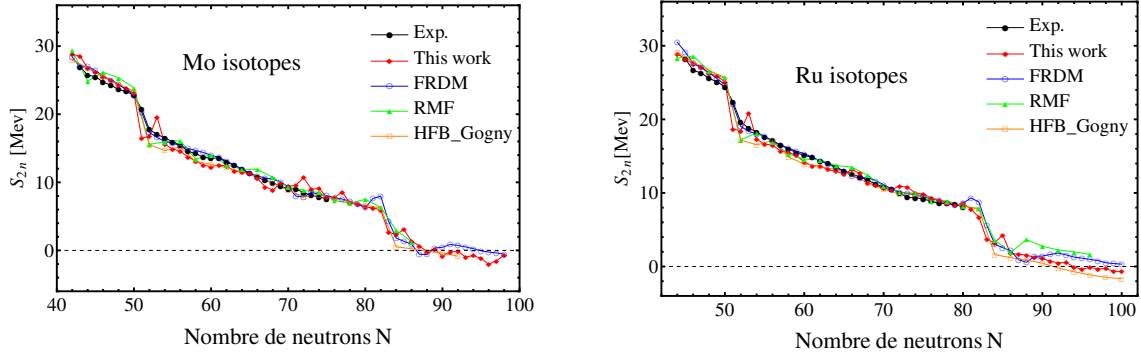


FIGURE 5.4 Les énergies de séparation de deux neutrons,  $S_{2n}$ , des isotopes de *Mo* et de *Ru*.

des chutes drastiques de  $S_n$  et  $S_{2n}$  aux nombres de neutrons magiques  $N = 50$  et  $N = 82$ , qui correspondent aux couches fermées.

TABLE 5.6 L'erreur absolue moyenne  $(S_{2n})_{theor} - (S_{2n})_{exp}$  et  $(S_n)_{theor} - (S_n)_{exp}$  (en Mev).

	$(S_{2n})_{theor} - (S_{2n})_{exp}$				$(S_n)_{theor} - (S_n)_{exp}$	
	This work	RMF	FRDM	HFB <sub>Gogny</sub>	This work	FRDM
Mo	0.090	0.240	0.200	0.290	0.061	0.086
Ru	0.075	0.202	0.166	0.206	0.028	0.089

Pour les noyaux avec  $N > 82$ , les énergies de séparation d'un et de deux neutrons sont toutes petites, et  $S_n$  de ces noyaux avec des nombres de masse impairs est presque nulle ou négative. Le dernier noyau stable contre l'émission de deux neutrons est prédit par nos calculs d'être  $^{132}\text{Mo}$  et  $^{138}\text{Ru}$  pour les chaînes isotopiques *Mo* et *Ru*, respectivement. Une autre caractéristique bien connue qu'on peut voir sur la figure 5.3 est que les noyaux pairs ont une énergie de séparation  $S_n$  plus grande que leurs voisins impairs, c'est ce qui explique les fluctuations observées dans la figure 5.3.

### 5.4.3 Rayons de neutron, de proton et de charge

Dans la figure 5.5, Les moyennes quadratiques du rayon de charge (calculées en utilisant  $R_c^2 = R_p^2 + 0.64$  (fm), où  $R_c$  et  $R_p$  sont les rayons de charge et de protons, respectivement) sont représentées. Les données expérimentales [98] disponibles, ainsi que les prédictions de la théorie RMF [97] et les calculs HFB basés sur la force de Gogny D1S [93] sont également montrés dans la figure 5.5 pour comparaison. Les valeurs numériques des rayons de charge des isotopes de *Mo* et de *Ru* sont présentées dans les tableaux 5.7 et 5.8, respectivement.

De la figure 5.5, un bon accord entre la théorie et l'expérience peut être clairement vu. On peut également voir que les rayons de charge des noyaux ayant un nombre de neutrons plus grand que  $N = 50$ , commencent à augmenter avec l'addition de neutrons.

TABLE 5.7 Les rayons de charge des isotopes de Mo.

N	This work	RMF	Exp	Gogny	N	This work	RMF	Exp	Gogny
42	4.321	4.333	----	4.280	70	4.586	4.549	----	4.540
43	4.324	----	----	----	71	4.571	----	----	----
44	4.327	4.316	----	4.290	72	4.574	4.557	----	4.510
45	4.330	----	----	----	73	4.583	----	----	----
46	4.334	4.316	----	4.290	74	4.557	4.569	----	4.520
47	4.338	----	----	----	75	4.564	----	----	----
48	4.341	4.315	4.327	4.300	76	4.572	4.581	----	4.530
49	4.345	----	4.318	----	77	4.578	----	----	----
50	4.347	4.314	4.315	4.310	78	4.585	4.567	----	4.550
51	4.374	----	----	----	79	4.592	----	----	----
52	4.365	4.336	4.353	4.320	80	4.599	4.581	----	4.560
53	4.371	----	4.363	----	81	4.605	----	----	----
54	4.381	4.381	4.385	4.340	82	4.610	4.597	----	4.570
55	4.388	----	4.388	----	83	4.616	----	----	----
56	4.398	4.401	4.409	4.360	84	4.628	4.610	----	4.580
57	4.411	----	----	----	85	4.634	----	----	----
58	4.418	4.448	4.447	4.400	86	4.643	4.622	----	4.590
59	4.425	----	----	----	87	4.650	----	----	----
60	4.491	4.497	4.491	4.430	88	4.660	----	----	4.600
61	4.537	----	4.515	----	89	4.666	----	----	----
62	4.541	4.526	4.525	4.460	90	4.677	----	----	4.620
63	4.567	----	4.539	----	91	4.681	----	----	----
64	4.565	4.496	4.549	4.480	92	4.694	----	----	4.630
65	4.579	----	----	----	93	4.699	----	----	----
66	4.582	4.515	4.560	4.510	94	4.711	----	----	----
67	4.599	----	----	----	95	4.717	----	----	----
68	4.599	4.535	----	4.530	96	4.733	----	----	----
69	4.595	----	----	----	97	4.735	----	----	----
70	4.586	4.549	----	4.540	98	4.749	----	----	----

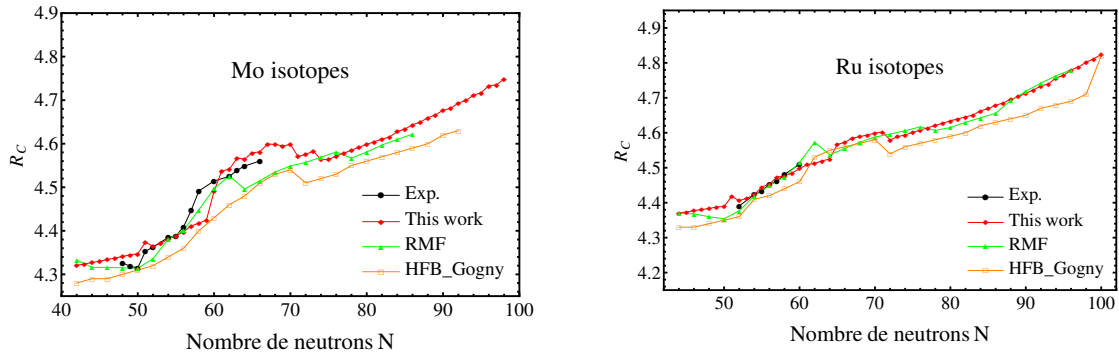
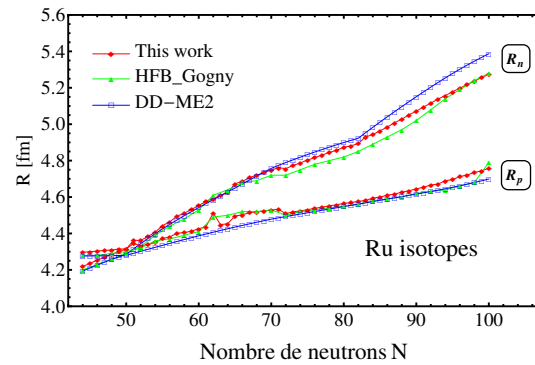
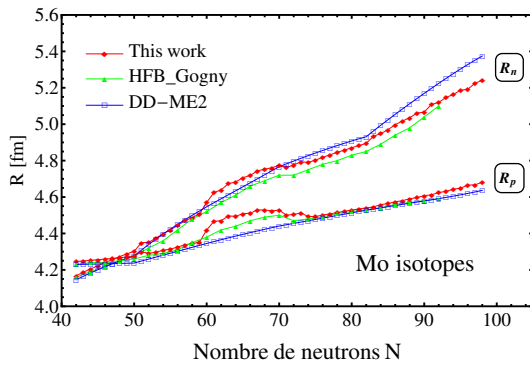
FIGURE 5.5 Les rayons de charge des isotopes de *Mo* et de *Ru*.

TABLE 5.8 Les rayons de charge des isotopes de Ru.

N	This work	RMF	Exp	Gogny	N	This work	RMF	Exp	Gogny
44	4.371	4.370	----	4.330	72	4.580	4.596	----	4.540
45	4.373	----	----	----	73	4.589	----	----	----
46	4.377	4.368	----	4.330	74	4.594	4.606	----	4.560
47	4.381	----	----	----	75	4.601	----	----	----
48	4.383	4.360	----	4.340	76	4.608	4.617	----	4.570
49	4.388	----	----	----	77	4.614	----	----	----
50	4.389	4.354	----	4.350	78	4.621	4.607	----	4.580
51	4.418	----	----	----	79	4.627	----	----	----
52	4.406	4.377	4.391	4.360	80	4.634	4.615	----	4.590
53	4.413	----	----	----	81	4.640	----	----	----
54	4.423	4.419	4.423	4.410	82	4.645	4.630	----	4.600
55	4.445	----	4.434	----	83	4.651	----	----	----
56	4.453	4.449	4.453	4.420	84	4.663	4.643	----	4.620
57	4.473	----	4.461	----	85	4.669	----	----	----
58	4.477	4.474	4.481	4.440	86	4.679	4.656	----	4.630
59	4.485	----	----	----	87	4.685	----	----	----
60	4.497	4.515	4.510	4.460	88	4.696	4.692	----	4.640
61	4.509	----	----	----	89	4.703	----	----	----
62	4.513	4.573	----	4.530	90	4.713	4.719	----	4.650
63	4.520	----	----	----	91	4.722	----	----	----
64	4.525	4.537	----	4.550	92	4.734	4.742	----	4.670
65	4.567	----	----	----	93	4.739	----	----	----
66	4.573	4.555	----	4.560	94	4.757	4.763	----	4.680
67	4.585	----	----	----	95	4.764	----	----	----
68	4.589	4.573	----	4.570	96	4.780	4.780	----	4.690
69	4.594	----	----	----	97	4.788	----	----	----
70	4.599	4.588	----	4.580	98	4.802	----	----	4.710
71	4.602	----	----	----	99	4.812	----	----	----

FIGURE 5.6 Les rayons de neutrons et de protons des isotopes de *Mo* et de *Ru*.



**TABLE 5.9** Les rayons de neutrons et de protons des isotopes de Mo.

Nombre de Neutrons	Rn			Rp		
	This work	RMF	HFB Gogny	This work	RMF	HFB Gogny
42	4.168	4.187	4.160	4.246	4.258	4.230
43	4.187	----	----	4.249	----	----
44	4.205	4.208	4.190	4.253	4.241	4.240
45	4.223	----	----	4.256	----	----
46	4.240	4.246	4.220	4.260	4.242	4.240
47	4.257	----	----	4.263	----	----
48	4.273	4.280	4.250	4.267	4.241	4.250
49	4.288	----	----	4.271	----	----
50	4.302	4.302	4.280	4.273	4.239	4.260
51	4.349	----	----	4.300	----	----
52	4.351	4.380	4.320	4.291	4.261	4.280
53	4.374	----	----	4.297	----	----
54	4.398	4.453	4.360	4.307	4.308	4.290
55	4.421	----	----	4.315	----	----
56	4.443	4.509	4.420	4.325	4.328	4.310
57	4.471	----	----	4.338	----	----
58	4.486	4.581	4.480	4.344	4.375	4.350
59	4.508	----	----	4.352	----	----
60	4.571	4.658	4.520	4.419	4.425	4.380
61	4.625	----	----	4.466	----	----
62	4.639	4.715	4.570	4.470	4.455	4.420
63	4.674	----	----	4.496	----	----
64	4.683	4.733	4.610	4.494	4.424	4.440
65	4.706	----	----	4.509	----	----
66	4.719	4.779	4.660	4.511	4.444	4.470
67	4.743	----	----	4.529	----	----
68	4.753	4.823	4.690	4.528	4.464	4.490
69	4.761	----	----	4.525	----	----
70	4.764	4.864	4.720	4.515	4.478	4.500
71	4.763	----	----	4.500	----	----
72	4.775	4.900	4.720	4.503	4.487	4.470
73	4.794	----	----	4.513	----	----
74	4.788	4.937	4.750	4.487	4.499	4.480
75	4.803	----	----	4.493	----	----
76	4.818	4.972	4.780	4.501	4.510	4.490
77	4.832	----	----	4.508	----	----
78	4.845	4.995	4.800	4.515	4.496	4.510
79	4.858	----	----	4.522	----	----
80	4.871	5.026	4.830	4.529	4.510	4.520

TABLE 5.9 Les rayons de neutrons et de protons des isotopes de Mo (suite...).

Nombre de Neutrons	Rn			Rp		
	This work	RMF	HFB Gogny	This work	RMF	HFB Gogny
81	4.883	----	----	4.535	----	----
82	4.895	5.044	4.850	4.541	4.527	4.530
83	4.934	----	----	4.546	----	----
84	4.948	5.118	4.890	4.558	4.540	4.540
85	4.970	----	----	4.564	----	----
86	4.997	5.177	4.940	4.574	4.552	4.560
87	5.018	----	----	4.580	----	----
88	5.036	----	4.980	4.590	----	4.570
89	5.061	----	----	4.597	----	----
90	5.067	----	5.040	4.608	----	4.580
91	5.109	----	----	4.613	----	----
92	5.120	----	5.100	4.625	----	4.590
93	5.147	----	----	4.631	----	----
94	5.163	----	----	4.643	----	----
95	5.186	----	----	4.649	----	----
96	5.192	----	----	4.665	----	----
97	5.225	----	----	4.667	----	----
98	5.242	----	----	4.681	----	----

Les tableaux 5.9 et 5.10 ainsi que la figure 5.6 montrent les rayons de neutrons et de protons des isotopes de *Mo* et de *Ru* obtenus dans nos calculs. Les calculs de HFB basés sur la force de Gogny D1S [93] sont présentés pour comparaison ainsi que les résultats du modèle relativiste de Hartree-Bogoliubov (RHB) avec l'interaction effective DD-ME2 calculés en utilisant le code DIRHBZ [57]. Nous avons tracé les rayons de neutrons et de protons ( $R_n$  et  $R_p$ ) sur la même figure afin de voir la différence entre eux.

Comme on peut le voir d'après la figure 5.6, la différence entre les rayons de neutron et de proton commence à s'élargir avec l'augmentation du nombre de neutrons au profit du développement d'une peau de neutrons. Cette différence atteint 0.560 fm pour  $^{140}\text{Mo}$  et 0.516 fm pour  $^{144}\text{Ru}$ , ce qui peut être considéré comme une indication d'un éventuel halo de neutrons dans les isotopes de *Mo* et de *Ru*. Mais, au voisinage de la ligne de stabilité  $\beta$  ( $N \approx Z$ ), les rayons de neutrons et de protons sont presque égaux.

#### 5.4.4 Le gap d'appariement

Le gap d'appariement n'est pas directement accessible expérimentalement. Par conséquent, il existe diverses formules de différences finies dans la littérature, qui sont souvent interprétées comme une mesure du gap d'appariement empirique, telles que :

TABLE 5.10 Les rayons de neutrons et de protons des isotopes de Ru.

Nombre de Neutrons	Rn			Rp		
	This work	RMF	HFB Gogny	This work	RMF	HFB Gogny
44	4.219	4.221	4.200	4.297	4.296	4.280
45	4.236	----	----	4.300	----	----
46	4.253	4.257	4.230	4.303	4.294	4.280
47	4.270	----	----	4.307	----	----
48	4.285	4.285	4.260	4.310	4.286	4.290
49	4.301	----	----	4.314	----	----
50	4.314	4.304	4.290	4.316	4.280	4.300
51	4.363	----	----	4.345	----	----
52	4.362	4.379	4.330	4.333	4.303	4.320
53	4.384	----	----	4.340	----	----
54	4.407	4.452	4.390	4.350	4.346	4.360
55	4.443	----	----	4.372	----	----
56	4.464	4.513	4.440	4.381	4.376	4.370
57	4.495	----	----	4.401	----	----
58	4.511	4.570	4.480	4.405	4.401	4.390
59	4.532	----	----	4.413	----	----
60	4.554	4.640	4.530	4.426	4.444	4.410
61	4.576	----	----	4.437	----	----
62	4.591	4.719	4.610	4.513	4.503	4.490
63	4.610	----	----	4.448	----	----
64	4.625	4.726	4.640	4.454	4.466	4.500
65	4.673	----	----	4.496	----	----
66	4.686	4.770	4.680	4.502	4.484	4.520
67	4.707	----	----	4.515	----	----
68	4.720	4.814	4.690	4.519	4.503	4.520
69	4.734	----	----	4.524	----	----
70	4.748	4.853	4.720	4.529	4.517	4.530
71	4.761	----	----	4.532	----	----
72	4.756	4.888	4.720	4.509	4.526	4.500
73	4.774	----	----	4.519	----	----
74	4.787	4.923	4.750	4.524	4.536	4.520
75	4.803	----	----	4.531	----	----
76	4.817	4.957	4.780	4.538	4.547	4.530
77	4.831	----	----	4.544	----	----
78	4.844	4.984	4.800	4.551	4.537	4.540
79	4.857	----	----	4.558	----	----
80	4.873	5.010	4.820	4.565	4.545	4.550
81	4.882	----	----	4.570	----	----
82	4.894	5.029	4.850	4.576	4.560	4.560

TABLE 5.10 Les rayons de neutrons et de protons des isotopes de Ru (suite...).

Nombre de Neutrons	Rn			Rp		
	This work	RMF	HFB Gogny	This work	RMF	HFB Gogny
83	4.930	----	----	4.582	----	----
84	4.943	5.100	4.890	4.594	4.574	4.580
85	4.964	----	----	4.600	----	----
86	4.985	5.158	4.930	4.610	4.587	4.590
87	5.008	----	----	4.616	----	----
88	5.028	5.224	4.970	4.627	4.623	4.600
89	5.052	----	----	4.635	----	----
90	5.072	5.280	5.020	4.645	4.651	4.620
91	5.095	----	----	4.654	----	----
92	5.116	5.332	5.080	4.666	4.674	4.630
93	5.139	----	----	4.671	----	----
94	5.157	5.381	5.140	4.690	4.695	4.640
95	5.178	----	----	4.696	----	----
96	5.198	5.428	5.190	4.713	4.713	4.660
97	5.218	----	----	4.721	----	----
98	5.236	----	5.240	4.735	----	4.680
99	5.256	----	----	4.745	----	----
100	5.273	----	5.280	4.757	----	4.790

La formule de la différence de trois points [112] :

$$\Delta_Z^{(3)}(N) := \frac{\pi_N}{2} [E_b(Z, N-1) - 2E_b(Z, N) + E_b(Z, N+1)] \quad (5.3)$$

où  $N$  et  $Z$  sont les nombres de neutrons et de protons et  $E_b$  est l'énergie de liaison (négative) du noyau.  $\pi_N = (-1)^N$  est le nombre de parité.

Une autre relation couramment utilisée est la formule de la différence de quatre points [113]

$$\Delta_Z^{(4)}(N) := \frac{\pi_N}{4} [E_b(Z, N-2) - 3E_b(Z, N-1) + 3E_b(Z, N) - E_b(Z, N+1)] \quad (5.4)$$

L'ordre suivant correspond à la formule de différence de cinq points [114] :

$$\Delta_Z^{(5)}(N) := -\frac{\pi_N}{8} [E_b(Z, N+2) - 4E_b(Z, N+1) + 6E_b(Z, N) - 4E_b(Z, N-1) + E_b(Z, N-2)] \quad (5.5)$$

Dans la figure 5.7, les gaps d'appariement des neutrons obtenus dans nos calculs HFB sont comparés aux données expérimentales comme cela a été fait dans le travail de Bender *et*

*al.*, [9] avec des gaps spectraux  $\langle uv\Delta \rangle$ . Les valeurs expérimentales sont calculées à partir des énergies de liaison données de la Référence [92] en utilisant les formules de trois points  $\Delta^{(3)}$ , de quatre points  $\Delta^{(4)}$  et de cinq points  $\Delta^{(5)}$ , respectivement.

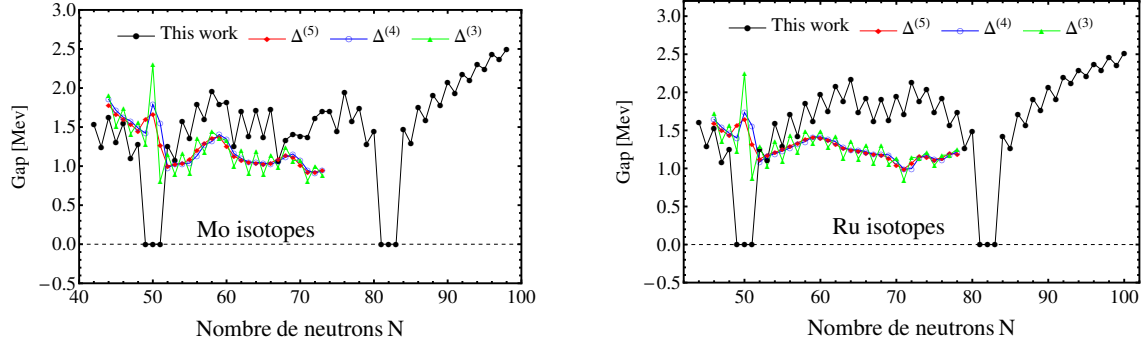


FIGURE 5.7 Les gaps d'appariement des isotopes de *Mo* et de *Ru*.

A partir de la figure 5.7, on peut voir clairement la proximité globale de nos calculs avec les données expérimentales, les différences entre eux sont dues au fait que les gaps d'appariement obtenus dans nos calculs HFB sont des gaps effectifs définis dans HFBTHO comme étant la valeur moyenne du champ d'appariement,

$$\bar{\Delta} = \frac{Tr(\Delta\rho)}{Tr(\rho)}, \quad (5.6)$$

avec  $\rho$  est la matrice normale de densité d'un corps et  $\Delta$  est le champ d'appariement [95]. De tels gaps effectifs définis ont le même comportement que les gaps spectraux de la référence [9].

De plus, nos gaps calculés sont exactement nuls pour les noyaux de couches fermées  $N = 50$ ,  $N = 82$  et leurs adjacents impairs comme dans la figure 4 de la référence [9], car à l'approximation HFB, les corrélations d'appariement s'annulent automatiquement dans le cas des noyaux magiques. Le champ d'appariement devient nul, de sorte que la valeur moyenne de ce champ s'annule également, ce qui correspond à une valeur maximale des gaps donnés par les formules empiriques 5.3, 5.4 et 5.5.

Une autre remarque que l'on peut voir sur cette figure est que les noyaux pairs-pairs ont des gaps plus grands que les noyaux impaires, ceci est dû au blocage d'un état dans le noyau de masse impaire. L'état bloqué ne contribue pas au potentiel d'appariement, ce qui conduit à des gaps globaux plus petits [114]. L'identification du candidat bloqué est effectuée en utilisant la même technique que dans HFODD [115] : l'hamiltonien à champ moyen est diagonalisé à chaque itération et fournit un ensemble d'états équivalents à une seule particule. Sur la base des nombres quantiques de Nilsson du niveau bloqué demandé fourni dans le fichier d'entrée, le code identifie l'index de la quasi-particule (q.p.) à bloquer en regardant le

chevauchement entre la fonction d'onde q.p. (composant inférieur et supérieur séparément) et la fonction d'onde s.p. Le chevauchement maximum spécifie l'index du q.p. bloqué [56].

#### 5.4.5 Déformation quadrupolaire

En plus de son importance, mentionné auparavant, la déformation peut également rendre une forme déformée plus favorisée que la forme sphérique pour certains noyaux en augmentant l'énergie de liaison nucléaire.

Dans la figure 5.8, on a tracé le paramètre de déformation quadrupolaire,  $\beta_2$ , pour les isotopes de *Mo* et de *Ru*. Les résultats de nos calculs sont comparés aux données expérimentales disponibles [99] et aux résultats des calculs HFB basés sur la force de Gogny D1S [93]. Il faut souligner que la figure 5.8 n'indique pas le signe du paramètre de déformation quadrupolaire  $\beta_2$ . Les résultats numériques sont présentés dans les tableaux 5.11 et 5.12.

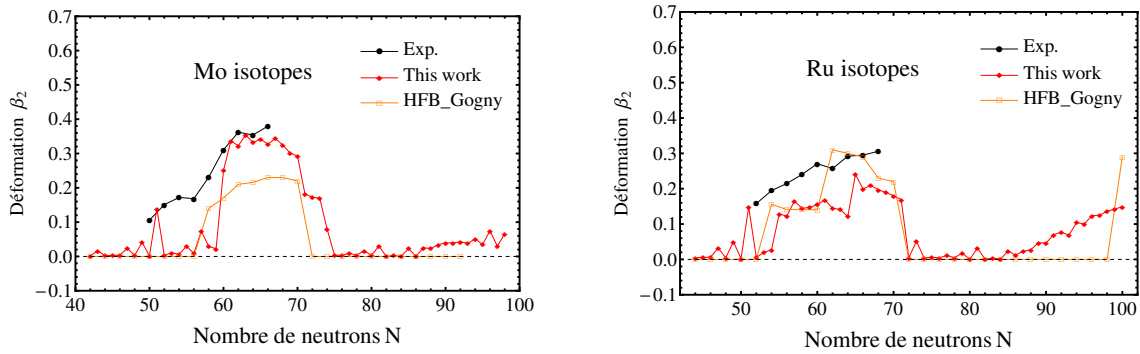


FIGURE 5.8 Les déformations quadrupolaires  $\beta_2$  des isotopes de *Mo* et de *Ru*.

Comme on peut le voir sur la figure 5.8, l'accord entre nos calculs et les données expérimentales est assez bon en général. Les valeurs de  $\beta_2$  montrent des minimums aux nombres de neutrons magiques  $N = 50$  et  $N = 82$  comme prévu, car presque tous les noyaux ayant ces deux nombres de neutrons sont sphériques. Les noyaux situés au-dessous et au-dessus de ces deux nombres magiques montrent un changement de forme intéressant. Pour les noyaux supérieurs à  $N = 50$ , la déformation allongée augmente puis se sature à une valeur proche de  $\beta_2 \approx 0.3$  pour les deux chaînes isotopiques *Mo* et *Ru* et pour les noyaux inférieurs à  $N = 82$ , il y a une transition de la forme déformée à la forme sphérique. Par conséquent, les régions où les noyaux sont modérément déformés sont  $60 \leq N \leq 74$  et  $55 \leq N \leq 70$  pour *Mo* et *Ru*, respectivement.

**TABLE 5.11** Les déformations quadrupolaires  $\beta_2$  des isotopes de *Mo*.

N	This work	RMF	Exp	N	This work	RMF	Exp
42	0.0018	0.2030	----	70	0.2924	0.2140	----
43	0.0163	----	----	71	0.1831	----	----
44	0.0027	0.2020	----	72	0.1720	0.1860	----
45	0.0030	----	----	73	0.1701	----	----
46	0.0036	0.0010	----	74	0.0798	0.1710	----
47	0.0240	----	----	75	0.0035	----	----
48	0.0031	0.0010	----	76	0.0038	0.0020	----
49	0.0409	----	----	77	0.0091	----	----
50	0.0017	0.0010	0.1058	78	0.0041	0.0020	----
51	0.1386	----	----	79	0.0161	----	----
52	0.0035	0.0010	0.1509	80	0.0036	0.0020	----
53	0.0112	----	----	81	0.0303	----	----
54	0.0057	0.1540	0.1720	82	0.0000	0.0010	----
55	0.0303	----	----	83	0.0026	----	----
56	0.0086	0.2200	0.1683	84	0.0000	0.0020	----
57	0.0741	----	----	85	0.0229	----	----
58	0.0296	0.2070	0.2309	86	0.0000	0.0040	----
59	0.0224	----	----	87	0.0254	----	----
60	0.2505	0.2160	0.3110	88	0.0231	0.0130	----
61	0.3364	----	----	89	0.0341	----	----
62	0.3228	0.2160	0.3620	90	0.0397	0.1610	----
63	0.3542	----	----	91	0.0393	----	----
64	0.3320	0.2200	0.3540	92	0.0431	0.1990	----
65	0.3423	----	----	93	0.0380	----	----
66	0.3271	0.2250	0.3800	94	0.0513	0.2120	----
67	0.3439	----	----	95	0.0345	----	----
68	0.3251	0.2280	----	96	0.0748	0.2150	----
69	0.3019	----	----	97	0.0296	----	----

## 5.5 Conclusion

Dans ce travail, nous avons étudié deux des chaînes isotopiques les plus intéressantes du tableau périodique, *Mo* et *Ru*, pour une large gamme de nombres de neutrons. Les calculs ont été effectués en utilisant la méthode HFB avec la force de Skyrme SLy4 et une nouvelle formule généralisée pour la force d'appariement  $V_0^{n,p}$  des neutrons et des protons. Les résultats de ces calculs reproduisent très bien les données expérimentales disponibles, y compris l'énergie de liaison par nucléon, les énergies de séparation d'un et de deux neutrons, les rayons de neutrons, de protons, et de charge, le gap d'appariement des neutrons et la déformation quadrupolaire. Le comportement parabolique de  $BE/A$  a été bien reproduit par rapport à la courbe expérimentale. Un éventuel halo de neutrons a été observé dans les

TABLE 5.12 Les déformations quadrupolaires  $\beta_2$  des isotopes de *Ru*.

N	This work	RMF	Exp	N	This work	RMF	Exp
44	0.0048	0.2030	----	72	0.0048	0.1940	----
45	0.0056	----	----	73	0.0513	----	----
46	0.0064	0.1160	----	74	0.0046	0.1730	----
47	0.0325	----	----	75	0.0061	----	----
48	0.0049	0.0640	----	76	0.0047	0.0910	----
49	0.0501	----	----	77	0.0109	----	----
50	0.0022	0.0000	----	78	0.0048	0.0860	----
51	0.1488	----	----	79	0.0179	----	----
52	0.0061	0.0000	0.1579	80	0.0000	0.0030	----
53	0.0196	----	----	81	0.0327	----	----
54	0.0277	0.1570	0.1947	82	0.0000	0.0010	----
55	0.1284	----	----	83	0.0039	----	----
56	0.1227	0.2030	0.2148	84	0.0000	0.0020	----
57	0.1649	----	----	85	0.0236	----	----
58	0.1447	0.2230	0.2404	86	0.0124	0.0040	----
59	0.1470	----	----	87	0.0230	----	----
60	0.1551	0.2180	0.2707	88	0.0275	0.1180	----
61	0.1685	----	----	89	0.0472	----	----
62	0.1448	0.2240	0.2570	90	0.0465	0.1650	----
63	0.1414	----	----	91	0.0698	----	----
64	0.1213	0.2270	0.2920	92	0.0772	0.1840	----
65	0.2399	----	----	93	0.0686	----	----
66	0.1995	0.2290	0.2950	94	0.1045	0.2100	----
67	0.2093	----	----	95	0.0999	----	----
68	0.1973	0.2310	0.3060	96	0.1239	0.2160	----
69	0.1892	----	----	97	0.1249	----	----
70	0.1802	0.2220	----	98	0.1361	0.2180	----
71	0.1689	----	----	99	0.1422	----	----

isotopes de *Mo* et de *Ru*. Le dernier noyau stable contre l'émission de neutrons s'est révélé être  $^{132}\text{Mo}$  pour les isotopes de *Mo* et  $^{138}\text{Ru}$  pour les isotopes de *Ru*. Des indications sur la transition de forme pour les deux chaînes isotopiques ont été données.



## Chapitre 6

# Etude de la structure nucléaire des isotopes pairs et impairs du Pb à l'aide de la méthode de Hartree-Fock-Bogoliubov

### 6.1 Résumé

La structure nucléaire des isotopes pairs et impairs du Plomb ( $^{178-236}\text{Pb}$ ) est étudiée dans la théorie de Hartree-Fock-Bogoliubov. Les calculs sont effectués pour une large gamme de nombres de neutrons, en commençant par le côté riche en protons jusqu'au côté riche en neutrons, en utilisant l'interaction de Skyrme SLy4 et une nouvelle formule qu'on a proposée pour la force d'appariement et qui est plus précise pour cette région de noyaux. Cette nouvelle formule permet d'atteindre la région des noyaux exotiques où les données expérimentales ne sont pas disponibles. Les valeurs calculées de diverses quantités physiques telles que l'énergie de liaison, l'énergie de séparation de deux neutrons, la déformation quadrupolaire et les rayons de protons et de neutrons sont discutées et comparées avec les données expérimentales et avec les estimations de certains modèles nucléaires tels que le modèle de la gouttelette liquide à portée finie (FRDM), le modèle du champ moyen relativiste (RMF) avec la fonctionnelle NL3, le modèle de l'échange de mésons dépendant de la densité (DD-ME2) et les résultats des calculs Hartree-Fock-Bogoliubov basés sur l'interaction efficace nucléon-nucléon de Gogny D1S (Gogny D1S).

## 6.2 Détails des calculs

Dans ce travail, les propriétés de l'état fondamental des isotopes pairs et impairs du Plomb,  $^{178-236}\text{Pb}$ , ont été reproduites en utilisant le code informatique HFBTHO (v2.00d) [56] qui utilise la base de l'oscillateur harmonique transformé pour obtenir les fonctions d'onde de quasi-particules. Il diagonalise itérativement l'hamiltonien de Hartree-Fock-Bogoliubov sur la base de densités d'énergie de type Skyrme généralisées et d'interactions d'appariement à portée nulle jusqu'à ce qu'une solution auto-cohérente soit trouvée.

Les calculs ont été effectués avec la force de Skyrme SLy4 [91] comme dans la référence [95], et en utilisant les mêmes paramètres que dans nos précédents travaux [90, 116]. Les isotopes impairs sont calculés en utilisant le blocage des états de quasi-particule [117].

L'ensemble de paramètres SLy4 [91] utilisé dans cette étude est présenté dans la table 5.1 du chapitre 5.

Dans le fichier de données d'entrée du code informatique HFBTHO (v2.00d) [56], nous avons modifié les valeurs de la force d'appariement comme dans les chapitres précédents.

En ajustant les valeurs obtenues de  $V_0^{n,p}$  au nombre de masse  $A$ , nous avons trouvé la formule suivante :

$$V_0^{n,p} = 7.28 A^{\frac{3}{4}} \quad (6.1)$$

L'équation (6.1) donne, pour chaque isotope de nombre de masse  $A$  (pair ou impair), la force d'appariement  $V_0^{n,p}$  appropriée pour reproduire les énergies de liaison les plus proches des énergies expérimentales des isotopes du Plomb.

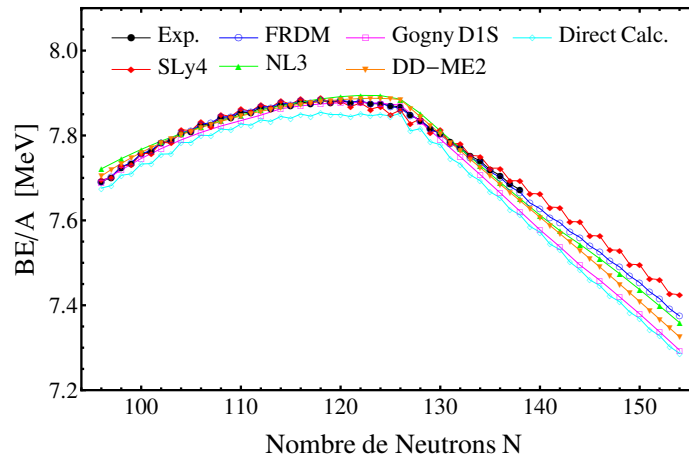
Nous avons utilisé l'équation (6.1) pour générer la force d'appariement  $V_0^{n,p}$ , pour chaque nombre de masse  $A$ , qu'on a incluse dans le fichier de données d'entrée du code informatique HFBTHO (v2.00d) afin de calculer plusieurs propriétés de l'état fondamental des isotopes du Plomb. Les résultats obtenus sont présentés dans la section suivante.

## 6.3 Résultats et discussion

Dans cette section, nous présentons les résultats numériques de ce travail, en particulier pour l'énergie de liaison, l'énergie de séparation de deux neutrons, les rayons de neutrons, de charge et de protons et la déformation quadrupolaire pour les isotopes  $^{178-236}\text{Pb}$ . Dans tous nos calculs, nous avons utilisé la force de Skyrme (SLy4) et l'équation (6.1) pour la force d'appariement.

### 6.3.1 Énergie de liaison

Les énergies de liaison par nucléon ( $BE/A$ ) calculées pour les isotopes du Plomb, en utilisant la force d'appariement générée par l'équation (6.1) sont présentées dans le tableau 6.1 et sur la figure 6.1 en fonction du nombre de neutrons  $N$ , et comparées à celles obtenues par calcul direct ("Direct Calc."), c.à.d en utilisant la valeur par défaut de la force d'appariement prédéfinie dans le code informatique pour chaque force de Skyrme indépendamment du nombre de masse. Dans le cas de la force de Skyrme SLy4, les valeurs par défaut sont :  $V_0^n = -325.2500$  et  $V_0^p = -340.0625$  pour les neutrons et les protons, respectivement. Les énergies de liaison expérimentales par nucléon [92] ainsi que les calculs HFB basés sur la force D1S de Gogny [93], les prédictions du modèle de la gouttelette liquide à portée finie (FRDM) [96], du modèle du champ moyen relativiste (RMF) avec la fonctionnelle NL3 [97] et de la fonctionnelle d'énergie relativiste par échange de mésons dépendant de la densité (DD-ME2) [58] sont également présentées pour comparaison.



**FIGURE 6.1** Les énergies de liaison par nucléon des isotopes du  $Pb$  obtenus à partir des calculs HFB avec Sly4, en comparaison avec les données expérimentales et celles obtenues par FRDM, Gogny D1S, NL3, DD-ME2 et calcul direct.

A partir de la figure 6.1, nous remarquons que le maximum de l'énergie de liaison par noyaux ( $BE/A$ ) pour les isotopes du Plomb est observé au nombre de neutrons magique  $N = 126$ .

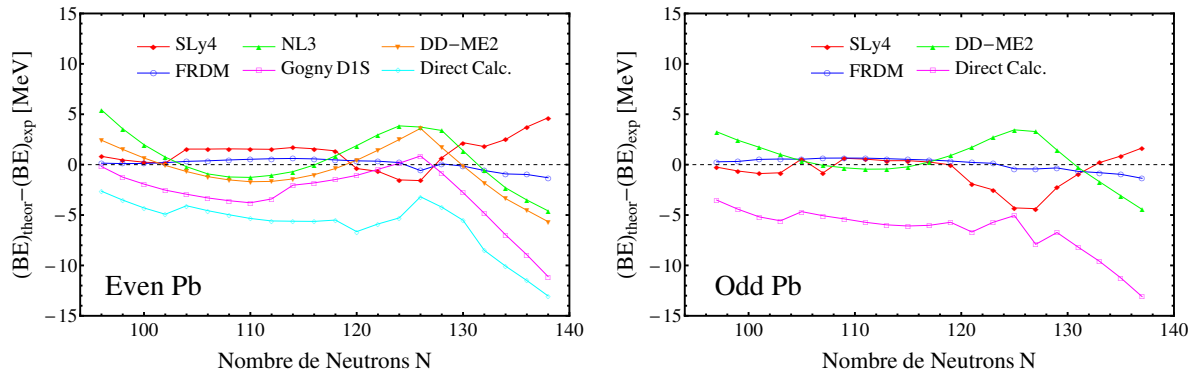
Afin de fournir une vérification supplémentaire de la précision de nos résultats, les différences entre les énergies de liaison totales expérimentales et les résultats obtenus dans ce travail en utilisant l'équation (6.1), sont présentées en fonction du nombre de neutrons  $N$  dans la figure 6.2 pour les isotopes pairs (panneau gauche) et impairs (panneau droit), séparément. Les résultats des autres modèles nucléaires sont également inclus à titre de comparaison. Nous soulignons que cette comparaison est faite seulement pour les isotopes qui ont des données expérimentales disponibles.

**TABLE 6.1** Les énergies de liaison par nucléon des isotopes du *Pb*.

N	This work	Exp	HFB Gogny	RMF	DDME2	Calc direct	FRDM
96	7.6955	7.6909	7.6898	7.7213	7.7045	7.6761	7.6917
97	7.7001	7.7015	-----	-----	7.7197	7.6819	7.7031
98	7.7282	7.7256	7.7187	7.7454	7.7341	7.7061	7.7262
99	7.7306	7.7341	-----	-----	7.7475	7.7097	7.7359
100	7.7577	7.7563	7.7457	7.7672	7.7600	7.7327	7.7570
101	7.7573	7.7621	-----	-----	7.7716	7.7338	7.7650
102	7.7836	7.7827	7.7690	7.7868	7.7823	7.7560	7.7838
103	7.7826	7.7869	-----	-----	7.7923	7.7568	7.7899
104	7.8137	7.8054	7.7896	7.8042	7.8017	7.7834	7.8071
105	7.8114	7.8084	-----	-----	7.8104	7.7835	7.8113
106	7.8331	7.8248	7.8073	7.8199	7.8185	7.8005	7.8269
107	7.8221	7.8265	-----	-----	7.8261	7.7997	7.8299
108	7.8494	7.8411	7.8223	7.8347	7.8332	7.8150	7.8436
109	7.8447	7.8414	-----	-----	7.8398	7.8132	7.8448
110	7.8628	7.8547	7.8350	7.8481	7.8459	7.8269	7.8575
111	7.8567	7.8539	-----	-----	7.8516	7.8243	7.8573
112	7.8733	7.8654	7.8479	7.8599	7.8569	7.8366	7.8685
113	7.8659	7.8639	-----	-----	7.8617	7.8333	7.8670
114	7.8821	7.8734	7.8630	7.8698	7.8661	7.8448	7.8765
115	7.8733	7.8713	-----	-----	7.8702	7.8404	7.8740
116	7.8868	7.8789	7.8697	7.8787	7.8738	7.8504	7.8818
117	7.8770	7.8757	-----	-----	7.8771	7.8455	7.8780
118	7.8886	7.8818	7.8744	7.8862	7.8799	7.8543	7.8842
119	7.8777	7.8778	-----	-----	7.8823	7.8494	7.8796
120	7.8802	7.8821	7.8769	7.8915	7.8843	7.8492	7.8840
121	7.8680	7.8774	-----	-----	7.8859	7.8445	7.8785
122	7.8767	7.8799	7.8776	7.8945	7.8870	7.8511	7.8816
123	7.8621	7.8743	-----	-----	7.8875	7.8464	7.8750
124	7.8680	7.8754	7.8760	7.8940	7.8874	7.8497	7.8764
125	7.8491	7.8699	-----	-----	7.8865	7.8454	7.8679
126	7.8598	7.8675	7.8716	7.8854	7.8848	7.8521	7.8646
127	7.8277	7.8486	-----	-----	7.8643	7.8108	7.8466
128	7.8392	7.8360	7.8320	7.8521	7.8440	7.8159	7.8363
129	7.8063	7.8170	-----	-----	7.8238	7.7851	7.8155
130	7.8146	7.8043	7.7913	7.8108	7.8038	7.7783	7.8036
131	7.7808	7.7852	-----	-----	7.7838	7.7467	7.7820
132	7.7808	7.7724	7.7498	7.7696	7.7639	7.7326	7.7697
133	7.7529	7.7520	-----	-----	7.7441	7.7074	7.7483
134	7.7515	7.7400	7.7078	7.7294	7.7244	7.6934	7.7357
135	7.7229	7.7190	-----	-----	7.7048	7.6672	7.7146
136	7.7231	7.7060	7.6650	7.6899	7.6852	7.6533	7.7015

**TABLE 6.1** Les énergies de liaison par nucléon des isotopes du *Pb*. (suite...)

N	This work	Exp	HFB Gogny	RMF	DDME2	Calc direct	FRDM
137	7.6936	7.6860	----	----	7.6657	7.6262	7.6798
138	7.6932	7.6720	7.6215	7.6511	7.6463	7.6128	7.6661
139	7.6634	----	----	----	7.6269	7.5857	7.6410
140	7.6623	----	7.5777	7.6123	7.6074	7.5722	7.6278
141	7.6313	----	----	----	7.5880	7.5443	7.6078
142	7.6303	----	7.5378	7.5758	7.5686	7.5309	7.5946
143	7.5973	----	----	----	7.5491	7.5019	7.5736
144	7.5964	----	7.4949	7.5438	7.5295	7.4838	7.5602
145	7.5643	----	----	----	7.5099	7.4598	7.5396
146	7.5632	----	7.4590	7.5097	7.4901	7.4463	7.5255
147	7.5305	----	----	----	7.4701	7.4221	7.5048
148	7.5297	----	7.4195	7.4741	7.4499	7.4081	7.4901
149	7.4967	----	----	----	7.4295	7.3840	7.4690
150	7.4955	----	7.3796	7.4370	7.4089	7.3687	7.4536
151	7.4627	----	----	----	7.3881	7.3436	7.4319
152	7.4604	----	7.3373	7.3984	7.3673	7.3281	7.4155
153	7.4274	----	----	----	7.3464	7.3030	7.3920
154	7.4248	----	7.2943	7.3592	7.3255	7.2865	7.3747

**FIGURE 6.2** Différences entre les résultats calculés des énergies de liaison totales et les valeurs expérimentales pour les isotopes pairs (panneau de gauche) et impairs (panneau de droite), en comparaison avec les données obtenues par d'autres modèles théoriques disponibles.

Les écarts quadratiques moyens (rms) entre les résultats calculés dans la présente étude et les données expérimentales sont répertoriés dans les tableaux 6.2 et 6.3 pour les isotopes pairs et impairs, respectivement. Les prédictions des théories FRDM [96] et NL3 [97] ainsi que les calculs HFB basés sur la force de Gogny D1S [93] sont également listés pour comparaison.

Comme on peut le voir à partir des tables 6.2 et 6.3, dans les deux cas des isotopes pairs et impaires, notre travail dépasse en précision tous les autres modèles nucléaires, sauf le FRDM qui est le plus précis. En outre, l'utilisation de notre formule de force d'appariement

**TABLE 6.2** Les écarts quadratiques moyens entre les énergies de liaison calculées des isotopes pairs de *Pb* et les données expérimentales, en comparaison avec d'autres modèles théoriques.

SLy4	Direct Calc.	NL3	FRDM	Gogny D1S	DD-ME2
1.8564	6.4609	2.5795	0.5482	4.0746	2.2670

**TABLE 6.3** Les écarts quadratiques moyens entre les énergies de liaison calculées des isotopes impairs de *Pb* et les données expérimentales, en comparaison avec d'autres modèles théoriques.

SLy4	Direct Calc.	FRDM	DD-ME2
1.7023	6.9293	0.6035	2.0616

proposée ( 6.1) a clairement amélioré la précision des résultats par rapport à ceux obtenus dans les calculs directs.

### 6.3.2 Énergie de séparation de neutrons

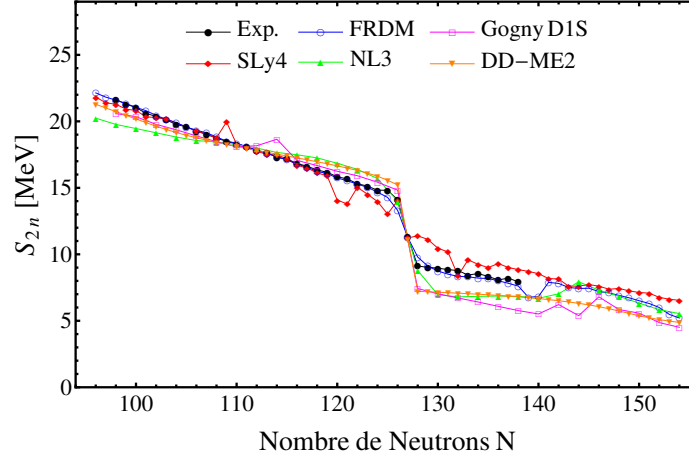
Dans le présent travail, nous avons calculé les énergies de séparation de deux neutrons pour les isotopes de Plomb dans la paramétrisation SLy4 avec la force d'appariement  $V_0^{n,p}$  générée par Eq. (6.1). L'énergie de séparation de deux neutrons est définie par Eq. (4.2).

Notons qu'en utilisant cette équation, toutes les énergies de liaison doivent être entrées avec un signe positif. Les  $S_{2n}$  calculées pour les isotopes de Plomb sont affichées sur la figure 6.3. Les données expérimentales disponibles [92], et les prédictions d'autres modèles nucléaires tels que NL3 [97], FRDM [96], Gogny D1S [93] et DD-ME2 [58] sont également présentées à titre de comparaison.

Comme on peut le voir sur la figure 6.3, les énergies de séparation de deux neutrons deviennent de plus en plus petites à mesure que le nombre de neutrons  $N$  augmente. En outre, une forte baisse est clairement visible à  $N = 126$  à la fois dans les courbes expérimentale et théorique, ce qui indique la fermeture de couche à ce nombre magique. De plus, à l'exception de quelques isotopes de Plomb, nos valeurs calculées sont en bon accord avec les données expérimentales et présentent l'écart quadratique le plus faible par rapport aux résultats de NL3, Gogny D1S et DD-ME2, comme nous pouvons le voir dans le tableau 6.4.

**TABLE 6.4** Les écarts quadratiques moyens des énergies de séparation de deux neutrons calculés pour les isotopes de *Pb* à partir des données expérimentales, en comparaison avec d'autres modèles théoriques.

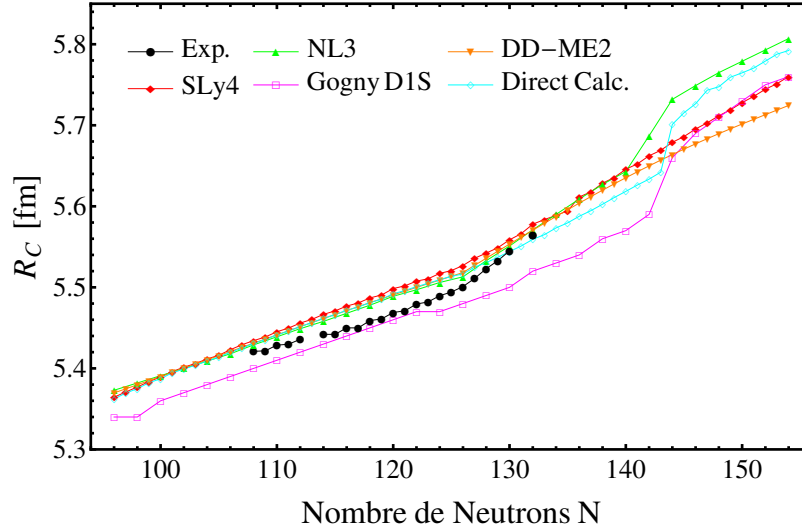
SLy4	NL3	FRDM	Gogny D1S	DD-ME2
0.9679	1.1343	0.2394	1.1948	0.9847



**FIGURE 6.3** Les énergies de séparation de deux neutrons,  $S_{2n}$ , des isotopes de  $Pb$  obtenues à partir des calculs HFB avec Sly4, en comparaison avec les données expérimentales et celles obtenues par FRDM, Gogny D1S, NL3 et DD-ME2.

### 6.3.3 Rayons de neutrons, de protons et de charge

Le rayon quadratique moyen de charge (rms),  $R_c$ , est lié au rayon de proton,  $R_p$ , par l'équation 4.3. Le tableau 6.5 et la figure 6.4 montrent les rayons quadratiques moyens de charge des isotopes de Plomb calculés dans ce travail. À titre de comparaison, elle affiche également les données expérimentales disponibles [98] et les prédictions des autres modèles nucléaires.



**FIGURE 6.4** Les rayons de charge des isotopes de  $Pb$  obtenus à partir des calculs HFB avec SLy4, en comparaison avec les données expérimentales et celles obtenues par FRDM, Gogny D1S, NL3, DD-ME2, et le calcul direct.

**TABLE 6.5** Les rayons de charge des isotopes de *Pb* (en fm).

N	This work	RMF	Exp	DDME2	Direct	Gogny
96	5.364	5.373	----	5.370	5.362	5.340
97	5.371	----	----	5.375	5.369	----
98	5.377	5.382	----	5.380	5.375	5.340
99	5.384	----	----	5.385	5.382	----
100	5.389	5.391	----	5.390	5.387	5.360
101	5.396	----	----	5.395	5.395	----
102	5.401	5.400	----	5.400	5.399	5.370
103	5.406	----	----	5.405	5.404	----
104	5.412	5.409	----	5.411	5.409	5.380
105	5.416	----	----	5.416	5.414	----
106	5.423	5.418	----	5.421	5.420	5.390
107	5.429	----	----	5.426	5.425	----
108	5.434	5.429	5.421	5.431	5.431	5.400
109	5.439	----	5.422	5.436	5.436	----
110	5.445	5.439	5.429	5.441	5.441	5.410
111	5.450	----	5.430	5.446	5.446	----
112	5.456	5.449	5.436	5.451	5.452	5.420
113	5.460	----	----	5.456	5.456	----
114	5.467	5.458	5.442	5.461	5.462	5.430
115	5.471	----	5.442	5.466	5.466	----
116	5.477	5.468	5.450	5.471	5.472	5.440
117	5.481	----	5.450	5.476	5.476	----
118	5.487	5.478	5.459	5.481	5.481	5.450
119	5.491	----	5.461	5.486	5.485	----
120	5.498	5.489	5.469	5.491	5.492	5.460
121	5.502	----	5.471	5.495	5.496	----
122	5.508	5.497	5.479	5.500	5.501	5.470
123	5.511	----	5.482	5.504	5.505	----
124	5.517	5.506	5.490	5.509	5.510	5.470
125	5.521	----	5.494	5.514	5.514	----
126	5.527	5.513	5.501	5.518	5.517	5.480
127	5.536	----	5.511	5.527	5.525	----
128	5.542	5.533	5.523	5.536	5.530	5.490
129	5.549	----	5.533	5.545	5.537	----
130	5.559	5.551	5.545	5.553	5.544	5.500
131	5.566	----	----	5.562	5.551	----
132	5.578	5.571	5.565	5.571	5.559	5.520
133	5.584	----	----	5.579	5.565	----
134	5.589	5.590	----	5.587	5.573	5.530
135	5.594	----	----	5.596	5.580	----
136	5.612	5.609	----	5.604	5.588	5.540



**TABLE 6.5** Les rayons de charge des isotopes de *Pb* (en fm). (suite...)

N	This work	RMF	Exp	DDME2	Direct	Gogny
137	5.618	----	----	5.612	5.595	----
138	5.629	5.627	----	5.620	5.603	5.560
139	5.636	----	----	5.628	5.611	----
140	5.646	5.643	----	5.635	5.618	5.570
141	5.652	----	----	5.643	5.626	----
142	5.662	5.687	----	5.650	5.634	5.590
143	5.669	----	----	5.657	5.642	----
144	5.679	5.732	----	5.664	5.701	5.660
145	5.686	----	----	5.671	5.715	----
146	5.695	5.749	----	5.677	5.727	5.690
147	5.703	----	----	5.683	5.743	----
148	5.712	5.765	----	5.690	5.748	5.710
149	5.719	----	----	5.696	5.759	----
150	5.728	5.779	----	5.702	5.765	5.730
151	5.736	----	----	5.707	5.771	----
152	5.744	5.793	----	5.713	5.779	5.750
153	5.751	----	----	5.719	5.788	----
154	5.760	5.807	----	5.724	5.792	5.760

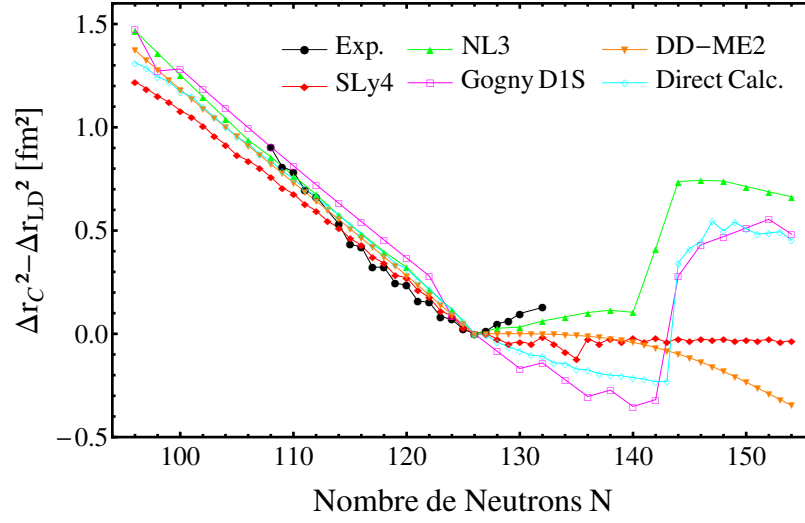
D'après la figure 6.4, nos rayons de charge calculés ainsi que ceux obtenus par les méthodes NL3 et DD-ME2 suivent de près les rayons empiriques. D'autre part, les calculs de Gogny D1S sous-estiment les rayons de charge des isotopes de Pb.

Les rayons de charge obtenus ci-dessus ont été utilisés pour calculer les décalages isotopiques ( $\Delta r_c^2 = r_c^2(A) - r_c^2(208)$ ), où le noyau  $^{208}\text{Pb}$  a été pris comme point de référence.

Pour mettre en évidence la déviation par rapport à la tendance lisse, nous avons reporté dans la figure 6.5 les décalages isotopiques modifiés ( $\Delta r_c^2 - \Delta r_{LD}^2$ ) obtenus en soustrayant un équivalent de la différence de gouttes de liquide  $\Delta r_{LD}^2 = r_{LD}^2(A) - r_{LD}^2(208)$ . Le rayon quadratique moyen du modèle de la goutte de liquide est donné par  $r_{LD}^2 = \frac{3}{5}r_0^2 A^{2/3}$  avec  $r_0 = 1.2$  fm [118, 119].

La figure 6.5 inclut également les données expérimentales disponibles [98] et les prédictions des autres modèles nucléaires. Toutes les données ont été présentées de la même manière.

D'après la figure 6.5, les données expérimentales montrent un pli visible au voisinage de  $^{208}\text{Pb}$ . De plus, les décalages isotopiques calculés dans ce travail reproduisent bien ce pli. Du côté supérieur de  $^{208}\text{Pb}$ , nos résultats ainsi que ceux des autres modèles théoriques montrent une légère divergence par rapport aux données expérimentales et la pente des valeurs théoriques est également différente de celle des valeurs expérimentales. Ceci est



**FIGURE 6.5** Les décalages isotopiques ( $\Delta r_C^2 - \Delta r_{LD}^2$ ) des isotopes de *Pb* obtenus à partir des calculs HFB avec SLy4, en comparaison avec les données expérimentales et celles de FRDM, Gogny D1S, NL3, DD-ME2 et par calcul direct.

dû au fait que la plupart des forces de Skyrme ont été ajustées aux énergies de liaison et aux rayons de charge des noyaux sphériques, et qu'elles rencontrent donc un problème en décrivant les décalages isotopiques des noyaux loin de  $^{208}\text{Pb}$ , comme cela a été démontré sans ambiguïté dans la référence [119].

Dans le tableau 6.6, nous présentons les rayons des neutrons et des protons des isotopes de *Pb*, la figure 6.6 montre les différences entre  $R_n$  et  $R_p$  ( $\Delta R = R_n - R_p$ ), c'est-à-dire la peau de neutrons, des isotopes de Plomb obtenues dans nos calculs en fonction du nombre de neutrons  $N$ . Les calculs HFB basés sur la force D1S de Gogny [93] sont présentés à titre de comparaison ainsi que les résultats du modèle relativiste Hartree-Bogoliubov (RHB) avec l'interaction effective DD-ME2 que nous avons calculée en utilisant le code informatique DIRHBZ [57].

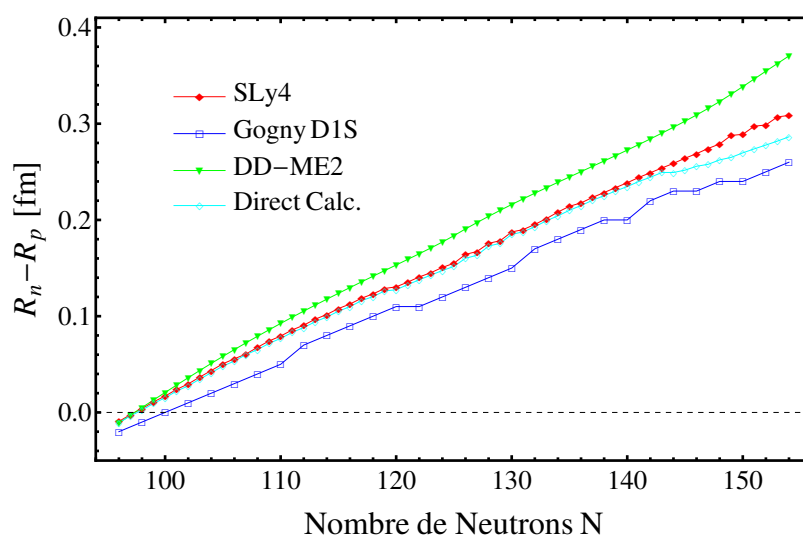
Comme on peut le voir sur la figure 6.6, au voisinage de la ligne de stabilité ( $N \approx Z$ ), les rayons de neutrons et de protons sont approximativement les mêmes. La différence entre  $R_n$  et  $R_p$  ( $\Delta R = R_n - R_p$ ) augmente de façon monotone avec l'augmentation du nombre de neutrons, en faveur du développement d'une peau de neutrons.  $\Delta R$  atteint son maximum pour  $^{236}\text{Pb}$ , où il atteint  $0.308\text{ fm}$  dans notre calcul, et  $0.370\text{ fm}$  et  $0.260\text{ fm}$  dans les modèles nucléaires DD-ME2 et Gogny D1S, respectivement.

TABLE 6.6 Les rayons de neutrons et de protons des isotopes de *Pb* (en fm).

Nombre de neutrons	Rn			Rp		
	This work	DDME2	Calc Direct	This work	DDME2	Calc Direct
96	5.295	5.299	5.292	5.304	5.310	5.302
97	5.309	5.312	5.306	5.311	5.315	5.310
98	5.321	5.325	5.318	5.317	5.320	5.315
99	5.335	5.338	5.332	5.324	5.325	5.322
100	5.347	5.351	5.343	5.330	5.330	5.327
101	5.360	5.364	5.357	5.336	5.335	5.335
102	5.372	5.377	5.367	5.342	5.341	5.339
103	5.383	5.389	5.379	5.347	5.346	5.344
104	5.396	5.402	5.391	5.352	5.351	5.350
105	5.407	5.415	5.403	5.357	5.356	5.354
106	5.420	5.427	5.414	5.364	5.362	5.361
107	5.431	5.439	5.425	5.370	5.367	5.365
108	5.443	5.451	5.437	5.375	5.372	5.372
109	5.454	5.463	5.448	5.380	5.377	5.376
110	5.465	5.475	5.459	5.386	5.382	5.382
111	5.476	5.486	5.470	5.391	5.387	5.387
112	5.488	5.498	5.481	5.397	5.392	5.393
113	5.498	5.509	5.492	5.402	5.397	5.397
114	5.510	5.520	5.502	5.408	5.403	5.403
115	5.520	5.531	5.513	5.412	5.408	5.408
116	5.531	5.542	5.523	5.418	5.413	5.413
117	5.541	5.553	5.533	5.422	5.417	5.417
118	5.552	5.564	5.543	5.428	5.422	5.422
119	5.561	5.575	5.553	5.432	5.427	5.427
120	5.570	5.585	5.561	5.440	5.432	5.433
121	5.579	5.596	5.570	5.443	5.437	5.438
122	5.590	5.606	5.580	5.449	5.441	5.442
123	5.597	5.617	5.589	5.452	5.446	5.446
124	5.610	5.628	5.599	5.459	5.451	5.451
125	5.617	5.639	5.607	5.462	5.455	5.455
126	5.633	5.651	5.618	5.469	5.460	5.458
127	5.645	5.666	5.630	5.478	5.469	5.467
128	5.660	5.682	5.645	5.484	5.478	5.472
129	5.669	5.697	5.655	5.491	5.487	5.479
130	5.688	5.711	5.671	5.501	5.495	5.486
131	5.698	5.726	5.681	5.508	5.504	5.493
132	5.716	5.741	5.694	5.520	5.513	5.501
133	5.727	5.755	5.706	5.526	5.521	5.507
134	5.739	5.769	5.720	5.531	5.530	5.516
135	5.751	5.783	5.732	5.537	5.538	5.522
136	5.772	5.797	5.745	5.554	5.547	5.530

TABLE 6.6 Les rayons de neutrons et de protons des isotopes de *Pb* (en fm). (suite...)

Nombre de neutrons	Rn			Rp		
	This work	DDME2	Calc Direct	This work	DDME2	Calc Direct
137	5.784	5.810	5.758	5.561	5.555	5.537
138	5.800	5.824	5.770	5.571	5.563	5.545
139	5.812	5.837	5.784	5.578	5.571	5.553
140	5.827	5.851	5.796	5.589	5.578	5.561
141	5.840	5.864	5.809	5.595	5.586	5.569
142	5.855	5.877	5.821	5.606	5.593	5.576
143	5.866	5.890	5.834	5.612	5.600	5.585
144	5.881	5.903	5.894	5.622	5.607	5.645
145	5.894	5.916	5.911	5.629	5.614	5.659
146	5.908	5.930	5.926	5.639	5.620	5.670
147	5.921	5.943	5.945	5.647	5.627	5.687
148	5.934	5.956	5.954	5.655	5.633	5.692
149	5.951	5.970	5.969	5.663	5.639	5.704
150	5.961	5.984	5.979	5.672	5.645	5.709
151	5.977	5.998	5.989	5.680	5.651	5.715
152	5.987	6.011	6.001	5.688	5.657	5.724
153	6.003	6.025	6.014	5.695	5.663	5.732
154	6.013	6.039	6.023	5.704	5.668	5.737

FIGURE 6.6 Les épaisseurs de peau de neutrons ( $\Delta R = R_n - R_p$ ) des isotopes de *Pb* obtenus à partir des calculs HFB avec SLy4, en comparaison avec les résultats obtenus par Gogny D1S, DD-ME2, et le calcul direct.

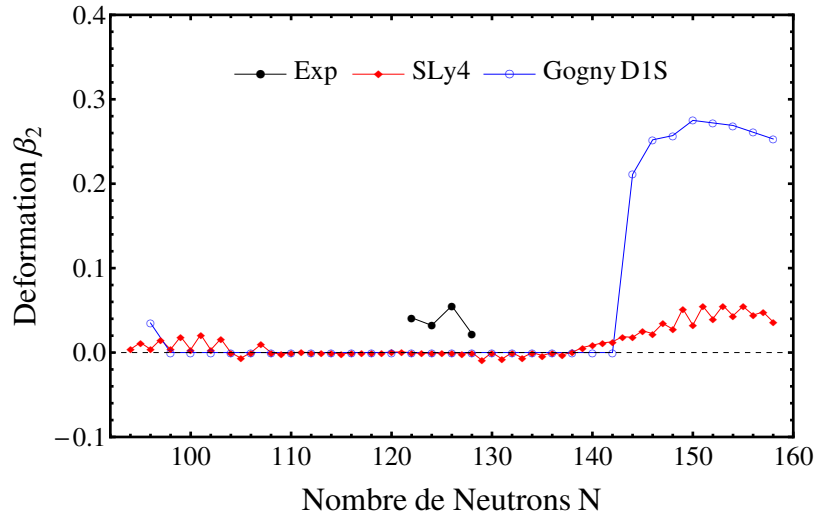
### 6.3.4 Déformation quadrupolaire

Les valeurs de déformation quadrupolaire,  $\beta_2$ , pour les isotopes de Plomb sont affichées dans le tableau 6.7 et présentées sur la figure 6.7. Les résultats de nos calculs sont comparés à la fois aux données expérimentales disponibles [99] et aux résultats des calculs HFB basés sur la force D1S Gogny [93].

TABLE 6.7 Les déformations de l'état fondamental,  $\beta_2$ , des isotopes de *Pb*

N	This work	Exp	Gogny	N	This work	Exp	Gogny
96	0.004	----	0.035	125	-0.001	----	----
97	0.016	----	----	126	0.000	0.055	0.000
98	0.004	----	0.000	127	-0.001	----	----
99	0.019	----	----	128	0.000	0.022	0.000
100	0.003	----	0.000	129	-0.009	----	----
101	0.021	----	----	130	0.000	----	0.000
102	0.003	----	0.000	131	-0.008	----	----
103	0.016	----	----	132	0.000	----	0.000
104	0.000	----	0.000	133	-0.006	----	----
105	-0.007	----	----	134	0.000	----	0.000
106	0.000	----	0.000	135	-0.003	----	----
107	0.010	----	----	136	0.000	----	0.000
108	0.000	----	0.000	137	-0.003	----	----
109	-0.002	----	----	138	0.000	----	0.000
110	0.000	----	0.000	139	0.006	----	----
111	0.000	----	----	140	0.009	----	0.000
112	0.000	----	0.000	141	0.011	----	----
113	0.000	----	----	142	0.013	----	0.000
114	0.000	----	0.000	143	0.019	----	----
115	-0.002	----	----	144	0.018	----	0.211
116	0.000	----	0.000	145	0.026	----	----
117	0.000	----	----	146	0.022	----	0.252
118	0.000	----	0.000	147	0.035	----	----
119	0.000	----	----	148	0.028	----	0.257
120	0.000	----	0.000	149	0.052	----	----
121	0.001	----	----	150	0.033	----	0.275
122	0.000	0.041	0.000	151	0.055	----	----
123	-0.001	----	----	152	0.040	----	0.272
124	0.000	0.032	0.000	153	0.056	----	----

Comme le montre la figure 6.7, nos résultats ainsi que ceux de Gogny D1S prédisent que tous les isotopes de  $N = 94$  jusqu'à  $N = 142$  sont presque sphériques. Pour ceux avec un nombre de neutrons supérieur à  $N = 142$ , la déformation allongée augmente puis se sature



**FIGURE 6.7** Les déformations de l'état fondamental,  $\beta_2$ , des isotopes de *Pb* obtenues à partir des calculs HFB avec SLy4, en comparaison avec les données expérimentales et celles obtenues par Gogny D1S.

à une valeur proche de  $\beta_2 = 0.05$  dans nos calculs et  $\beta_2 = 2.6$  dans les résultats de Gogny D1S.

Les données expérimentales disponibles montrent que les isotopes de Plomb de  $N = 122$  à  $N = 128$  présentent une faible déformation, ce qui signifie que même les noyaux à couches doublement fermées et les noyaux évidemment sphériques  $^{208}\text{Pb}$  ( $N = 126$ ) présentent de "petites déformations". Ceci est dû au fait que les valeurs expérimentales  $\beta_2$  sont habituellement extraites des valeurs expérimentales  $B(E2) \uparrow$  (la probabilité réduite de la transition de l'état fondamental du noyau au premier état excité  $2^+$ ) en utilisant le modèle de Bohr, qui n'est valable que pour les noyaux bien déformés [120].

Il faut mentionner ici que l'ensemble de paramètres NL3 a des difficultés à reproduire les déformations appropriées des isotopes légers de Pb et Hg [59], et donc un ensemble légèrement modifié NL3\* a été introduit par Lalazissis *et al.* [76] en effectuant un nouvel ajustement global des propriétés de l'état fondamental des noyaux sphériques et de la matière nucléaire infinie.

## 6.4 Conclusion

Dans le présent travail, nous avons étudié les propriétés des isotopes pairs et impairs du Plomb,  $^{178-236}\text{Pb}$ , dans le cadre de la théorie HFB avec la force de Skyrme SLy4. Les calculs ont été effectués en utilisant le code informatique HFBTHO (v2.00d), dans lequel la force d'appariement a été donnée par notre nouvelle formule généralisée qui donne, pour chaque nombre de masse  $A$ , la force d'appariement appropriée  $V_0^{n,p}$  pour les neutrons et les

protons au lieu de la valeur par défaut qui est constante quel que soit le nombre de masse. Nos calculs reproduisent très bien les données expérimentales disponibles, y compris les énergies de liaison nucléaire, les énergies de séparation de deux neutrons. Le comportement parabolique de l'énergies de liaison par nucléon  $BE/A$  a été bien reproduit par rapport à la courbe expérimentale. Les rayons de charge calculés sont également cohérents avec les données expérimentales pour la plupart des noyaux. La peau de neutrons, dans nos calculs, atteint 0.308 pour  $^{236}\text{Pb}$ . De plus, nos résultats de la déformation quadrupolaire reproduisent bien les données expérimentales disponibles.

## Chapitre 7

# Propriétés de l'état fondamental des isotopes pairs de Sn et de Pt dans la théorie covariante de la fonctionnelle de la densité

### 7.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous présentons une étude détaillée des chaînes isotopiques pairs de l'étain (Sn,  $Z=50$ ) et du platine (Pt,  $Z=78$ ) pour une large gamme de nombres de neutrons, dans le cadre de la théorie covariante de la fonctionnelle de la densité (CDFT), en utilisant deux des plus récentes fonctionnelles : l'échange de mésons dépendant de la densité DD-ME2 [57, 60] et le couplage ponctuel dépendant de la densité DD-PC1 [57, 58], qui fournissent une description complète et précise des différents états fondamentaux et excités sur l'ensemble de la charte nucléaire [121, 69].

### 7.2 Détails des calculs

Tous les résultats présentés dans ce chapitre ont été obtenus en utilisant le code informatique DIRHB [57] écrit en langage Fortran par T. Nikšić *et al.* Les détails concernant ce code sont présentés en Annexe B.



### 7.3 Étude de la structure nucléaire des isotopes pairs de Sn

Les isotopes de l'étain (Sn,  $Z=50$ ) ont reçu une attention considérable non seulement parce qu'ils ont un nombre magique de protons ( $Z=50$ ), mais aussi pour d'autres raisons, notamment l'intérêt particulier des isotopes de l'étain pour l'astrophysique nucléaire, et sa chaîne isotopique extrêmement longue. De plus, les deux nombres magiques de neutrons,  $N=50$  et  $N=82$ , rendent cette chaîne isotopique particulièrement importante pour tester les déformations et les corrélations de couplage dans un modèle microscopique [122].

Dans ce qui suit, nous présentons les résultats numériques concernant les propriétés de l'état fondamental des isotopes de Sn, telles que l'énergie de liaison, l'énergie de séparation, le gap à deux neutrons, les rayons rms des protons et des neutrons, l'énergie d'appariement et la déformation quadrupolaire. Dans tous nos calculs, nous avons utilisé les deux interactions efficaces dépendant de la densité : DD-ME2 [60] et DD-PC1 [58]. Nos résultats sont comparés aux données expérimentales disponibles et aux prédictions du modèle de champ moyen relativiste (RMF) avec la fonctionnelle NL3 [97].

#### 7.3.1 Énergie de liaison

Les énergies de liaison par nucléon ( $BE/A$ ) pour les isotopes de l'étain,  $^{94-168}\text{Sn}$ , sont présentées sur la figure 7.1 en fonction du nombre de neutrons  $N$ . Les données expérimentales disponibles [92] ainsi que les prédictions du modèle RMF avec la fonctionnelle NL3 [97] sont également présentées pour comparaison. Les valeurs numériques des différentes énergies de liaison par nucléon sont incluses dans le tableau 7.1.

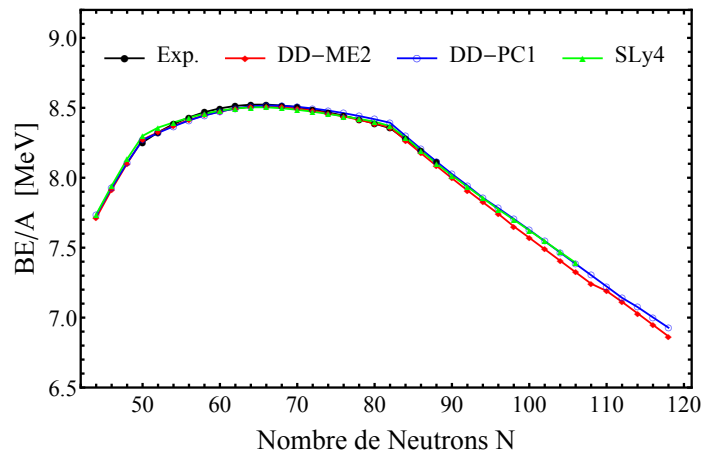


FIGURE 7.1 Les énergies de liaison par nucléon pour les isotopes pairs  $^{94-168}\text{Sn}$ .

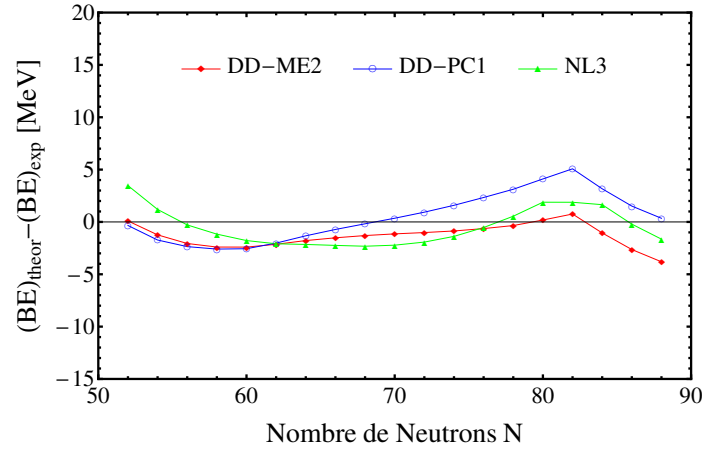
La figure 7.1 montre que les prédictions théoriques reproduisent fidèlement les données expérimentales. Et, qualitativement, toutes les courbes présentent le même comportement.

**TABLE 7.1** Les énergies de liaison par nucléon pour les isotopes pairs  $^{94-168}\text{Sn}$  (en MeV).

N	Exp	DD-ME2	DD-PC1	NL3
44	-----	7.7130	7.7329	7.7379
46	-----	7.9157	7.9285	7.9422
48	-----	8.1016	8.1068	8.1338
50	8.2530	8.2725	8.2691	8.2994
52	8.3244	8.3253	8.3211	8.3584
54	8.3839	8.3720	8.3673	8.3954
56	8.4320	8.4126	8.4098	8.4293
58	8.4690	8.4468	8.4450	8.4582
60	8.4961	8.4742	8.4728	8.4799
62	8.5136	8.4946	8.4956	8.4950
64	8.5225	8.5069	8.5109	8.5037
66	8.5231	8.5100	8.5169	8.5038
68	8.5165	8.5055	8.5150	8.4969
70	8.5045	8.4950	8.5074	8.4860
72	8.4879	8.4796	8.4956	8.4721
74	8.4674	8.4605	8.4802	8.4563
76	8.4435	8.4385	8.4620	8.4393
78	8.4170	8.4143	8.4414	8.4213
80	8.3868	8.3882	8.4184	8.4013
82	8.3549	8.3606	8.3933	8.3691
84	8.2752	8.2673	8.2988	8.2875
86	8.1950	8.1756	8.2061	8.1935
88	8.1130	8.0854	8.1155	8.1011
90	-----	7.9966	8.0271	8.0162
92	-----	7.9098	7.9444	7.9349
94	-----	7.8253	7.8566	7.8539
96	-----	7.7419	7.7827	7.7742
98	-----	7.6522	7.7055	7.6996
100	-----	7.5711	7.6271	7.6236
102	-----	7.4890	7.5466	7.5461
104	-----	7.4064	7.4651	7.4684
106	-----	7.3242	7.3841	7.3920
108	-----	7.2424	7.3035	-----
110	-----	7.1902	7.2228	-----
112	-----	7.1123	7.1413	-----
114	-----	7.0306	7.0757	-----
116	-----	6.9480	7.0014	-----
118	-----	6.8659	6.9279	-----

Afin de montrer dans quelle mesure nos résultats sont exacts, les différences entre les énergies de liaison expérimentales totales et les résultats calculés sont présentées sur la

figure 7.2 en fonction du nombre de neutrons  $N$ . Nous soulignons que cette comparaison est faite uniquement pour les isotopes ayant des données expérimentales disponibles.



**FIGURE 7.2** Différences entre les énergies de liaison totales théoriques et expérimentales pour les isotopes de Sn.

La comparaison entre les résultats calculés et les énergies de liaison totales expérimentales disponibles des isotopes de l'étain est également effectuée par l'écart quadratique moyen (RMS) indiqué dans le tableau 7.2.

**TABLE 7.2** Les écarts rms des énergies de liaison totales des isotopes de l'étain.

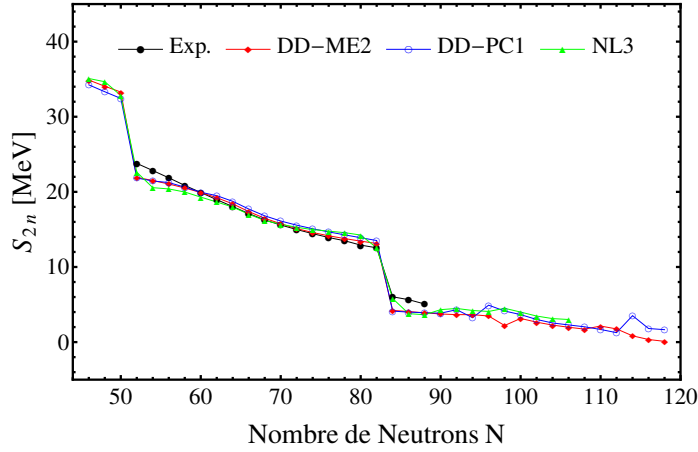
DD-ME2	DD-PC1	NL3
1.7136	2.3180	1.7937

D'après le tableau 7.2, on peut voir que le DD-ME2 dépasse en précision les autres modèles nucléaires DD-PC1 et NL3.

### 7.3.2 Énergie de séparation de deux neutrons

Dans la présente étude, nous avons calculé les énergies de séparation de deux neutrons,  $S_{2n}(N, Z) = BE(N, Z) - BE(N - 2, Z)$ , pour les isotopes de Sn en utilisant les interactions efficaces dépendant de la densité DD-ME2 et DD-PC1.

La figure 7.3 montre les énergies de séparation de deux neutrons  $S_{2n}$  des isotopes pairs de l'étain, en fonction du nombre de neutrons  $N$  à partir de la drip-line des protons jusqu'à la drip-line des neutrons. Nos résultats calculés sont comparés aux données expérimentales disponibles [92]. Les prédictions du modèle RMF(NL3) [97] sont aussi présentées pour comparaison.



**FIGURE 7.3** Les énergies de séparation de deux neutrons  $S_{2n}$ , pour les isotopes  $^{94-168}\text{Sn}$ , obtenues avec DD-ME2 et DD-PC1, et comparées à la force NL3 [97] et aux données expérimentales disponibles [92].

La figure 7.3 montre clairement que les résultats des deux modèles dépendant de la densité ainsi que ceux de NL3 reproduisent assez bien les données expérimentales.  $S_{2n}$  diminue graduellement avec  $N$ , et une forte courbure est clairement visible à  $N = 50$  et  $N = 82$  dans les courbes expérimentales et théoriques, ce qui indique la fermeture des couches à ces nombres magiques de neutrons. De plus, à l'exception de quelques isotopes de l'étain, les valeurs de  $S_{2n}$  obtenues en utilisant DD-ME2 sont en accord avec les données expérimentales et ont l'écart rms le plus faible par rapport aux résultats obtenus avec les fonctionnelles DD-PC1 et NL3, comme nous pouvons le voir dans tableau 7.3.

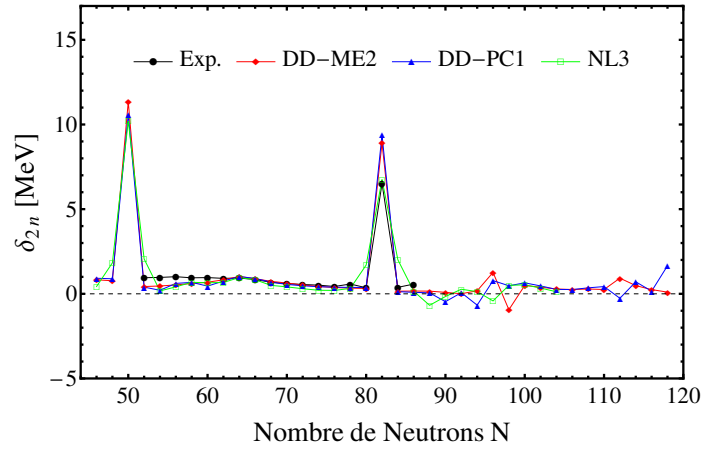
**TABLE 7.3** Les écarts rms des énergies de séparation de deux neutrons des isotopes de l'étain.

DD-ME2	DD-PC1	NL3
0.8667	1.0121	1.0166

Le gap à deux neutrons  $\delta_{2n} = S_{2n}(N, Z) - S_{2n}(N + 2, Z)$ , aussi connu sous le nom de différentielle de  $S_{2n}$ , est défini comme la différence des énergies de séparation de deux nucléons de deux noyaux voisins pairs-pairs. C'est une observable très sensible pour localiser la fermeture de la couche. La figure 7.4 montre le comportement de la différentielle  $S_{2n}$  en fonction du nombre de neutrons  $N$ . Le fort pic dans ( $\delta_{2n}$ ) clairement visible à  $N = 50$  et  $N = 82$  corrobore en outre la fermeture des couches à ces deux nombres magiques de neutrons.

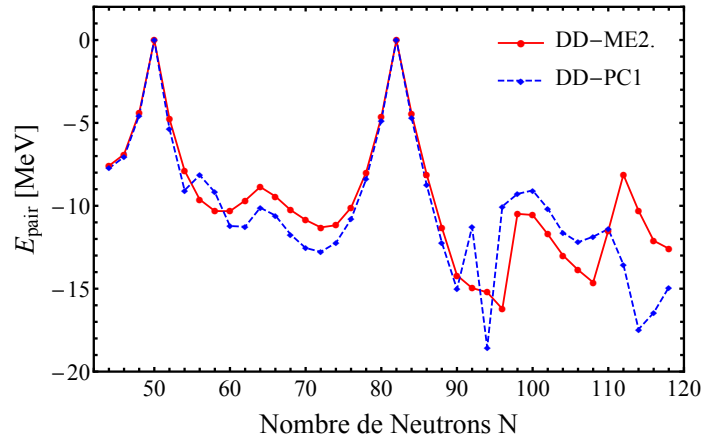
### 7.3.3 Energie d'appariement

Le tableau 7.4 et la figure 7.5 montrent les énergies d'appariement  $E_{pair}$  (somme des contributions des neutrons et des protons) pour les isotopes  $^{94-168}\text{Sn}$  calculées par CDFT



**FIGURE 7.4** Le gap à deux neutrons,  $\delta_{2n}$ , obtenu avec DD-ME2 et DD-PC1 pour les isotopes pairs-pairs de Sn, et comparé à la force NL3 [97] et aux données expérimentales disponibles [92].

avec les interactions efficaces DD-ME2 et DD-PC1.



**FIGURE 7.5** Les énergies d'appariement,  $E_{pair}$ , des isotopes  $^{94-168}\text{Sn}$

Comme on peut le voir sur la figure 7.5, il y a plus ou moins un accord entre les résultats des deux différentes interactions efficaces dépendantes de la densité DD-ME2 et DD-PC1. Dans les deux cas,  $E_{pair}$  s'annule à  $N = 50$  et à  $N = 82$ , ce qui confirme la fermeture des couches à ces deux nombres magiques de neutrons.

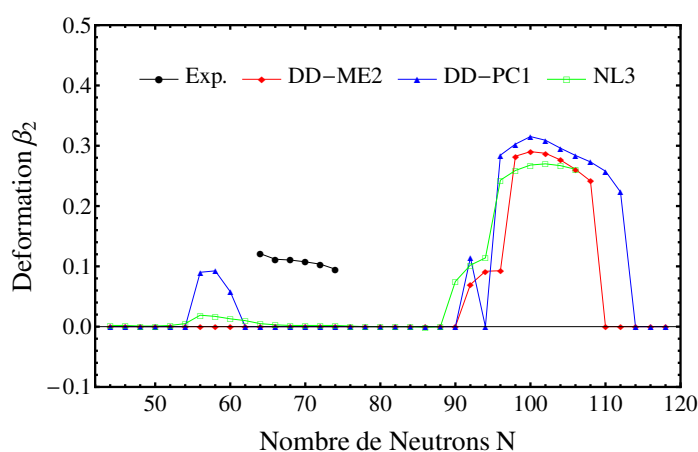
### 7.3.4 Déformation quadrupolaire

Dans la figure 7.6, nous avons tracé le paramètre de déformation quadrupolaire,  $\beta_2$ , pour les isotopes de Sn. Les résultats de nos calculs avec les ensembles de paramètres DD-ME2 et DD-PC1 sont comparés à ceux de RMF(NL3) [97] et aux données expérimentales

**TABLE 7.4** Les énergies d'appariement,  $E_{pair}$ , pour les isotopes  $^{94-168}\text{Sn}$ 

N	DD-ME2	DD-PC1	N	DD-ME2	DD-PC1
44	7.590	7.735	82	0.000	0.000
46	6.895	7.059	84	4.425	4.681
48	4.394	4.546	86	8.109	8.744
50	0.000	0.000	88	11.304	12.213
52	4.754	5.352	90	14.193	15.030
54	7.876	9.066	92	14.961	11.274
56	9.620	8.153	94	15.215	18.552
58	10.316	9.179	96	16.219	10.033
60	10.323	11.220	98	10.486	9.281
62	9.684	11.261	100	10.553	9.073
64	8.861	10.116	102	11.712	10.165
66	9.431	10.583	104	12.986	11.617
68	10.250	11.721	106	13.862	12.194
70	10.854	12.546	108	14.618	11.864
72	11.303	12.775	110	11.501	11.399
74	11.172	12.237	112	8.125	13.546
76	10.114	10.812	114	10.295	17.449
78	7.980	8.396	116	12.105	16.452
80	4.660	4.859	118	12.582	14.922

disponibles [99]. Les valeurs numériques des déformations quadrupolaires sont dressées dans le tableau 7.5.

**FIGURE 7.6** Les paramètres de déformation quadrupolaire,  $\beta_2$ , pour les isotopes de Sn.

Comme le montre la figure 7.6, l'accord entre les différents calculs théoriques, DD-ME2, DD-PC1 et NL3, est assez bon en général. À l'exception de quelques noyaux où la déformation est assez faible, les isotopes de Sn restent fortement sphériques jusqu'à ce que

**TABLE 7.5** Les déformations quadrupolaires,  $\beta_2$ , des isotopes de Sn.

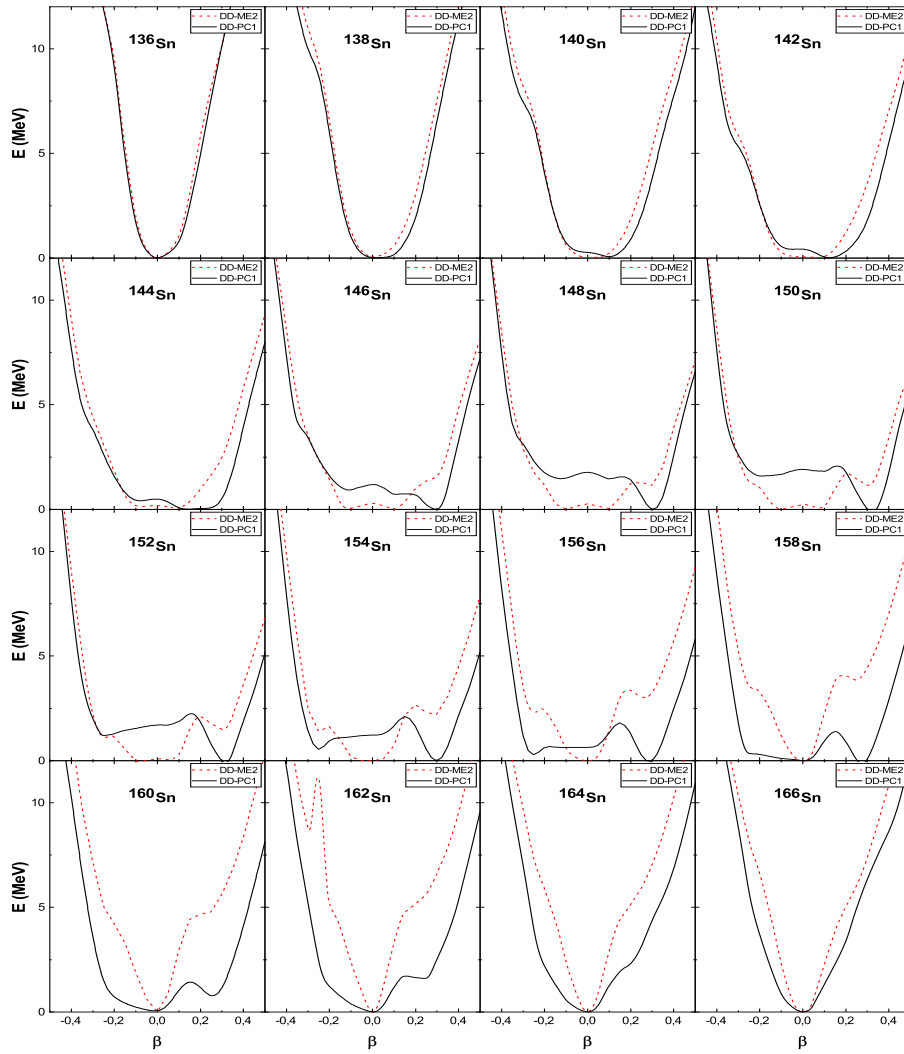
N	Exp	DD-ME2	DD-PC1	NL3
44	-----	0,0000	0,0000	0,0020
46	-----	0,0000	0,0000	0,0020
48	-----	0,0000	0,0000	0,0010
50	-----	0,0000	0,0000	0,0010
52	-----	0,0000	0,0000	0,0020
54	-----	0,0000	0,0000	0,0050
56	-----	0,0000	0,0902	0,0190
58	-----	0,0000	0,0925	0,0170
60	-----	0,0000	0,0580	0,0130
62	-----	0,0000	0,0000	0,0100
64	0.1210	0,0000	0,0000	0,0050
66	0.1118	0,0000	0,0000	0,0030
68	0.1105	0,0000	0,0000	0,0020
70	0.1075	0,0000	0,0000	0,0020
72	0.1036	0,0000	0,0000	0,0020
74	0.0953	0,0000	0,0000	0,0020
76	-----	0,0000	0,0000	0,0010
78	-----	0,0000	0,0000	0,0000
80	-----	0,0000	0,0000	0,0000
82	-----	0,0000	0,0000	0,0000
84	-----	0,0000	0,0000	0,0000
86	-----	0,0000	0,0000	-0,0010
88	-----	0,0000	0,0000	0,0000
90	-----	0,0000	0,0000	0,0750
92	-----	0,0697	0,1143	0,1020
94	-----	0,0919	0,0000	0,1140
96	-----	0,0927	0,2844	0,2430
98	-----	0.2826	0.3027	0.2590
100	-----	0.2903	0.3152	0.2680
102	-----	0.2875	0.3091	0.2700
104	-----	0.2764	0.2960	0.2670
106	-----	0.2609	0.2839	0.2610
108	-----	0.2415	0.2732	-----
110	-----	0.0000	0.2578	-----
112	-----	0.0000	0.2233	-----
114	-----	0.0000	0.0000	-----
116	-----	0.0000	0.0000	-----
118	-----	0.0000	0.0000	-----

N atteint 90. Les noyaux au-dessus de ce nombre de neutrons montrent un changement de forme intéressant. La déformation prolate augmente puis se sature à une valeur proche de  $\beta_2 \approx 0.3$ . Tous les modèles théoriques prédisent une région déformée autour de  $90 < N < 110$

pour les isotopes de Sn. Pour les noyaux au-dessus de  $N=110$ , il y a une transition de la forme déformée à la forme sphérique.

Les données expérimentales disponibles montrent que les isotopes pairs de Sn de  $N = 64$  jusqu'à  $N = 74$  présentent une faible déformation, ceci est dû aux raisons déjà mentionnées dans le paragraphe (6.3.4) du chapitre précédent.

La figure 7.7 montre les courbes d'énergie totale de 16 isotopes de l'étain,  $^{136-166}\text{Sn}$ , en fonctions de  $\beta_2$ , obtenues en utilisant les interactions efficaces dépendant de la densité DD-ME2 et DD-PC1. Cette figure nous donne une idée claire sur l'évolution de la déformation dans cette chaîne isotopique. Les formes prolates correspondent à  $\beta > 0$  tandis que les formes oblates correspondent à  $\beta < 0$ .



**FIGURE 7.7** Les courbes d'énergie totale de 16 isotopes de Sn obtenues dans le cadre de la CDFT, avec les interactions DD-ME2 et DD-PC1, en fonction des paramètres de déformation quadrupolaire,  $\beta_2$ .

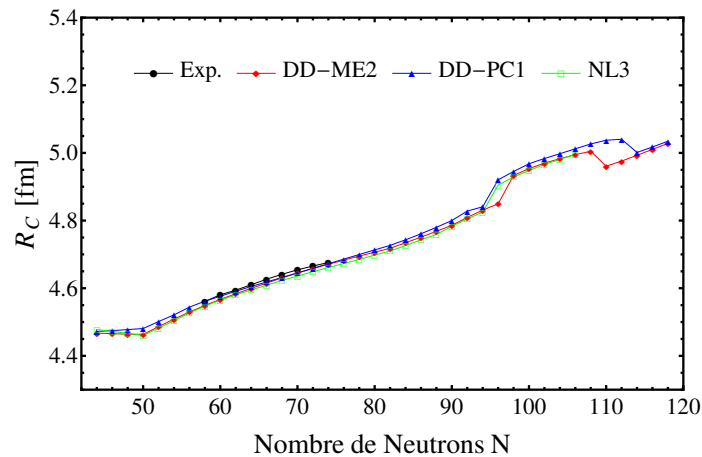


La figure 7.7 montre que les noyaux avec  $A < 140$  sont sphériques. En  $A = 142$ , des déformations très superficielles et dégénérées (minimums oblates et prolates) apparaissent. Les isotopes suivants développent un minimum prolate plus déformé, qui atteint  $\beta \approx 0.3$  pour  $^{150}\text{Sn}$  dans les calculs DD-PC1. Au fur et à mesure que le nombre de masse augmente, les deux minimums disparaissent progressivement jusqu'à  $A = 166$  où nous obtenons un seul minimum net, ce qui confirme la forme sphérique de cet isotope. Les courbes d'énergie totale des isotopes  $^{136}\text{--}^{166}\text{Sn}$  montrées dans cette figure sont en bon accord avec les résultats montrés dans la figure 7.6.

### 7.3.5 Rayons de charge, de protons et de neutrons

Les rayons nucléaires évalués à l'aide de différentes interactions sont présentés dans ce sous-paragraphe. La figure 7.8 et le tableau 7.6 montrent les rayons de charge quadratiques moyens ; tandis que les rayons de neutrons et de protons pour tous les isotopes de l'étain sont affichés dans le tableau 7.7 et présentés dans la figure 7.9 . Le rayon de charge,  $R_c$ , est lié au rayon du proton,  $R_p$ , par l'Eq. (4.3).

Dans la figure 7.8, les rayons de charge calculés dans CDFT avec DD-ME2 et DD-PC1 sont comparés aux données expérimentales disponibles [98] et aux prédictions de RMF(NL3) [97]. L'excellente concordance entre la théorie et l'expérience est évidente. Le petit saut dans  $R_c$  à partir de  $^{146}\text{Sn}$  jusqu'à  $^{162}\text{Sn}$  est dû à l'effet de déformation. Cela devient beaucoup plus clair si nous regardons la figure 7.6 :  $\beta_2$  change, dans le cas de DD-PC1 par exemple, de 0.0 pour  $^{144}\text{Sn}$  à 0.284 pour  $^{146}\text{Sn}$ , et il passe de 0.223 pour  $^{162}\text{Sn}$  à 0.0 pour  $^{164}\text{Sn}$ .



**FIGURE 7.8** Les rayons de charge obtenus par nos calculs DD-ME2 et DD-PC1 et comparés aux données expérimentales disponibles [98] et aux prédictions de RMF(NL3) [97].

TABLE 7.6 Les rayons de charge des isotopes de Sn.

N	Exp	DD-ME2	DD-PC1	N	Exp	DD-ME2	DD-PC1
44	-----	4.467	4.472	82	-----	4.718	4.727
46	-----	4.465	4.475	84	-----	4.734	4.743
48	-----	4.464	4.478	86	-----	4.751	4.761
50	-----	4.463	4.481	88	-----	4.768	4.780
52	-----	4.487	4.501	90	-----	4.786	4.800
54	-----	4.509	4.521	92	-----	4.809	4.828
56	-----	4.530	4.544	94	-----	4.831	4.841
58	4.561	4.549	4.562	96	-----	4.849	4.921
60	4.581	4.567	4.576	98	-----	4.933	4.945
62	4.594	4.584	4.591	100	-----	4.954	4.968
64	4.610	4.600	4.605	102	-----	4.970	4.984
66	4.627	4.615	4.619	104	-----	4.983	4.998
68	4.641	4.631	4.632	106	-----	4.995	5.012
70	4.654	4.645	4.645	108	-----	5.005	5.026
72	4.666	4.658	4.659	110	-----	4.961	5.038
74	4.676	4.671	4.672	112	-----	4.976	5.040
76	-----	4.683	4.686	114	-----	4.993	5.001
78	-----	4.695	4.700	116	-----	5.011	5.018
80	-----	4.707	4.713	118	-----	5.028	5.034

La figure 7.9 montre les rayons de neutrons et de protons des isotopes de l'étain calculés en utilisant DD-ME2 et DD-PC1. Les résultats du modèle RMF(NL3) sont également présentés pour comparaison. Nous avons tracé  $R_n$  et  $R_p$  ensemble dans la même figure afin de voir facilement les différences entre eux.

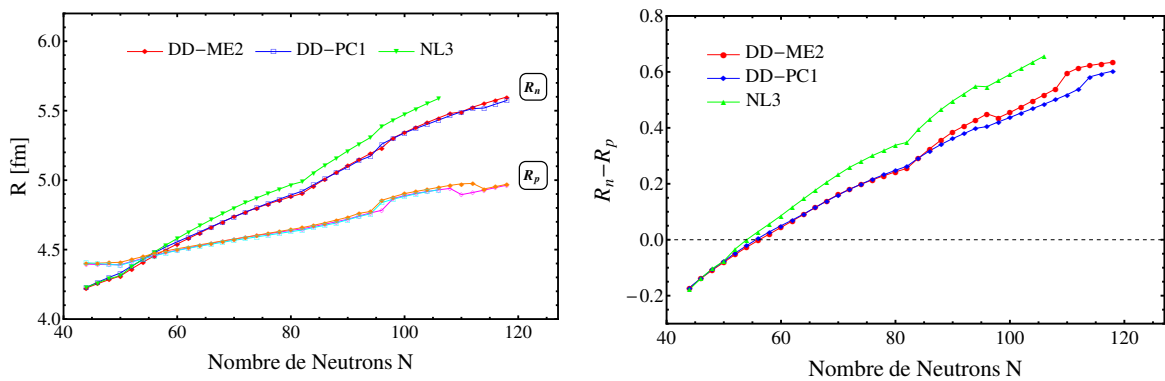


FIGURE 7.9 Les rayons de neutrons et de protons des isotopes de Sn (panneau de gauche) et les épaisseurs de peau de neutrons ( $\Delta R = R_n - R_p$ ) (panneau de droite).

Dans le panneau de gauche de la figure 7.9, nous voyons que les rayons rms de neutrons obtenus en utilisant les interactions efficaces dépendantes de la densité DD-ME2 et DD-PC1

TABLE 7.7 Les rayons de neutrons et de protons des isotopes de Sn.

Nombre de Neutrons	Rn			Rp		
	DD-ME2	DD-PC1	NL3	DD-ME2	DD-PC1	NL3
44	4.223	4.228	4.228	4.395	4.400	4.406
46	4.255	4.265	4.261	4.393	4.403	4.399
48	4.284	4.300	4.291	4.392	4.406	4.394
50	4.310	4.332	4.312	4.391	4.409	4.388
52	4.362	4.382	4.378	4.415	4.430	4.411
54	4.411	4.429	4.433	4.437	4.450	4.433
56	4.456	4.478	4.484	4.458	4.473	4.455
58	4.499	4.520	4.533	4.478	4.491	4.476
60	4.541	4.556	4.580	4.496	4.506	4.494
62	4.581	4.591	4.627	4.513	4.521	4.510
64	4.620	4.628	4.672	4.529	4.535	4.525
66	4.661	4.664	4.716	4.545	4.549	4.539
68	4.700	4.701	4.759	4.561	4.562	4.553
70	4.737	4.736	4.800	4.575	4.576	4.567
72	4.770	4.770	4.838	4.589	4.590	4.579
74	4.800	4.802	4.872	4.602	4.603	4.592
76	4.829	4.834	4.905	4.614	4.617	4.604
78	4.855	4.864	4.936	4.626	4.631	4.617
80	4.881	4.893	4.967	4.638	4.645	4.629
82	4.905	4.921	4.989	4.650	4.658	4.641
84	4.958	4.967	5.053	4.666	4.675	4.659
86	5.009	5.011	5.107	4.683	4.693	4.675
88	5.057	5.054	5.158	4.701	4.713	4.692
90	5.104	5.095	5.211	4.719	4.733	4.715
92	5.149	5.141	5.260	4.742	4.761	4.738
94	5.192	5.172	5.307	4.764	4.774	4.758
96	5.233	5.260	5.386	4.783	4.855	4.839
98	5.304	5.301	5.432	4.868	4.880	4.863
100	5.343	5.340	5.474	4.889	4.903	4.883
102	5.380	5.373	5.514	4.905	4.919	4.901
104	5.415	5.402	5.552	4.918	4.933	4.917
106	5.448	5.433	5.588	4.930	4.948	4.931
108	5.480	5.464	-----	4.941	4.962	-----
110	5.492	5.492	-----	4.896	4.974	-----
112	5.526	5.515	-----	4.911	4.976	-----
114	5.552	5.519	-----	4.929	4.937	-----
116	5.576	5.547	-----	4.946	4.953	-----
118	5.599	5.574	-----	4.964	4.971	-----

sont presque égaux à travers toute la chaîne isotopique, mais les résultats de NL3 sont

surestimés. Les rayons rms de protons des deux formalismes, CDFT(DD-ME2 et DD-PC1) et RMF(NL3), sont presque similaires.

On remarque également de la figure 7.9 (panneau de droite), que la différence entre les rayons des neutrons et des protons ( $\Delta R = R_n - R_p$ ) augmente de façon monotone en augmentant le nombre de neutrons en faveur du développement d'une peau de neutrons, qui atteint 0.6 fm pour  $^{168}\text{Sn}$ .

Il y a aussi quelques anomalies dans les rayons de protons des isotopes de Sn comme on peut le voir dans la figure 7.9. Le petit saut dans  $R_p$  à partir de  $^{146}\text{Sn}$  jusqu'à  $^{162}\text{Sn}$  est dû à l'effet de déformation comme on l'a déjà expliqué dans le cas des rayons de charge.

## 7.4 Propriétés de l'état fondamental des isotopes pairs de Pt

Dans cette partie, on présente les propriétés de l'état fondamental des isotopes de Pt, telles que l'énergie de liaison, l'énergie de séparation, le gap à deux neutrons et la déformation quadrupolaire. Dans tous ces calculs, on a utilisé les deux interactions efficaces dépendant de la densité, DD-ME2 [60] et DD-PC1 [58]. Nos résultats sont comparés avec les données expérimentales disponibles et avec les prédictions du modèle de champ moyen relativiste (RMF) avec la paramétrisation NL3 [97].

### 7.4.1 Énergie de liaison

Les énergies de liaison par nucléon ( $BE/A$ ) pour les isotopes de platine,  $^{160-238}\text{Pt}$ , sont affichées dans le tableau 7.8 et présentées sur la figure 7.10 en fonction du nombre de neutrons  $N$ . Les données expérimentales disponibles [92] ainsi que les prédictions du modèle RMF avec la fonctionnelle NL3 [97] sont également présentées pour comparaison.

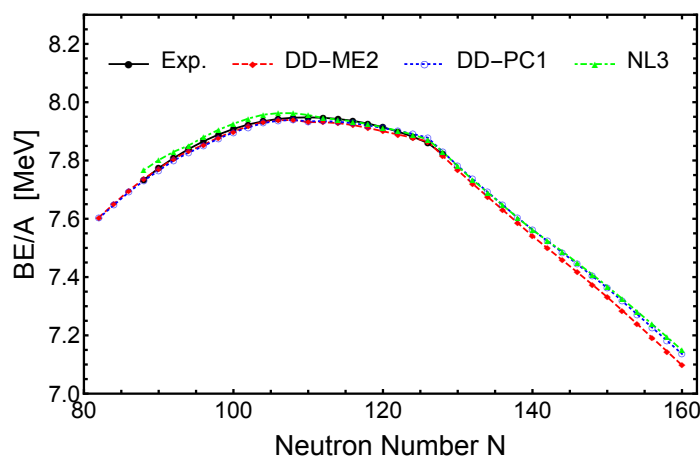


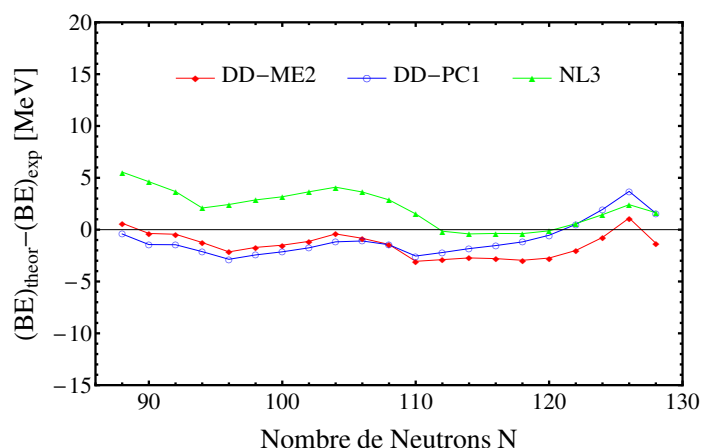
FIGURE 7.10 Les énergies de liaison par nucléon des isotopes pairs  $^{160-238}\text{Pt}$ .

**TABLE 7.8** Les énergies de liaison par nucléon des isotopes pairs  $^{160-238}\text{Pt}$ .

N	Exp	DD-ME2	DD-PC1	NL3
82	-----	7.6048	7.6022	-----
84	-----	7.6510	7.6471	-----
86	-----	7.6966	7.6911	-----
88	7.7330	7.7367	7.7305	7.7664
90	7.7739	7.7717	7.7653	7.8014
92	7.8083	7.8057	7.7997	7.8299
94	7.8392	7.8320	7.8269	7.8513
96	7.8661	7.8538	7.8497	7.8801
98	7.8890	7.8793	7.8751	7.9053
100	7.9083	7.8998	7.8962	7.9261
102	7.9236	7.9173	7.9139	7.9439
104	7.9348	7.9325	7.9283	7.9573
106	7.9426	7.9381	7.9367	7.9623
108	7.9468	7.9391	7.9390	7.9623
110	7.9479	7.9317	7.9344	7.9560
112	7.9466	7.9314	7.9350	7.9458
114	7.9425	7.9283	7.9330	7.9404
116	7.9360	7.9216	7.9280	7.9341
118	7.9265	7.9115	7.9205	7.9246
120	7.9142	7.9003	7.9114	7.9136
122	7.8992	7.8892	7.9017	7.9021
124	7.8816	7.8778	7.8912	7.8887
126	7.8600	7.8655	7.8781	7.8718
128	7.8220	7.8156	7.8297	7.8300
130	-----	7.7666	7.7821	7.7804
132	-----	7.7202	7.7363	7.7332
134	-----	7.6755	7.6920	7.6900
136	-----	7.6310	7.6481	7.6471
138	-----	7.5862	7.6041	7.6037
140	-----	7.5410	7.5626	7.5620
142	-----	7.4990	7.5235	7.5245
144	-----	7.4581	7.4841	7.4882
146	-----	7.4164	7.4441	7.4485
148	-----	7.3743	7.4038	7.4090
150	-----	7.3313	7.3630	7.3683
152	-----	7.2856	7.3177	7.3257
154	-----	7.2390	7.2722	7.2823
156	-----	7.1921	7.2269	7.2384
158	-----	7.1450	7.1818	7.1942
160	-----	7.0976	7.1363	7.1492

D'après la figure 7.10, on remarque que les résultats théoriques reproduisent bien les données expérimentales, et que toutes les courbes présentent le même comportement.

la figure 7.11 montre les différences entre les énergies de liaison expérimentales totales des isotopes pairs du platine et les résultats calculés obtenus dans ce travail en fonction du nombre de neutrons. Cette comparaison est faite uniquement pour les isotopes ayant des données expérimentales disponibles.



**FIGURE 7.11** Différences entre les énergies de liaison totales théoriques et expérimentales pour les isotopes pairs de Pt.

L'écart quadratique moyen (RMS), entre les résultats calculés et les énergies de liaison totales expérimentales disponibles des isotopes de platine, est indiqué dans le tableau 7.9.

**TABLE 7.9** Les écarts rms des énergies de liaison totales des isotopes de platine.

DD-ME2	DD-PC1	NL3
2.003	1.970	2.282

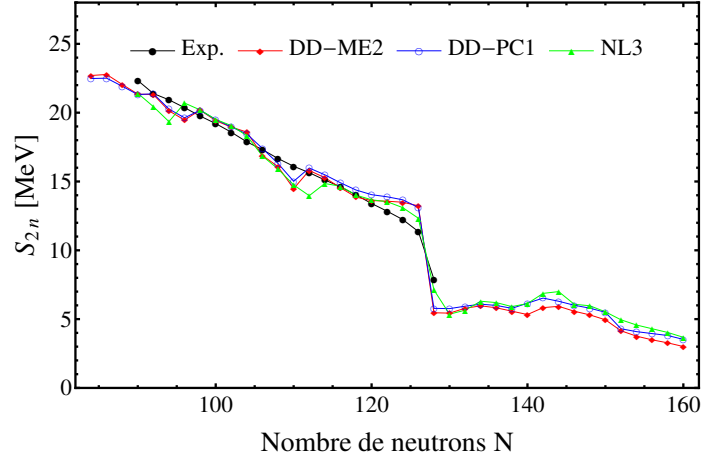
D'après la figure 7.11 et le tableau 7.9, on peut voir que le DD-PC1 dépasse en précision les autres modèles nucléaires DD-ME2 et NL3.

#### 7.4.2 Énergie de séparation de deux neutrons

On a calculé les énergies de séparation de deux neutrons, pour les isotopes de Pt en utilisant les interactions DD-ME2 et DD-PC1.

Les énergies de séparation de deux neutrons  $S_{2n}$  des isotopes pairs du platine, en fonction du nombre de neutrons  $N$  à partir de la drip-line des protons jusqu'à la drip-line des neutrons, sont montrées dans la figure 7.12. Les données expérimentales disponibles [92] ainsi que

les prédictions du modèle RMF avec la paramétrisation NL3 [97] sont également présentées pour comparaison.



**FIGURE 7.12** Les énergies de séparation de deux neutrons  $S_{2n}$ , pour les isotopes  $^{162-238}\text{Pt}$ , obtenues avec DD-ME2 et DD-PC1, et comparées aux prédictions de NL3 [97] et aux données expérimentales disponibles [92].

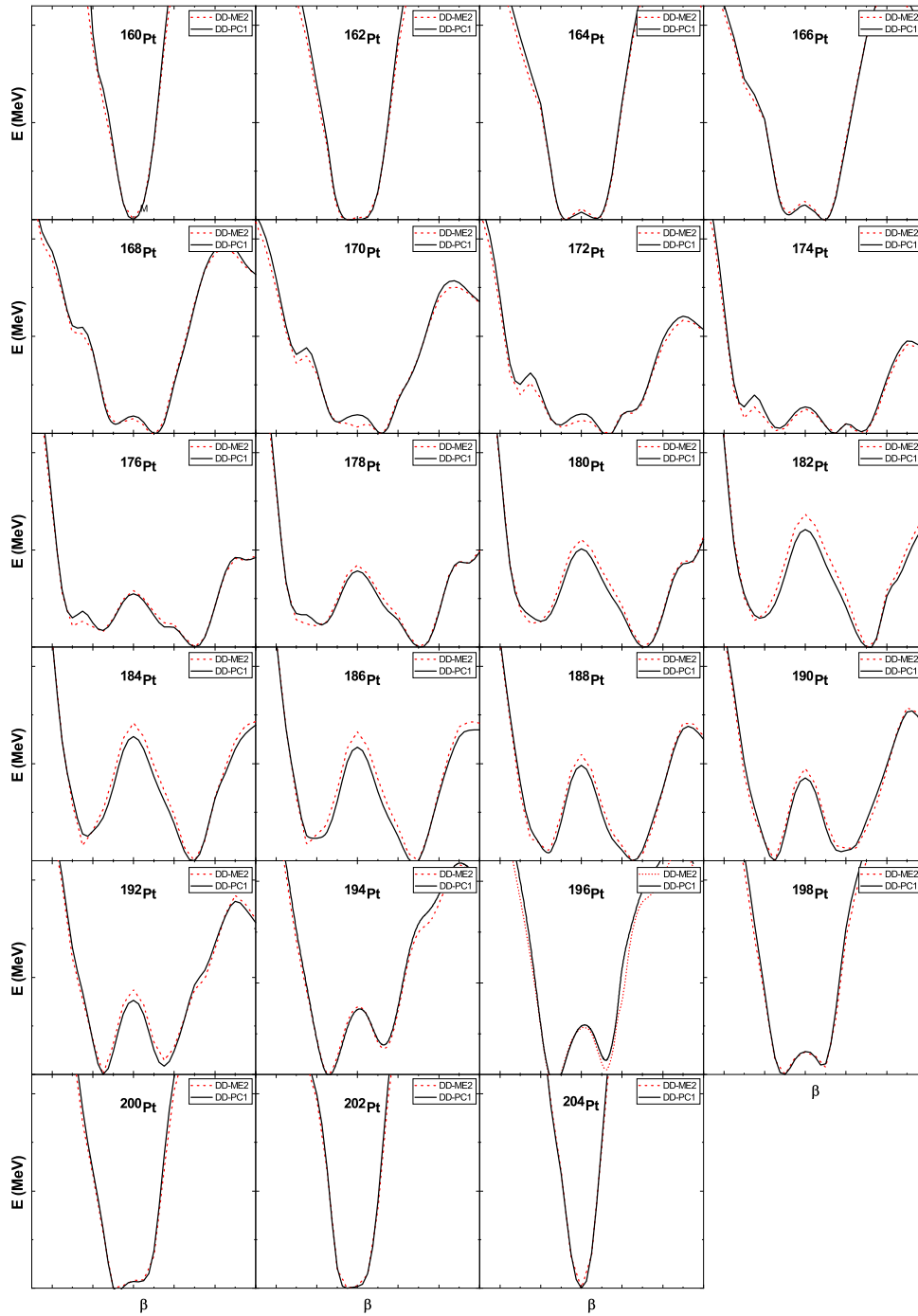
On voit clairement, d'après la figure 7.12, que les résultats des deux modèles dépendant de la densité ainsi que ceux de NL3 reproduisent assez bien les données expérimentales.  $S_{2n}$  devient de plus en plus petite à mesure que le nombre de neutrons  $N$  augmente. En outre, une forte baisse est clairement visible à  $N = 126$  dans les courbes expérimentales et théoriques, ce qui indique la fermeture de couche à ce nombre magique de neutrons.

### 7.4.3 Déformation quadrupolaire

Dans la figure 7.13, nous montrons pour chacun des isotopes de Pt (couvrant l'intervalle de masse  $160 \leq A \leq 204$ ) les courbes d'énergie le long de l'axe de symétrie axial, en fonction du paramètre de déformation  $\beta$ , obtenu dans le cadre de la théorie covariante de la fonctionnelle de la densité en utilisant les interactions efficaces dépendant de la densité DD-ME2 et DD-PC1.

Comme on peut le voir sur la figure 7.13, les interactions DD-PC1 et DD-ME2 fournissent des courbes d'énergie potentielle extrêmement similaires. Les déformations des minimums oblates et prolates sont pratiquement indépendantes de la force.

Les isotopes les plus légers,  $^{160-162}\text{Pt}$ , présentent une forme sphérique. L'isotope suivant,  $^{164}\text{Pt}$ , commence à développer deux minimums dégénérés peu profonds, oblate et prolate, qui correspondent à une petite valeur de  $\beta$ . L'isotope  $^{166}\text{Pt}$  commence à développer un minimum prolate plus prononcé. Les isotopes  $^{168-186}\text{Pt}$  présentent une structure similaire, avec un minimum prolate bien déformé,  $\beta \approx 0.3$  et un minimum local oblate.



**FIGURE 7.13** Les courbes d'énergie totale de  $^{160-204}\text{Pt}$  obtenues dans le cadre de la CDFT avec les interactions DD-ME2 et DD-PC1 en fonction du paramètre de déformation quadrupolaire,  $\beta_2$ .

Une transition de la forme prolate à la forme oblate se produit doucement entre  $^{188}\text{Pt}$  (prolate) et  $^{190}\text{Pt}$  (oblate). Dans  $^{190-200}\text{Pt}$ , deux minimums apparaissent, avec la situation



opposée de ce que se produit dans  $^{168-186}\text{Pt}$ . Au fur et à mesure que le nombre de masse augmente, les deux minimums bien déformés disparaissent progressivement et nous obtenons une surface d'énergie potentielle plate à  $A = 202$ . Au nombre de masse  $A = 204$ , nous obtenons un minimum simple et précis, qui confirme la forme sphérique au nombre de neutrons magique  $N = 126$  ( $A=204$ ).

Ces résultats sont en bon accord avec des travaux récents [123–125] en termes de prédiction de  $^{188}\text{Pt}$  comme critique. Cependant, d'autres calculs donnent des résultats différents qui ne concordent pas avec les nôtres, tels que : Réf. [126] qui prédit que la transition de forme dans les isotopes de Pt dans une approche au-delà du champ moyen avec la force de Skyrme SLy6 se produit de  $A = 186$  à  $188$  au lieu de  $A = 188$  à  $190$  dans nos calculs. Dans la même ligne, les calculs Hartree-Fock+BCS avec les forces de Skyrme Sk3, SGII et SLy4 suggèrent une transition de forme prolata à oblate à  $^{182}\text{Pt}$  [127]. De plus, les calculs triaxiaux D1M-Gogny prédisent une transition de forme de  $A = 184$  à  $186$  [128].

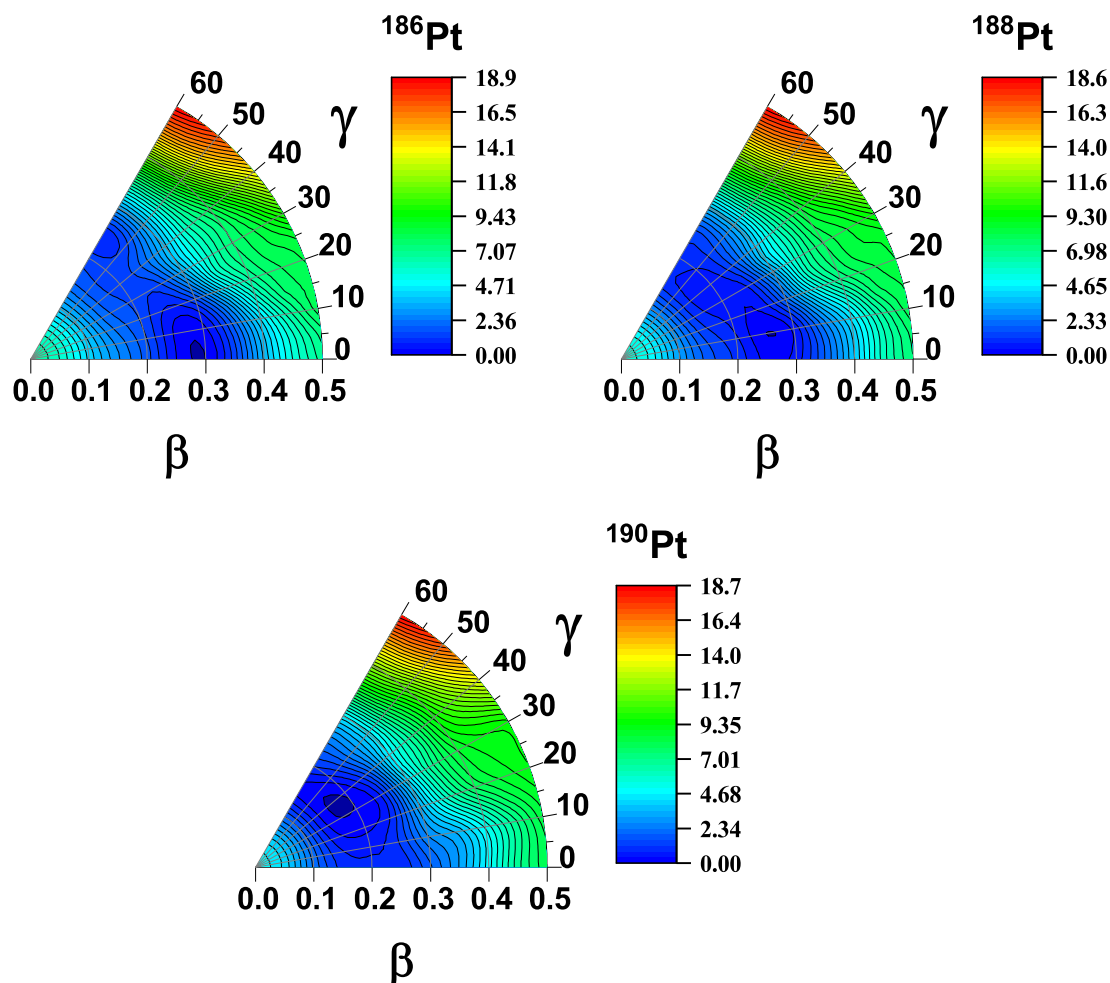
Ces différences entre les méthodes théoriques permettant de prédire l'emplacement exact de la transition de forme ne sont pas surprenantes et sont dues au fait que la transition de forme se produit précisément autour de la région où les énergies des formes concurrentes sont pratiquement dégénérées, et par conséquent, l'emplacement exact de la transition de forme est très sensible aux petits détails du calcul.

Dans la figure 7.14, nous affichons les surfaces d'énergie potentielle des isotopes  $^{186-190}\text{Pt}$  dans le plan  $(\beta, \gamma)$ . Pour étudier la dépendance en  $\gamma$ , un calcul triaxial contraint a été effectué pour tracer l'espace de déformation quadrupolaire défini par  $\beta_2$  et  $\gamma$  en utilisant l'interaction efficace DD-ME2. Les énergies sont normalisées par rapport à l'énergie de liaison du minimum global.

À partir de cette figure, nous pouvons remarquer que l'emplacement du minimum de l'état fondamental passe de la forme presque prolata en  $^{186}\text{Pt}$  à la forme presque oblate en  $^{190}\text{Pt}$ .  $^{188}\text{Pt}$  est légèrement triaxial avec son minimum global à  $(0.25, 10^\circ)$ . Ainsi, la transition de forme est lisse et il n'y a pas de changement brusque dans la forme nucléaire. Ces résultats confirment ceux de la figure 7.13 et sont en parfait accord avec les résultats de la figure 5 de la Réf. [124] obtenus avec Hartree-Fock-Bogoliubov sur la base de l'interaction Gogny-D1S.

#### 7.4.4 Rayons de charge, de proton et de neutron

Dans ce sous-paragraphe, les rayons nucléaires évalués à l'aide des différentes interactions sont présentés. La figure 7.15 montre les rayons de charge quadratiques moyens et la figure 7.16 montre les rayons de neutrons et de protons pour tous les isotopes du platine. Les tableaux 7.10 et 7.11 affichent les valeurs numériques.

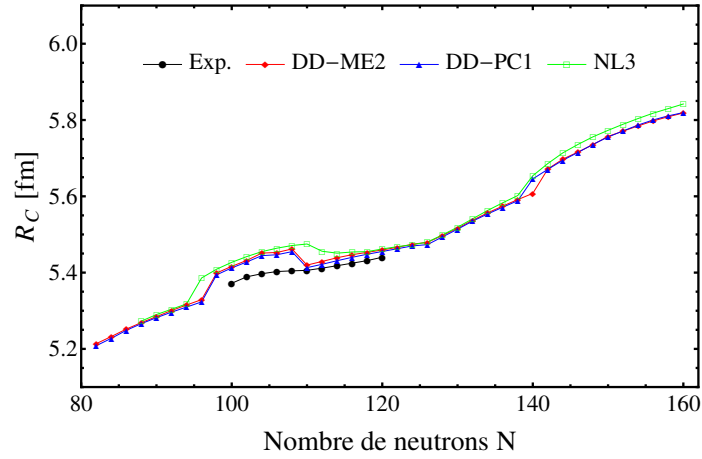


**FIGURE 7.14** Surfaces d'énergie potentielle de  $^{186-190}\text{Pt}$  dans le plan  $(\beta, \gamma)$ , obtenues à partir d'un calcul CDFT avec l'interaction DD-ME2. L'échelle de couleur montrée à droite à l'unité de MeV et est mise à l'échelle de manière à ce que l'état fondamental ait une énergie de zéro MeV.

Les rayons de charge calculés dans CDFT avec DD-ME2 et DD-PC1 sont comparés avec les données expérimentales disponibles [98] et avec les prédictions de RMF (NL3) [97]. Un excellent accord entre la théorie et l'expérience peut être clairement vu sur la figure 7.15.

Dans le panneau de gauche de la figure 7.16, nous voyons que les rayons rms de protons obtenus par les deux formalismes, CDFT(DD-ME2 et DD-PC1) et RMF(NL3), sont presque similaires. En plus, les rayons rms de neutrons obtenus en utilisant les interactions efficaces DD-ME2 et DD-PC1 dépendantes de la densité sont presque égaux tout au long de la chaîne isotopique, mais les résultats de NL3 sont surestimés.

On remarque aussi sur la figure 7.16 (panneau de droite) que la différence entre les rayons rms des neutrons et des protons ( $\Delta R = R_n - R_p$ ) augmente de façon monotone en augmentant le nombre de neutrons en faveur du développement d'une peau neutronique.  $\Delta R$  atteint son

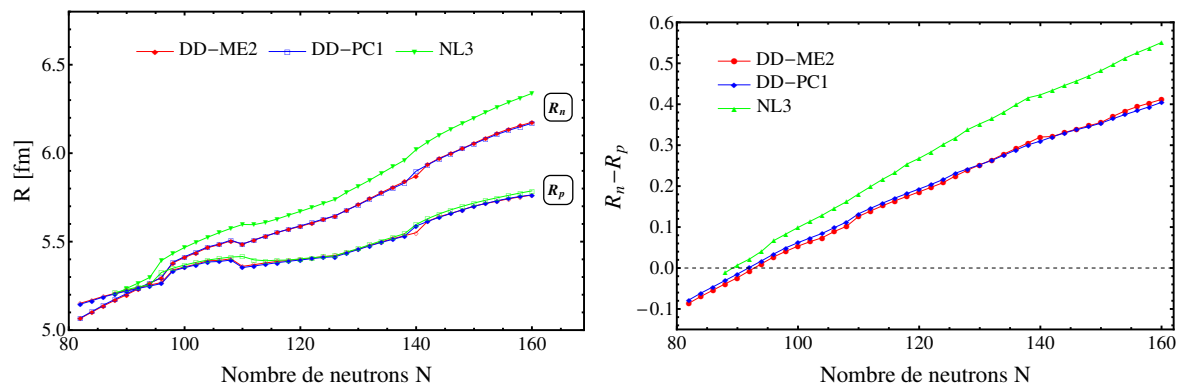


**FIGURE 7.15** Les rayons de charge obtenus par nos calculs DD-ME2 et DD-PC1 et comparés aux données expérimentales disponibles [98] et aux prédictions du RMF(NL3) [97].

**TABLE 7.10** Les rayons de charge des isotopes pairs  $^{160-238}\text{Pt}$ .

N	Exp	DD-ME2	DD-PC1	N	Exp	DD-ME2	DD-PC1
82	-----	5.214	5.208	122	-----	5.466	5.463
84	-----	5.232	5.228	124	-----	5.474	5.470
86	-----	5.252	5.249	126	-----	5.479	5.473
88	-----	5.269	5.266	128	-----	5.497	5.494
90	-----	5.285	5.282	130	-----	5.516	5.514
92	-----	5.301	5.296	132	-----	5.537	5.535
94	-----	5.315	5.310	134	-----	5.557	5.554
96	-----	5.329	5.323	136	-----	5.574	5.571
98	-----	5.399	5.394	138	-----	5.591	5.588
100	5.372	5.416	5.412	140	-----	5.608	5.646
102	5.389	5.432	5.428	142	-----	5.672	5.671
104	5.397	5.451	5.444	144	-----	5.698	5.695
106	5.403	5.453	5.447	146	-----	5.716	5.715
108	5.405	5.462	5.455	148	-----	5.736	5.736
110	5.406	5.420	5.413	150	-----	5.757	5.756
112	5.412	5.429	5.422	152	-----	5.771	5.771
114	5.418	5.439	5.431	154	-----	5.785	5.787
116	5.425	5.447	5.440	156	-----	5.798	5.800
118	5.432	5.453	5.448	158	-----	5.809	5.811
120	5.440	5.459	5.455	160	-----	5.819	5.819

maximum pour  $^{238}\text{Pt}$ , à savoir : 0.41 fm dans le cas des formalismes DD-ME2 et DD-PC1 et 0.55 fm dans les calculs RMF(NL3).



**FIGURE 7.16** Les rayons de neutrons et de protons des isotopes de Pt (panneau de gauche) et les épaisseurs de peau de neutrons ( $\Delta R = R_n - R_p$ ) (panneau de droite).

## 7.5 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons étudié les propriétés de l'état fondamental des isotopes pairs de deux chaînes isotopiques : l'étain  $^{94-168}\text{Sn}$ , et le platine  $^{160-238}\text{Pt}$ , de la drip-line des protons à la drip-line des neutrons, et cela dans le cadre de la théorie covariante de la fonctionnelle de la densité, en utilisant les deux modèles les plus récents : le modèle d'échange de mésons dépendant de la densité DD-ME2 et le modèle de couplage ponctuel dépendant de la densité DD-PC1.

Les résultats de ces calculs, y compris l'énergie de liaison, l'énergie de séparation de deux neutrons ( $S_{2n}$ ), le gap à deux neutrons ( $\delta_{2n}$ ), les rayons rms des protons et des neutrons, l'énergie d'appariement et la déformation quadrupolaire, sont assez bien reproduits et sont en bon accord avec les données expérimentales. Une forte fermeture de couche est observée aux nombres magiques  $N = 50$  et  $N = 82$  dans le cas de la chaîne isotopique de l'étain et au nombre magique  $N=126$  dans le cas de la chaîne isotopique du platine. La peau de neutrons dans notre calcul atteint 0.6 fm pour  $^{168}\text{Sn}$  et 0.41 fm pour  $^{238}\text{Pt}$ , des indications sur la transition de forme pour les deux chaînes isotopiques Sn et de Pt ont été données.

TABLE 7.11 Les rayons de neutrons et de protons des isotopes de Pt.

N	Rn			Rp		
	DD-ME2	DD-PC1	NL3	DD-ME2	DD-PC1	NL3
82	5.066	5.069	-----	5.152	5.147	-----
84	5.102	5.105	-----	5.171	5.166	-----
86	5.137	5.142	-----	5.191	5.187	-----
88	5.169	5.175	5.201	5.208	5.205	5.212
90	5.200	5.206	5.236	5.224	5.221	5.229
92	5.233	5.237	5.266	5.240	5.236	5.244
94	5.265	5.267	5.298	5.254	5.249	5.257
96	5.296	5.297	5.393	5.269	5.263	5.326
98	5.380	5.384	5.433	5.340	5.335	5.350
100	5.410	5.415	5.467	5.357	5.353	5.368
102	5.437	5.442	5.497	5.373	5.369	5.383
104	5.466	5.470	5.525	5.392	5.385	5.396
106	5.483	5.486	5.551	5.394	5.388	5.405
108	5.505	5.508	5.575	5.403	5.396	5.413
110	5.486	5.486	5.597	5.360	5.354	5.416
112	5.509	5.508	5.596	5.370	5.362	5.397
114	5.532	5.531	5.609	5.380	5.372	5.392
116	5.552	5.552	5.628	5.388	5.381	5.395
118	5.569	5.571	5.650	5.394	5.389	5.396
120	5.586	5.589	5.671	5.400	5.396	5.403
122	5.605	5.608	5.693	5.408	5.404	5.409
124	5.624	5.628	5.717	5.416	5.411	5.415
126	5.646	5.646	5.739	5.421	5.415	5.421
128	5.678	5.677	5.779	5.439	5.435	5.441
130	5.710	5.708	5.813	5.458	5.455	5.461
132	5.743	5.740	5.848	5.479	5.477	5.483
134	5.777	5.772	5.886	5.499	5.496	5.505
136	5.809	5.802	5.924	5.517	5.514	5.525
138	5.840	5.832	5.961	5.534	5.531	5.545
140	5.870	5.899	6.020	5.550	5.589	5.597
142	5.936	5.934	6.064	5.615	5.614	5.630
144	5.972	5.968	6.103	5.641	5.638	5.657
146	5.999	5.997	6.137	5.660	5.659	5.680
148	6.027	6.026	6.169	5.680	5.680	5.700
150	6.056	6.053	6.200	5.701	5.700	5.718
152	6.086	6.081	6.231	5.715	5.716	5.734
154	6.113	6.106	6.261	5.729	5.731	5.748
156	6.136	6.129	6.288	5.742	5.745	5.762
158	6.156	6.150	6.313	5.753	5.756	5.775
160	6.175	6.169	6.338	5.763	5.764	5.787

# Conclusions et Perspectives

Dans ce travail de thèse, nous nous sommes intéressés à l'étude des propriétés de l'état fondamental des noyaux loin de la vallée de stabilité en utilisant deux approches différentes, à savoir : la méthode de Hartree-Fock-Bogoliubov et la théorie covariante de la fonctionnelle de la densité. Au cours de nos travaux, nous avons pu reproduire très bien les données expérimentales disponibles, y compris les énergies de liaison nucléaires, les énergies de séparation d'un et de deux neutrons, les rayons de neutrons, de protons et de charge, les gaps d'appariement et les déformations quadrupolaires ; aussi nous avons réussi à prédire les propriétés des noyaux exotiques dont les données expérimentales ne sont pas encore disponibles.

Dans un premier temps, nous avons commencé par présenter les caractéristiques de la structure nucléaire et de la déformation. Puis, nous avons décrit brièvement deux modèles représentant le noyau, à savoir : le modèle de la goutte liquide et le modèle en couches.

La méthode de Hartree-Fock-Bogoliubov a ensuite été présentée en détails, en commençant par son précurseur la méthode de Hartree-Fock, puis celle de BCS qui fait le traitement des effets d'appariement des nucléons et enfin les équations de HFB et leur résolution en utilisant le code HFBTHO v2.00d.

Le cadre de la théorie covariante de la fonctionnelle de la densité a également été présenté. Cette théorie, basée sur le concept de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), est très efficace dans l'analyse de la structure nucléaire, ainsi que dans la description des états fondamentaux et excités à travers toute la charte nucléaire.

Les travaux effectués dans cette thèse sont répartis en deux parties. La première partie consiste en l'étude des propriétés de l'état fondamental de plusieurs chaînes isotopiques par la méthode HFB en utilisant le code informatique HFBTHO (v2.00d) et une formule qu'on a proposée et qui donne, pour chaque isotope de nombre de masse  $A$ , la valeur appropriée de la force d'appariement qu'il faut utiliser dans les calculs afin d'améliorer la précision des résultats et particulièrement pour pouvoir atteindre la région des noyaux exotiques. Les chaînes isotopiques étudiées dans cette première partie sont : premièrement, la chaîne du Néodyme (Nd,  $Z=60$ ) et de ces deux voisins, le Cérium (Ce,  $Z=58$ ) et le Samarium (Sm,

$Z=62$ ); deuxièmement, la chaîne du Molybdène (Mo,  $Z=42$ ) et du Ruthénium (Ru,  $Z=44$ ) et finalement la chaîne du Plomb (Pb,  $Z=82$ ). Dans chacun des trois cas précédents, nous avons proposé une formule simple en fonction du nombre de masse  $A$ , qui donne la valeur de la force d'appariement pour les neutrons et les protons  $V_0^{n,p}$ . Les forces de Skyrme utilisées sont SLy4 et SLy5.

Dans la deuxième partie de cette thèse, nous avons étudié les propriétés de l'état fondamental des isotopes de l'Étain (Sn,  $Z=50$ ) et du Platine (Pt,  $Z=78$ ), dans le cadre de la théorie covariante de la fonctionnelle de la densité (CDFT), en utilisant les deux fonctionnelles DD-ME2 et DD-PC1. Les calculs ont été effectués à l'aide du code informatique DIRHB.

Généralement, nos résultats pour les différentes propriétés de l'état fondamental se sont trouvés en bon accord avec les données expérimentales et avec les résultats des autres approches théoriques incluses à titre de comparaison, tels que le modèle de la gouttelette liquide à portée finie (Finite Range Droplet Model, FRDM), la théorie du champ moyen relativiste (Relativistic Mean Field, RMF) et les calculs de Hartree-Fock-Bogoliubov basés sur l'interaction efficace nucléon-nucléon de Gogny D1S.

Les principales conclusions qui peuvent être tirées de ce travail de thèse sont :

- La formule de la force d'appariement que nous avons proposée a amélioré la précision des résultats des propriétés de l'état fondamental des noyaux connus et nous a permis d'aborder la région des noyaux exotiques où les données expérimentales font défaut.
- Le comportement parabolique des énergies de liaison par nucléon a été bien reproduit par rapport à la courbe expérimentale pour les noyaux connus ce qui nous donne confiance dans nos prédictions pour les noyaux exotiques.
- Un halo de neutrons possible a été observé dans les trois séries d'isotopes *Nd*, *Ce* et *Sm*, ainsi que dans les chaînes de *Mo*, *Ru*, *Pb*, *Pt* et *Sn*.
- Le dernier noyau stable contre l'émission de neutrons s'est révélé être  $^{132}\text{Mo}$  pour les isotopes de *Mo* et  $^{138}\text{Ru}$  pour les isotopes de *Ru*.
- Des indications sur la transition de forme pour les deux chaînes isotopiques de *Mo* et *Ru*, ont été données, ainsi que pour les deux chaînes isotopiques Sn et Pt.
- Une forte fermeture de couche a été observée aux nombres magiques  $N = 50$  et  $N = 82$  pour les isotopes de Sn et au nombre magique  $N=126$  dans le cas de la chaîne isotopique de Pt, ce qui corrobore encore plus nos prévisions théoriques pour les noyaux exotiques.
- La performance de la théorie covariante de la fonctionnelle de la densité a été évaluée sur la base des fonctionnelles de pointe DD-ME2 et DD-PC1. Elle fournit une description précise des propriétés de l'état fondamental et des transitions de forme. Nous avons établi que l'isotope  $^{188}\text{Pb}$  est un point critique dans la transition de phase prolate  $\rightarrow$  oblate, en accord avec certains modèles et contrairement à d'autres.

A la fin, nous aimerions donner un bref aperçu des perspectives prévues de ce travail :

- Tout d'abord, nous envisageons réajuster l'expression de la formule de la force d'appariement  $V_0^{n,p}$ , que nous avons proposée, en utilisant cette fois-ci un plus grand nombre de noyaux, afin d'améliorer la précision de nos résultats.
- Ensuite, nous avons l'intention d'utiliser une formule plus complexe de  $V_0^{n,p}$ , pouvant être obtenue par exemple à partir d'une fonction par morceau du nombre de masse  $A$ , de telle sorte que pour chaque région, nous obtenions la formule la plus appropriée.
- De plus, nous prévoyons effectuer des calculs HFB en utilisant des forces de Skyrme autres que SLy4 et SLy5, et les comparer pour déterminer celle qui est la plus précise.
- Enfin, nous nous proposons d'utiliser la théorie covariante de la fonctionnelle de la densité afin d'étudier les transitions de phase dans d'autres chaînes isotopiques.



## Annexe A

# Programme HFBTHO v2.00d

### A.1 Fichier de données d'entrée

Un exemple du fichier de données d'entrée du programme HFBTHO v2.00d est montré ci-dessous :

```
&HFBTHO_GENERAL
number_of_shells = 10, oscillator_length = -1.0, basis_deformation = 0.0,
proton_number = 24, neutron_number = 26, type_of_calculation = 1 /
&HFBTHO_ITERATIONS
number_iterations = 100, accuracy = 1.E-5, restart_file = -1 /
&HFBTHO_FUNCTIONAL
functional = 'SLY4', add_initial_pairing = F, type_of_coulomb = 2 /
&HFBTHO_PAIRING
user_pairing = F, vpair_n = -300.0, vpair_p = -300.0,
pairing_cutoff = 60.0, pairing_feature = 0.5 /
&HFBTHO_CONSTRAINTS
lambda_values = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8,
lambda_active = 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0,
expectation_values = 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0 /
&HFBTHO_BLOCKING
proton_blocking = 0, 0, 0, 0, 0, 0, neutron_blocking = 0, 0, 0, 0, 0 /
&HFBTHO_PROJECTION
switch_to_THO = 0, projection_is_on = 0,
gauge_points = 1, delta_Z = 0, delta_N = 0 /
&HFBTHO_TEMPERATURE
set_temperature = F, temperature = 0.0 /
&HFBTHO_DEBUG
```

```
number_Gauss = 40, number_Laguerre = 40, number_Legendre = 80,
compatibility_HFODD = F, number_states = 500, force_parity = T,
print_time = 0 /
```

Nous définissons maintenant chacune des données d'entrée utilisées dans ce code :

#### Mot-clé: HFBTHO\_GENERAL

- `number_of_shells = 10` : Le nombre principal des couches d'oscillateur  $N$ . Si la base est sphérique (voir ci-dessous), elle est constituée des états  $N_{\text{états}} = (N+1)(N+2)(N+3)/6$  correspondant aux  $N$  couches pleines. Si la base est déformée, le code recherche le plus bas  $N_{\text{états}}$ , avec des contributions d'intrus possibles allant jusqu'à  $N_{\text{max}} = 90$  couches d'oscillateur harmonique. Par défaut : 10.
- `oscillator_length = -1.0` : La longueur de l'oscillateur en fm, notée  $b_0$ , correspondant à la base sphérique. Elle est liée à la fréquence de l'oscillateur harmonique par  $b_0 = \sqrt{\hbar/m\omega_0}$ . Si la base est déformée, le code utilise la condition de volume constant pour définir les longueurs d'oscillateur  $b_z$  et  $b_{\perp}$  telles que  $b_0^3 = b_z b_{\perp}^2$ . Pour les valeurs négatives de  $b_0$ , le code définit automatiquement  $b_0$  en utilisant  $\hbar\omega_0 = 1,2 \times 41/A^{1/3}$ . Par défaut : -1.0.
- `basis_deformation = 0.0` : La déformation axiale  $\beta_2$  de la base. Seules les déformations axiales quadripolaires sont possibles. Les valeurs négatives sont autorisées et correspondent à une base oblate. Par défaut : 0.0.
- `proton_number = 24` : Nombre de protons pour cette exécution. Seules les valeurs paires sont autorisées, voir point `proton_blocking` sous mot clé HFBTHO\_BLOCKING pour traiter les noyaux de nombre de protons impair. Par défaut : 24.
- `neutron_number = 26` : Nombre de neutrons pour cette exécution. Seules les valeurs paires sont autorisées, voir point `neutron_blocking` sous mot clé HFBTHO\_BLOCKING pour traiter les noyaux de nombre de protons impair. Par défaut : 26.
- `type_of_calculation = 1` : Définit le type de calcul à effectuer pour cette exécution. Si égal à 1, les calculs HFB standard seront effectués. Si égal à -1, le code fera HFB + LN, où la projection approximative de nombre de particules est traitée par la prescription de Lipkin-Nogami (LN) dans l'approximation d'appariement de séniorité suivant [129]. Par défaut : 1.

**Mot-clé:** HFBTHO\_ITERATIONS

• `number_iterations = 100` : Le nombre maximum d'itérations dans la boucle auto-cohérente. Par défaut : 100.

• `accuracy = 1.E-5` : Les itérations sont arrêtées lorsque la norme de la matrice HFB entre deux itérations,  $\max\|\mathcal{H}^{(n)} - \mathcal{H}^{(n-1)}\|$ , est inférieur à `accuracy`, ou le nombre d'itérations a dépassé `number_iterations`. Par défaut : 1.E-5.

• `restart_file = -1` : Cette clé peut prendre les valeurs  $\pm 1, \pm 2, \pm 3$ . Si elle est négative, les calculs seront redémarrés à partir d'une solution existante stockée dans un fichier binaire compatible HFBTHO. Le nom de ce fichier prendra toujours la forme `[shape][neutron_number]_[proton_number].[extension]`, où `[shape]` est 's' pour la valeur  $\pm 1$ , 'p' pour la valeur  $\pm 2$  et 'o' pour la valeur  $\pm 3$ , et `[extension]` est soit 'hel' pour les calculs HO standard ou 'tel' pour les calculs THO. Si la valeur de la clé est positive, les calculs seront repartis de zéro en résolvant l'équation de Schrödinger pour un potentiel Woods-Saxon avec (éventuellement) une déformation axiale  $\beta_2$  définie par la valeur de la contrainte sur  $Q_2$ , voir ci-dessous. Par défaut : -1.

**Mot-clé:** HFBTHO\_FUNCTIONAL

• `functional = 'SLY4'` : Cette clé avec 4 lettres indique la fonctionnelle de Skyrme à utiliser. Les valeurs possibles sont : 'SIII', 'SKM\*', 'SKP', 'SLY4', 'SLY5', 'SLY6', 'SLY7', 'SKI3', 'SKO', 'SKX', 'HFB9', 'UNEO', 'UNE1'. Par défaut : 'SLY4'.

• `add_initial_pairing = F` : En mode redémarrage (voir `restart_file`), cette variable booléenne décide si un petit nombre sera ajouté à tous les éléments de la matrice d'appariement. Cette option peut être utile pour s'assurer que les corrélations d'appariement restent non nulles même lors du redémarrage à partir d'un noyau où elles se sont effondrées, comme un noyau doublement magique. Par défaut : F.

• `type_of_coulomb = 2` : Choisit comment le potentiel de Coulomb est traité. Si 0, les termes direct et d'échange sont négligés. Si 1, seul le potentiel de Coulomb direct est inclus dans le calcul. Si 2, les deux potentiels de Coulomb direct et d'échange sont inclus, le terme d'échange étant traité dans l'approximation de Slater. Par défaut : 2.

**Mot-clé:** HFBTHO\_PAIRING

- `user_pairing = T` : Lorsque ce mot clé est défini sur T, certaines caractéristiques de l'interaction d'appariement peuvent être définies par l'utilisateur. Il est toujours supposé que la force d'appariement se lit

$$V_{\text{pair}}^{n,p}(\mathbf{r}) = V_0^{n,p} \left( 1 - \alpha \frac{\rho(\mathbf{r})}{\rho_c} \right) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (\text{A.1})$$

Les paramètres qui peuvent être ajustés sont la valeur de la force d'appariement pour les protons et les neutrons  $V_0^{n,p}$  (qui peuvent être différentes), les seuils d'énergie définissant les quasi-particules (q.p.) entrant dans le calcul des densités, et le type de force d'appariement défini par le paramètre  $\alpha$ . Lorsque ce mot-clé est défini sur F, une force d'appariement prédéfinie est utilisée pour chaque fonctionnelle de Skyrme. Par défaut : F.

- `vpair_n = -300.0` : La valeur de la force d'appariement (en MeV) pour les neutrons  $V_0^n$  dans l'équation (A.1). Valeur par défaut : dépend de la force de Skyrme.
- `vpair_p = -300.0` : La valeur de la force d'appariement (en MeV) pour les protons  $V_0^p$  dans l'équation (A.1). Valeur par défaut : dépend de la force de Skyrme.
- `pairing_cutoff = 60.0` : Le seuil d'énergie (en MeV) dans l'espace des q.p. : tous les q.p. d'énergie inférieure au seuil sont pris en compte dans le calcul des densités. Par défaut : 60.0 MeV.
- `pairing_feature = 0.5` : Le facteur  $\alpha$  dans l'équation (A.1). Ce paramètre permet de régler les propriétés de la force d'appariement : si égal à 0, la force d'appariement a un caractère de volume pur et ne dépend pas de la densité isoscalaire; si mis à 1, la force d'appariement est seulement active à la surface, puisque à l'intérieur,  $\rho(\mathbf{r}) \approx \rho_c$ ; s'il est mis à 0.5, la force d'appariement a des caractéristiques de volume-surface mélangées. Seules les valeurs comprises entre 0 et 1 sont possibles. Par défaut : 0.5.

**Mot-clé:** HFBTHO\_CONSTRAINTS

- `lambda_values = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8` : Cette série de 8 entiers définit la multipolarité des contraintes de moment multipolaires. C'est seulement informatif et n'est pas destiné à être changé.
- `lambda_active = 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0` : Cette ligne définit les opérateurs des moments multipolaires  $\hat{Q}_l$ , pour  $l = 1, \dots, 8$ , qui seront utilisés comme contraintes. Lorsqu'il est égale à 0, le multipôle correspondant n'est pas utilisé comme contrainte. Lorsqu'il est égale à 1, il est utilisé, et le

calcul HFB contraint résultant est initialisé à partir de la diagonalisation du potentiel Woods-Saxon avec les déformations de base. L'utilisateur peut également mettre cette clé à -1, ce qui déclenche le mode de démarrage : le code effectue d'abord jusqu'à 10 itérations avec les contraintes spécifiées par le mot-clé `expectation_values` ci-dessous, puis libère toutes les contraintes pour atteindre la solution non contrainte la plus proche. Par défaut : (/ 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0 /) (calculs non contraints).

- `expectation_values = 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0` : Cette ligne complète la précédente en spécifiant la valeur de la contrainte pour chaque multipolarité  $l$ . Les unités pour le moment multipolaire de l'ordre  $l$  sont  $10^l \times \text{fm}^l$ . Exemple : Pour obtenir une valeur de contrainte de  $Q_3 = 5 \text{ b}^{3/2} = 5000 \text{ fm}^3$ , le troisième numéro doit être réglé à 5.0. Par défaut : (/ 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0 /).

#### **Mot-clé:** HFBTHO\_BLOCKING

- `proton_blocking = 0, 0, 0, 0, 0` : Ce groupe de 5 entiers définit la configuration de blocage pour les protons. Ça prend la forme  $2\Omega, \pi, N, n_z, n_r$ , où  $[N, n_z, n_r]\Omega^\pi$  est le label traditionnel de Nilsson. Rappelons qu'avec la symétrie de renversement du temps, les états  $+\Omega$  et  $-\Omega$  sont dégénérés, et HFBTHO considère seulement les états avec des valeurs positives de  $\Omega$  par défaut : le signe de  $2\Omega$  donné ci-dessus n'est pas lié à la valeur réelle de  $\Omega$ , mais au noyau dans lequel le blocage est effectué. Plus précisément,

- si  $2\Omega = 0$ , le groupe entier est ignoré (pas de blocage).
- si  $2\Omega > 0$ , le blocage est effectué dans le noyau avec  $Z + 1$  protons, où  $Z$  est la valeur donnée par le drapeau `proton_number`. En pratique, cela signifie que la solution HFB résultante correspond au noyau  $(Z + 1, N)$ .
- si  $2\Omega < 0$ , le blocage est effectué dans le noyau avec  $Z - 1$  protons, où  $Z$  est la valeur donnée par l'indicateur `proton_number`. En pratique, cela signifie que la solution HFB correspond à  $(Z - 1, N)$  noyau.

De plus, l'utilisateur peut demander que toutes les configurations de blocage à 2 MeV du niveau de Fermi dans le noyau pair-pair soient calculées. Cette automatisation est activée en réglant la parité  $\pi$  sur 0 au lieu de  $\pm 1$ . Par exemple, la ligne 1, 0, 0, 0, 0 calculerait toutes les configurations de blocage dans le noyau  $(Z + 1, N)$ , tandis que la ligne -7, -1, 3, 0, 3 donnerait la configuration  $[303]7/2^-$  dans le noyau  $(Z - 1, N)$ . Se reporter aux exemples inclus dans le programme pour une application pratique. Par défaut : (/ 0, 0, 0, 0, 0 /).

- `neutron_blocking = 0, 0, 0, 0, 0` : Ce groupe de 5 entiers définit la configuration de blocage pour les neutrons. Il obéit aux mêmes règles que pour les protons. Par défaut : (/ 0, 0, 0,

0, 0 /).

**Mot-clé:** HFBTHO\_PROJECTION

- `switch_to_THO = 0` : Ce commutateur contrôle l'utilisation de la base de l'oscillateur harmonique transformé. Si égal à 0, alors la base HO traditionnelle est utilisée ; s'il est égal à -1, alors le code effectue d'abord un calcul dans la base HO avant de redémarrer automatiquement le calcul dans la base THO après que la transformation d'échelle locale a été déterminée ; Si égal à 1, le code exécute le calcul uniquement sur la base THO. Notez que l'utilisation de l'option THO nécessite une base assez grande, typiquement avec au moins  $N_{\max} = 20$ . Par défaut : 0.

- `projection_is_on = 0` : La projection du nombre de particules (après variation) est activée en commutant cet entier à 1. Par défaut : 0.

- `gauge_points = 1` : La mise en œuvre de la projection du nombre de particules est basée sur la discrétisation de l'intervalle d'intégration sur l'angle de la jauge. Le nombre de points de jauge est donné ici. Par défaut : 1.

- `delta_Z = 0` : Si la projection de particules est activée, les résultats HFB seront projetés sur  $Z + \delta Z$ , où  $Z$  est le nombre réel de protons dans le noyau et  $\delta Z$  est spécifié ici. Par défaut : 0

- `delta_N = 0` : Si la projection de particules est activée, les résultats HFB seront projetés sur  $N + \delta N$ , où  $N$  est le nombre réel de neutrons dans le noyau et  $\delta N$  est spécifié ici. Par défaut : 0

**Mot-clé:** HFBTHO\_TEMPERATURE

- `set_temperature = F` : Pour les calculs HFB à température finie, `set_temperature` doit être défini sur T. Par défaut : F.

- `temperature = 0.0` : Dans les calculs HFB à température finie, la valeur de la température nucléaire est donnée ici, en MeV. Si `set_temperature = F`, mais la température nucléaire est positive, le code écrase l'indicateur `set_temperature`. Par défaut : 0.0.

**Mot-clé:** HFBTHO\_DEBUG

- `number_Gauss = 40` : Nombre de points d'intégration de Gauss-Hermite pour les intégrations le long de l'axe  $z$  (axe d'élongation). Valeur par défaut : 40 (parité conservée), 80 (parité brisée).
- `number_Laguerre = 40` : Nombre de points d'intégration de Gauss-Laguerre pour les intégrations le long de l'axe perpendiculaire. Par défaut : 40.
- `number_Legendre = 80` : Nombre de points d'intégration de Gauss-Legendre pour le calcul du potentiel de Coulomb direct, voir la section 3.8 de [95] et la section 3.6 de [56]. Si ce nombre est négatif, la méthode de substitution laplacienne est utilisée à la place de la méthode de substitution gaussienne, voir [130]. Par défaut : 80.
- `compatibility_HFODD = F` : Ce booléen applique la même base HO que dans HFODD. En pratique, il n'a de sens que dans le cas des noyaux déformés. Par défaut : F.
- `number_states = 500` : Lorsque la compatibilité avec les conventions HFODD est appliquée, ce paramètre donne le nombre total d'états dans la base. Par défaut : inactif.
- `force_parity = T` : Ce booléen impose la conservation ou la brisure de la parité en fonction de la multipolarité des moments multipolaires utilisés comme contraintes. Par défaut : T.
- `print_time = 0` : Si 1, le temps pris par certaines routines majeures sera imprimé dans la sortie. Par défaut : 0

## A.2 Structure du code

Le programme HFBTHO se présente sous la forme de deux fichiers :

- `hfbtho_200d.f90` - Fichier principal contenant le solveur indépendant HFBTHO. Ce fichier contient plusieurs modules Fortran, voir ci-dessous.
- `main_200d.f90` - Programme d'appel.

Le langage de programmation de la plupart du code est Fortran 95, tandis que le code hérité est encore écrit, en partie ou en totalité, dans Fortran 90 et Fortran 77. Le code HFBTHO nécessite une implémentation des bibliothèques BLAS et LAPACK pour fonctionner correctement. Le parallélisme de la mémoire partagée est disponible.

Le fichier principal `hfbtho_200d.f90` contient les modules Fortran suivants :

- `HFBTHO_VERSION` : module d'information contenant uniquement le journal des modifications ;
- `HFBTHO_utilities` : définition de nombres entiers et de nombres réels ;

- `linear_algebra` : collection de routines diverses traitant de l'interpolation ;
- `UNEDF` : module calculant la densité d'énergie de type Skyrme et les champs de Hartree-Fock correspondants à une densité donnée  $\rho$  ;
- `HFBTHO` : module stockant toutes les variables publiques utilisées dans le code ;
- `HFBTHO_gauss` : collection de routines et de fonctions traitant des maillages d'intégration
- `HFBTHO_THO` : module en charge de la transformation THO ;
- `EllipticIntegral` : module qui fournit l'intégrale elliptique du deuxième type ;
- `bessik` : module qui fournit la fonction de Bessel modifiée d'ordre entier.

Le reste des routines ne sont pas empilés dans un module.

### A.3 Exécution du code

Le programme est livré avec un Makefile qui est prédéfini pour un certain nombre de compilateurs Fortran. L'utilisateur doit choisir le compilateur et définir le chemin pour les bibliothèques BLAS et LAPACK. Pour compiler, on tape : "make".

En supposant un exécutable nommé `main` et un système Linux, l'exécution est démarrée en tapant

```
“./main < /dev/null >& main.out ”
```

Le programme va essayer de lire le fichier nommé `hfbtho_NAMELIST.dat` dans le répertoire courant. L'utilisateur est responsable de s'assurer que ce fichier est présent et lisible. Le code générera automatiquement un fichier binaire de la forme

`[shape][neutron_number]_[proton_number].[extension]` où :

- `[shape]` est l'une des lettres 's', 'p', 'o', qui fait respectivement référence à une forme sphérique, allongée ou oblate. Le choix de cette lettre est laissé à l'utilisateur par le biais du mot-clé `restart_mode`. Ce format reste pour la rétrocompatibilité ;
- `[neutron_number]` est un nombre entier de 3 chiffres donnant le nombre de neutrons (remplissage de gauche avec zéro si nécessaire) ;
- `[proton_number]` est un nombre entier de 3 chiffres donnant le nombre de protons (remplissage de gauche avec zéro si nécessaire) ;
- `[extension]` est soit 'hel' (exécution de HO normal), soit 'tel' (exécution de THO).



## **Annexe B**

# **Structure du paquet de programmes DIRHB**

Le paquet DIRHB comprend trois codes informatiques Fortran pour le calcul des propriétés d'état fondamental des noyaux atomiques pairs, dans le cadre des modèles de champ moyen autocohérents relativistes. Chaque code correspond à un choix particulier de symétrie spatiale : les codes DIRHBS, DIRHBZ et DIRHBT sont utilisés pour calculer les noyaux à symétrie sphérique, axiale et triaxiales, respectivement. La symétrie de réflexion est supposée dans les trois cas. Les dernières fonctionnelles de densité d'énergie nucléaire relativistes sont implémentées dans les codes, permettant ainsi des calculs efficaces et précis sur toute la charte nucléaire.

Les trois codes inclus dans le paquet DIRHB (DIRHBS, DIRHBZ et DIRHBT) comprennent un programme Fortran et deux fichiers supplémentaires : DIRHB.PAR et DIRHB.DAT.

Le fichier DIRHB.PAR contient les informations pertinentes sur la dimension des matrices, en fonction du nombre de couches d'oscillateur sélectionnées pour l'expansion des spinors de nucléons (N0FX) et des champs de bosons (N0BX), et le nombre de points de maillage gaussiens. Le fichier DIRHB.DAT contient les données du noyau spécifique calculé. Le programme principal appelle différents sous-programmes qui lisent les données et effectuent le calcul. L'exécution se compose essentiellement de trois parties. La première partie utilise le fichier DIRHB.DAT pour démarrer le programme, initialise et génère toutes les informations pertinentes. La deuxième partie du code effectue le calcul auto-cohérent. La troisième partie du code effectue les calculs restants une fois la convergence atteinte. Les états de quasi-particules et les états à une seule particule dans la base canonique sont imprimés, la correction du centre de masse est évaluée et diverses valeurs attendues sont calculées et imprimées.

## B.1 Données d'entrée et de sortie

### B.1.1 Données d'entrée

Un exemple de données d'entrée du code DIRHBT est illustré ci-dessous :

```
n0f,n0b = 12 20          ! number of oscillator shells(F,B)
beta0   = 0.000          ! beta-deformation parameter of the basis
gamma0  = 00.000         ! gamma-deformation parameter of the basis
betai   = +0.000         ! beta-deformation of the start potential
gammai  = 00.000         ! gamma-deformation of the start potential
inin    = 1 1           ! initialization
init. gap= 1.00 1.00
Kr 78    ! nucleus under consideration
c-----
Force    = DD-ME2        ! Parameterset of the Lagrangian
c-----
icstr    = 1             ! constraint none (0) quadratic (1)
betac    = 0.000         ! constrained value of beta
gammac   = 00.000        ! constrained value of gamma
cqad     = 0.100         ! Spring constant for constraint
c-----
```

#### Le fichier de données d'entrée du code informatique DIRHBT.

Ces données comprennent :

- Nombre de couches de l'oscillateur pour fermions et bosons (n0f, n0b). Ces nombres ne doivent pas dépasser les valeurs des paramètres n0fx et n0bx du fichier dirhb.par.
- paramètre de déformation  $\beta$  de la base de l'oscillateur harmonique (beta0 pour les codes axiaux et triaxiaux).
- Paramètre de déformation  $\gamma$  de la base de l'oscillateur harmonique (gamma0 pour le code triaxial)
- Paramètre de déformation  $\beta$  pour le potentiel Woods–Saxon initial (betai, uniquement pour les codes axiaux et triaxiaux).
- Paramètre de déformation  $\gamma$  du potentiel Woods–Saxon initial (gammai, uniquement pour le code triaxial).
- Le paramètre de départ pour le potentiel (inin). Si le paramètre inin est défini sur 1, le code commence par un potentiel Woods–Saxon par défaut prédéfini dans le code. Si le paramètre inin est défini sur 0, le potentiel initial est lu à partir du fichier dirhb.wel.
- Le paramètre de départ pour le champ de potentiel et d'appariement (inink). Si inink est réglé sur 1, le code commence par le champ d'appariement diagonal avec les éléments de matrice

égaux  $\delta_0$ ; si  $\text{inink}$  est réglé sur 0, les éléments de matrice d'appariement initiaux sont lus à partir du fichier `dirhb.del`.

- Les gaps d'appariement initiaux des neutrons et des protons ( $\delta_0$ ).
- Le nucléide à calculer : le nom de l'élément (`nucnam`) suivi du nombre de masse (`nama`).
- Acronyme du jeu de paramètres de la densité d'énergie fonctionnelle sélectionnée (`parname`). Les paramètres suivants, utilisés pour contrôler le calcul sous contrainte, sont utilisés uniquement par les codes DIRHBZ et DIRHBT. Dans le cas d'une symétrie axiale, seul  $\beta$  est contraint.
- Le paramètre de contrôle de contrainte quadripolaire `icstr`. Si `icstr` est défini sur 0, la contrainte quadripolaire n'est pas incluse et les paramètres `betac`, `gammac` et `cqad` ne sont pas utilisés. Si `icstr` est défini sur 1, alors `betac` et `gammac` désignent la valeur contrainte de la déformation quadripolaire dans le plan  $\beta - \gamma$ .
- Valeur contrainte du paramètre de déformation  $\beta$  (`betac`).
- Valeur contrainte du paramètre de déformation  $\gamma$  (`gammac`).
- Constante de rigidité pour la contrainte quadripolaire (`cqad`).

### B.1.2 Données de sortie

La sortie du calcul est assez simple et nous ne décrivons que brièvement les différentes sections du fichier de sortie `dirhb.out`.

- **Entête** : Le titre du code, la date et l'heure d'exécution, ainsi que le nom, la masse, le nombre de neutron et de protons du noyau, acronyme de l'interaction effective utilisée dans le calcul.
- **Données d'entrée** : Résumé des données d'entrée.
- **Force** : Acronyme et paramètres de l'interaction effective utilisée dans les canaux particule-trou et particule-particule.
- **Numérique** : Résumé des paramètres numériques et des options.
- **Itérations** : brèves informations pour chaque étape d'itération.
- **Base canonique** : Nombres quantiques de l'état de base de l'oscillateur harmonique correspondant à la plus grande composante de la fonction d'onde canonique, contribution de cet état de base à la fonction d'onde canonique, énergies à une seule particule, gaps d'appariement et probabilités d'occupation dans la base canonique.
- **Base Quasiparticle** : Les nombres quantiques de l'état de base de l'oscillateur harmonique correspondant à la plus grande composante de la fonction d'onde de quasi-particules, aux énergies de quasi-particules, aux normes des coefficients U et V. Si la norme du coefficient V est supérieure à 0.5, l'état est marqué comme un état de trou (h), sinon il est étiqueté comme un état de particule (p).
- **Observables** : Valeurs moyennes de diverses observables calculées pour l'état RHB final.

# Bibliographie

- [1] E. Rutherford. LXXIX. The scattering of  $\alpha$  and  $\beta$  particles by matter and the structure of the atom. *Philosophical Magazine Series 6*, 21(125) :669–688, may 1911.
- [2] Jochen Erler, Noah Birge, Markus Kortelainen, Witold Nazarewicz, Erik Olsen, Alexander M Perhac, and Mario Stoitsov. The limits of the nuclear landscape. *Nature*, 486(7404) :509–12, 2012.
- [3] M Brack and S Jensen. S :ie. . . -Correction1. Brack M, Jensen S. S :ie. . . -Correction. 44. 44.
- [4] Adam Sobiczewski, Anna Gyurkovich, and Matthias Brack. An asymptotic form of the smooth part of the total single-particle energy. *Nuclear Physics, Section A*, 289(2) :346–364, 1977.
- [5] P. Moller, J.R. Nix, W.D. Myers, and W.J. Swiatecki. Nuclear Ground-State Masses and Deformations. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 59(2) :185–381, mar 1995.
- [6] S E Koonin, D J Dean, and K Langanke. Shell model Monte Carlo methods. *Physics Reports-Review Section of Physics Letters*, 278(1) :1–77, 1997.
- [7] D. J. Dean, T. Engeland, M. Hjorth-Jensen, M. P. Kartamyshev, and E. Osnes. Effective interactions and the nuclear shell-model. *Progress in Particle and Nuclear Physics*, 53(2) :419–500, 2004.
- [8] E Caurier, F Nowacki, A Poves, and A P Zuker. The Shell Model as Unified View of Nuclear Structure, 2003. *Rev. Mod. Phys.*, 77(April) :427, 2005.
- [9] Michael Bender, Paul-Henri Heenen, and Paul-Gerhard Reinhard. Self-consistent mean-field models for nuclear structure. *Reviews of Modern Physics*, 75(1) :121–180, jan 2003.
- [10] J. Meng, H. Toki, S. G. Zhou, S. Q. Zhang, W. H. Long, and L. S. Geng. Relativistic continuum Hartree Bogoliubov theory for ground-state properties of exotic nuclei. *Progress in Particle and Nuclear Physics*, 57(2) :470–563, 2006.
- [11] J. R. Stone and P. G. Reinhard. The Skyrme interaction in finite nuclei and nuclear matter. *Progress in Particle and Nuclear Physics*, 58(2) :587–657, 2007.
- [12] H. Kümmel, K. H. Lührmann, and J. G. Zabolitzky. Many-fermion theory in expS- (or coupled cluster) form. *Physics Reports*, 36(1) :1–63, 1978.
- [13] H. Feldmeier, T. Neff, R. Roth, and J. Schnack. A unitary correlation operator method. *Nuclear Physics A*, 632(1) :61–95, 1998.

- [14] W. H. Dickhoff and C. Barbieri. Self-consistent Green's function method for nuclei and nuclear matter. *Progress in Particle and Nuclear Physics*, 52(2) :377–496, 2004.
- [15] Peter Moller, Arnold J. Sierk, and Akira Iwamoto. Five-Dimensional Fission-Barrier Calculations from Se-70 to Cf-252. (February) :1–4, 2004.
- [16] M. Kowal, P. Jachimowicz, and A. Sobiczewski. Fission barriers for even-even superheavy nuclei. *Physical Review C - Nuclear Physics*, 82(1) :1–10, 2010.
- [17] Peter Möller, William D. Myers, Hiroyuki Sagawa, and Satoshi Yoshida. New finite-range droplet mass model and equation-of-state parameters. *Physical Review Letters*, 108(5) :108–111, 2012.
- [18] Kohn1965. Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects. 385(1951), 1965.
- [19] W Kohn. <Nobel Lecture- Electronic structure of matter wave functions RevMod-Phys.71.1253.pdf>. 71(5) :1253–1266, 1999.
- [20] E Chabanat, E Bonche, E Haensel, and J Meyer. A Skyrme parametrization from subnuclear to neutron star densities. 627 :710–746, 1997.
- [21] Institut De Physique Nuclkaire, P Quentin, and Division De Physique Thporiquet. Laboratoire associd au CNRS. 29. 238 :29–69, 1975.
- [22] J. Dechargé and D. Gogny. Hartree-Fock-Bogolyubov calculations with the D 1 effective interaction on spherical nuclei. *Physical Review C*, 21(4) :1568–1593, 1980.
- [23] F Chappert, N Pillet, M Girod, and J Berger. Gogny force with a finite-range density dependence. 034312(December 2013), 2015.
- [24] M Baldo and X Vi. New Kohn-Sham density functional based on microscopic nuclear and neutron matter equations of state. 064305 :1–23, 2013.
- [25] M Baldo, P Schuck, and X Viñas. Kohn – Sham density functional inspired approach to nuclear binding. 663 :390–394, 2008.
- [26] H Nakada. Erratum : Mean-field approach to nuclear structure with semi-realistic nucleon-nucleon interactions [ Phys . Rev . C 78 , 054301 ( 2008 )]. 029902(August) :64312, 2010.
- [27] F Hofmann and H Lenske. Hartree-Fock calculations in the density matrix expansion approach. 57(5), 1998.
- [28] Brian D Serot and John Dirk Walecka. *A dvances in N uclear P hysics*, volume 16.
- [29] P. Ring. Relativistic mean field theory in finite nuclei. *Progress in Particle and Nuclear Physics*, 37 :193–263, 1996.
- [30] D Vretenar, A V Afanasjev, G A Lalazissis, and P Ring. Relativistic Hartree – Bogoliubov theory : static and dynamic aspects of exotic nuclear structure. 409 :101–259, 2005.
- [31] G. Audi and A.H. Wapstra. The 1993 atomic mass evaluation. *Nuclear Physics A*, 565(1) :1–65, dec 1993.

- [32] National Nuclear Data Center. Evaluated Nuclear Structure Data File. <http://www.nndc.bnl.gov/ensdf>.
- [33] M Thoennessen. Reaching the limits of nuclear stability. *Reports on Progress in Physics*, 67(7) :1187–1232, 2004.
- [34] David Lawrence Hill and John Archibald Wheeler. Nuclear constitution and the interpretation of fission phenomena. *Physical Review*, 89(5) :1102–1145, 1953.
- [35] Christophe Sotty. *Study of the nuclear structure far from stability*. PhD thesis, 2013.
- [36] J. Chadwick. Proceedings of the Royal Society of London. Series A 136(830), 692–708 (1932).
- [37] C. Weizsacker. Zur Theorie der Kernmassen. *Zeitschrift fur Physik*, 96(7-8) :431–458, jul 1935.
- [38] P Navratil, B R Barrett, and W E Ormand. Large-basis shell-model calculation of the C-10->B-10 Fermi matrix element. *Phys. Rev. C*, 56(5) :2542–2548, 1997.
- [39] J. W. Negele. The mean-field theory of nuclear structure and dynamics. *Reviews of Modern Physics*, 54(4) :913–1015, oct 1982.
- [40] J. Dobaczewski, H. Flocard, and J. Treiner. Hartree-Fock-Bogolyubov description of nuclei near the neutron-drip line. *Nuclear Physics, Section A*, 422(1) :103–139, 1984.
- [41] B D Serot. Quantum hadrodynamics. *Reports on Progress in Physics*, 55(11) :1855–1946, 1992.
- [42] N. Bohr and J. A. Wheeler. The mechanism of nuclear fission. *Physical Review*, 56(5) :426–450, 1939.
- [43] P Ring and P Schuck. *The Nuclear Many-Body Problem*. 1980.
- [44] Lawson R. D. *Theory of the Nuclear Shell Model*. Clarendon Press Oxford, 1980.
- [45] Roger D. Woods and David S. Saxon. Diffuse surface optical model for nucleon-nuclei scattering. *Physical Review*, 95(2) :577–578, 1954.
- [46] Maria Goeppert Mayer. On Closed Shells in Nuclei. II. *Physical Review*, 75(12) :1969–1970, jun 1949.
- [47] Otto Haxel, J. Hans D. Jensen, and Hans E Suess. On the "Magic Numbers" in Nuclear Structure. *Physical Review*, 75(11) :1766–1766, jun 1949.
- [48] Sven Gösta Nilsson. Classification of the Nucleonic States in Deformed Nuclei. *Physical Review*, 99(5) :1615–1617, sep 1955.
- [49] J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer. Theory of Superconductivity. *Physical Review*, 108(5) :1175–1204, dec 1957.
- [50] J. C. Slater. The Theory of Complex Spectra. *Physical Review*, 34(10) :1293–1322, nov 1929.
- [51] D. R. Hartree. The Wave Mechanics of an Atom with a Non-Coulomb Central Field Part I Theory and Methods. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 24(1) :89–110, 1928.

- [52] V Fock. "Selfconsistent field" mit Austausch von Natrium. *Zeitschrift für Physik*, 62(11-12) :795–805, 1930.
- [53] I Kelson. Variational shell-model methods for deformed orbitals. *Physical Review*, 132(5) :2189–2193, 1963.
- [54] T.H.R. Skyrme. The effective nuclear potential. *Nuclear Physics*, 9(4) :615–634, jan 1958.
- [55] J Meyer. Interactions effectives, théories de champ moyen, masses et rayons nucléaires. *Annales de Physique*, 28(3) :1–113, 2003.
- [56] M. V. Stoitsov, N. Schunck, M. Kortelainen, N. Michel, H. Nam, E. Olsen, J. Sarich, and S. Wild. Axially deformed solution of the Skyrme-Hartree-Fock-Bogoliubov equations using the transformed harmonic oscillator basis (II) hfbtho v2.00d : A new version of the program. *Computer Physics Communications*, 184(6) :1592–1604, 2013.
- [57] T. Nikšić, N. Paar, D. Vretenar, and P. Ring. DIRHB - A relativistic self-consistent mean-field framework for atomic nuclei. *Computer Physics Communications*, 185(6) :1808–1821, 2014.
- [58] G. A. Lalazissis, T. Nikšić, D. Vretenar, and P. Ring. New relativistic mean-field interaction with density-dependent meson-nucleon couplings. *Physical Review C - Nuclear Physics*, 71(2) :1–10, 2005.
- [59] T. Nikšić, T. Nikšić, D. Vretenar, D. Vretenar, P. Ring, G. A. Lalazissis, and G. A. Lalazissis. Shape coexistence in the relativistic Hartree-Bogoliubov approach. *Physical Review C - Nuclear Physics*, 65(5) :543201–543207, 2002.
- [60] T. Nikšić, D. Vretenar, and P. Ring. Relativistic nuclear energy density functionals : Adjusting parameters to binding energies. *Physical Review C - Nuclear Physics*, 78(3) :1–19, 2008.
- [61] X. Roca-Maza, X. Viñas, M. Centelles, P. Ring, and P. Schuck. Erratum : Relativistic mean-field interaction with density-dependent meson-nucleon vertices based on microscopical calculations (Physical Review C (2011) 84 (054309) DOI : 10.1103/Phys-RevC.84.054309). *Physical Review C*, 93(6), 2016.
- [62] A. V. Afanasjev and P. Ring. Time-odd mean fields in the rotating frame : Microscopic nature of nuclear magnetism. *Physical Review C*, 62(3) :031302, 2000.
- [63] J. Meng and S. G. Zhou. Halos in medium-heavy and heavy nuclei with covariant density functional theory in continuum. *Journal of Physics G : Nuclear and Particle Physics*, 42(9) :93101, 2015.
- [64] M. Matev, A. V. Afanasjev, J. Dobaczewski, G. A. Lalazissis, and W. Nazarewicz. Additivity of effective quadrupole moments and angular momentum alignments in  $A \sim 130$  nuclei. *Physical Review C - Nuclear Physics*, 76(3) :1–13, 2007.
- [65] A. V. Afanasjev, T. L. Khoo, S. Frauendorf, G. A. Lalazissis, and I. Ahmad. Cranked relativistic Hartree-Bogoliubov theory : Probing the gateway to superheavy nuclei. *Physical Review C - Nuclear Physics*, 67(2) :26, 2003.

- [66] Nobuo Hinohara, Takashi Nakatsukasa, Masayuki Matsuo, and Kenichi Matsuyanagi. Effects of Time-Odd Components in Mean Field\non Large Amplitude Collective Dynamics. *Progress of Theoretical Physics*, 115(3) :567–599, 2006.
- [67] A. V. Afanasjev. Band terminations in density functional theory. *Physical Review C - Nuclear Physics*, 78(5) :1–12, 2008.
- [68] J König and P Ring. Identical bands in superdeformed nuclei : A relativistic description. *Physical Review Letters*, 71(19) :3079–3082, 1993.
- [69] A V Afanasjev and H Abusara. Time-odd mean fields in covariant density functional theory : Nonrotating systems. 014309(October 2009), 2010.
- [70] S. E. Agbemava, A. V. Afanasjev, D. Ray, and P. Ring. Assessing theoretical uncertainties in fission barriers of superheavy nuclei. *Physical Review C*, 95(5), 2017.
- [71] A. V. Afanasjev and S. E. Agbemava. Covariant energy density functionals : Nuclear matter constraints and global ground state properties. *Physical Review C*, 93(5) :1–14, 2016.
- [72] S. E. Agbemava, A. V. Afanasjev, T. Nakatsukasa, and P. Ring. Covariant density functional theory : Reexamining the structure of superheavy nuclei. *Physical Review C - Nuclear Physics*, 92(5) :1–21, 2015.
- [73] S. E. Agbemava, A. V. Afanasjev, D. Ray, and P. Ring. Global performance of covariant energy density functionals : Ground state observables of even-even nuclei and the estimate of theoretical uncertainties. *Physical Review C - Nuclear Physics*, 89(5), 2014.
- [74] H. Abusara, A. V. Afanasjev, and P. Ring. Fission barriers in covariant density functional theory : Extrapolation to superheavy nuclei. *Physical Review C - Nuclear Physics*, 85(2) :1–17, 2012.
- [75] T Nikšić, D Vretenar, and P Ring. Relativistic nuclear energy density functionals : Mean-field and beyond. *Progress in Particle and Nuclear Physics*, 66(3) :519–548, 2011.
- [76] G. A. Lalazissis, S. Karatzikos, R. Fossion, D. Pena Arteaga, A. V. Afanasjev, and P. Ring. The effective force NL3 revisited. *Physics Letters, Section B : Nuclear, Elementary Particle and High-Energy Physics*, 671(1) :36–41, 2009.
- [77] S I Type and H H Wolter. Relativistic mean field calculations with density-dependent meson-nucleon coupling. 656(99), 1999.
- [78] Walecka1974. A Theory of Highly Condensed Matter\*. 529, 1974.
- [79] Walecka1986. THE RELATIVISTIC NUCLEAR MANY-BODY PROBLEM.
- [80] J. Boguta and A. R. Bodmer. Relativistic calculation of nuclear matter and the nuclear surface. *Nuclear Physics, Section A*, 292(3) :413–428, 1977.
- [81] Y.K Gambhir, P Ring, and a Thimet. Relativistic mean field theory for finite nuclei. *Annals of Physics*, 198(1) :132–179, 1990.



- [82] P. G. Reinhard, M. Rufa, J. Maruhn, W. Greiner, and J. Friedrich. Nuclear ground-state properties in a relativistic Meson-Field theory. *Zeitschrift für Physik A Atomic Nuclei*, 323(1) :13–25, 1986.
- [83] G. A. Lalazissis, J. König, and P. Ring. New parametrization for the Lagrangian density of relativistic mean field theory. *Physical Review C - Nuclear Physics*, 55(1) :540–543, 1997.
- [84] B. G. Todd-Rutel and J. Piekarewicz. Neutron-rich nuclei and neutron stars : A new accurately calibrated interaction for the study of neutron-rich matter. *Physical Review Letters*, 95(12) :1–4, 2005.
- [85] P Manakos, T Mannel, Technischen Hochschule, and D Darmstadt. Short Note Short Note on Relativistic Hartree Fock Models for Nuclei with Skyrme Type Interactions. 224 :223–224, 1988.
- [86] Rusnak1997. Relativistic point-coupling models as effective theories of nuclei. 627 :495–521, 1997.
- [87] Brvenich2002. Nuclear ground state observables and QCD scaling in a refined relativistic point coupling model. 65 :1–23, 2002.
- [88] P W Zhao. New parametrization for the nuclear covariant energy density functional with a point-coupling interaction. 054319 :1–14, 2010.
- [89] Nikolaus1992. Nuclear ground state properties in a relativistic point coupling model. 46(5), 1992.
- [90] El Bassem Younes and OULNE Mustapha. Ground state properties of even–even and odd Nd, Ce and Sm isotopes in Hartree–Fock–Bogoliubov method Read More : <http://www.worldscientific.com/doi/abs/10.1142/S0218301315500731>. *International Journal of Modern Physics E*, 24(10) :16, 2015.
- [91] E. Chabanat, P. Bonche, P. Haensel, J. Meyer, and R. Schaeffer. A Skyrme parametrization from subnuclear to neutron star densities Part II. Nuclei far from stabilities. *Nuclear Physics A*, 635 :231–256, 1998.
- [92] M. Wang, G. Audi, A.H. Wapstra, F.G. Kondev, M. MacCormick, X. Xu, and B. Pfeiffer. The Ame2012 atomic mass evaluation(I). *Chinese Physics C*, 36(12) :1603–2014, 2012.
- [93] S. Hilaire and M. Girod. Large-scale mean-field calculations from proton to neutron drip lines using the D1S Gogny force. *European Physical Journal A*, 33(2) :237–241, 2007.
- [94] Seyit O Kara, Tuncay Bayram, and Serkan Akkoyun. A study on structural evolution of <sup>142–164</sup>Nd isotopes. *Journal of Physics : Conference Series*, 490 :012106, 2014.
- [95] M. V. Stoitsov, J. Dobaczewski, W. Nazarewicz, and P. Ring. Axially deformed solution of the Skyrme-Hartree-Fock-Bogolyubov equations using the transformed harmonic oscillator basis. the program HFBTHO (v1.66p). *Computer Physics Communications*, 167(1) :43–63, 2005.

- [96] P. MÖLLER, J.R. NIX, and K.-L. KRATZ. Nuclear Properties for Astrophysical and Radioactive-Ion-Beam Applications. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 66(2) :131–343, 1997.
- [97] G.A. Lalazissis, S. Raman, and P. Ring. Ground-State Properties of Even–Even Nuclei in the Relativistic Mean-Field Theory. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 71(1) :1–40, 1999.
- [98] I. Angeli. A consistent set of nuclear rms charge radii : properties of the radius surface  $R(N,Z)$ . *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 87(2) :185–206, jul 2004.
- [99] S. Raman, C. W. Nestor, and P. Tikkanen. Transition probability from the ground to the first-excited 2+state of even-even nuclides. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 78(1) :1–128, 2001.
- [100] TUNCAY BAYRAM and A. HAKAN YILMAZ. TABLE OF GROUND STATE PROPERTIES OF NUCLEI IN THE RMF MODEL. *Modern Physics Letters A*, 28(16) :1350068, may 2013.
- [101] B. Bally, B. Avez, M. Bender, and P.-H. Heenen. Beyond Mean-Field Calculations for Odd-Mass Nuclei. *Physical Review Letters*, 113(16) :162501, oct 2014.
- [102] M. Chabab, A. Lahbas, and M. Oulne. Vibrational and rotational excited states within a Bohr Hamiltonian with a deformation-dependent mass formalism. *Physical Review C*, 91(6) :064307, jun 2015.
- [103] J. Terasaki, P. H. Heenen, H. Flocard, and P. Bonche. 3D solution of Hartree-Fock-Bogoliubov equations for drip-line nuclei. *Nuclear Physics A*, 600(3) :371–386, 1996.
- [104] J. Dobaczewski, W. Nazarewicz, T. R. Werner, J. F. Berger, C. R. Chinn, and J. Dechargé. Mean-field description of ground-state properties of drip-line nuclei : Pairing and continuum effects. *Physical Review C - Nuclear Physics*, 53(6) :2809–2840, 1996.
- [105] M. V. Stoitsov, J. Dobaczewski, P. Ring, and S. Pittel. Quadrupole deformations of neutron-drip-line nuclei studied within the Skyrme Hartree-Fock-Bogolyubov approach. *Physical Review C - Nuclear Physics*, 61(3) :20, 1999.
- [106] E. Teran, V. E. Oberacker, and a. S. Umar. Axially symmetric Hartree-Fock-Bogoliubov Calculations for Nuclei Near the Drip-Lines. page 13, 2003.
- [107] G. A. Lalazissis and M. M. Sharma. Ground-state properties of exotic nuclei near  $Z = 40$  in the relativistic mean-field theory. *Nuclear Physics, Section A*, 586(2) :201–218, 1995.
- [108] M. Yamagami, K. Matsuyanagi, and M. Matsuo. Symmetry-unrestricted Skyrme-Hartree-Fock-Bogoliubov calculations for exotic shapes in  $N=Z$  nuclei from  $^{64}\text{Ge}$  to  $^{84}\text{Mo}$ . *Nuclear Physics A*, 693(3-4) :579–602, 2001.
- [109] R. Rodriguez-Guzman, P. Sarriguren, L. M. Robledo, and S. Perez-Martin. Charge radii and structural evolution in Sr, Zr, and Mo isotopes. *Physics Letters, Section B : Nuclear, Elementary Particle and High-Energy Physics*, 691(4) :202–207, 2010.

- [110] J. Bartel, P. Quentin, M. Brack, C. Guet, and H.-B. Håkansson. Towards a better parametrisation of Skyrme-like effective forces : A critical study of the SkM force. *Nuclear Physics A*, 386(1) :79–100, sep 1982.
- [111] A Baran, J L Egidot, K Pomorskit, and P Rings. Mean-field calculations of proton and neutron distributions in Sr , Xe and Ba isotopes. *J.Phy. G ; Nucl. Phys.*, 21 :657–668, 1995.
- [112] W Satuła, J Dobaczewski, and W Nazarewicz. Odd-Even Staggering of Nuclear Masses : Pairing or Shape Effect. *Physical Review Letters*, 81(17) :3599–3602, oct 1998.
- [113] S. J. Krieger, P. Bonche, H. Flocard, P. Quentin, and M. S. Weiss. An improved pairing interaction for mean field calculations using skyrme potentials\*. *Nuclear Physics, Section A*, 517(2) :275–284, 1990.
- [114] M Bender, K Rutz, P Reinhard, and J A Maruhn. Pairing gaps from nuclear mean-field models. 75 :59–75, 2000.
- [115] J Dobaczewski, W Satuła, B G Carlsson, J Engel, P Olbratowski, P Powalowski, M Sadziak, J Sarich, N Schunck, A Staszczak, M Stoitsov, M Zalewski, and H Zduńczuk. Solution of the Skyrme–Hartree–Fock–Bogolyubov equations in the Cartesian deformed harmonic-oscillator basis. *Computer Physics Communications*, 180(11) :2361–2391, 2009.
- [116] Y. El Bassem and M. Oulne. Hartree–Fock–Bogoliubov calculation of ground state properties of even–even and odd Mo and Ru isotopes. *Nuclear Physics A*, 957 :22–32, 2017.
- [117] N Schunck, J Dobaczewski, J McDonnell, J More, W Nazarewicz, J Sarich, and M V Stoitsov. One-quasiparticle States in the Nuclear Energy Density Functional Theory. *Physical Review C*, 81 :24316, 2010.
- [118] M. M. Sharma, G. A. Lalazissis, and P. Ring. Anomaly in the charge radii of Pb isotopes. *Physics Letters B*, 317(1-2) :9–13, 1993.
- [119] A. Bohr and B. R. Mottelson. *Nuclear Structure Vol I : Single–Particle Motion*. World Scientific, Singapore, 1998.
- [120] P Bonche. NUCLEAR Self-consistent calculation. 551 :434–450, 1993.
- [121] Afaque Karim and Shakeb Ahmad. Relativistic self-consistent mean-field description of Sm isotopes. 064608(July) :1–13, 2010.
- [122] L S Geng, H Toki, and J Meng. A SYSTEMATIC STUDY OF Zr AND Sn ISOTOPES IN THE RELATIVISTIC MEAN FIELD THEORY. 19(29) :2171–2190, 2004.
- [123] R. Rodríguez-Guzmán, P. Sarriguren, L. M. Robledo, and J. E. García-Ramos. Mean field study of structural changes in Pt isotopes with the Gogny interaction. *Physical Review C - Nuclear Physics*, 81(2) :1–15, 2010.
- [124] J. E. García-Ramos, K. Heyde, L. M. Robledo, and R. Rodríguez-Guzmán. Shape evolution and shape coexistence in Pt isotopes : Comparing interacting boson model configuration mixing and Gogny mean-field energy surfaces. *Physical Review C - Nuclear Physics*, 89(3) :1–9, 2014.

- [125] K. Nomura, T. Otsuka, R. Rodríguez-Guzmán, L. M. Robledo, and P. Sarriguren. Structural evolution in Pt isotopes with the interacting boson model Hamiltonian derived from the Gogny energy density functional. *Physical Review C - Nuclear Physics*, 83(1) :1–11, 2011.
- [126] J. M. Yao, M. Bender, and P. H. Heenen. Systematics of low-lying states of even-even nuclei in the neutron-deficient lead region from a beyond-mean-field calculation. *Physical Review C - Nuclear Physics*, 87(3) :1–17, 2013.
- [127] J M Boillos and P Sarriguren. the Lancet. London : Saturday, July 26, 1845. *The Lancet*, 46(1143) :104–106, 1845.
- [128] K. Nomura, R. Rodríguez-Guzmán, and L. M. Robledo. Shape evolution and the role of intruder configurations in Hg isotopes within the interacting boson model based on a Gogny energy density functional. *Physical Review C - Nuclear Physics*, 87(6) :1–18, 2013.
- [129] N. Schunck, J. Dobaczewski, J. McDonnell, W. Satuła, J.A. Sheikh, A. Staszczak, M. Stoitsov, and P. Toivanen. Solution of the Skyrme–Hartree–Fock–Bogolyubov equations in the Cartesian deformed harmonic-oscillator basis. *Computer Physics Communications*, 183(1) :166–192, jan 2012.
- [130] D. Vautherin. Hartree-fock calculations with skyrme’s interaction. II. Axially deformed nuclei. *Physical Review C*, 7(1) :296–316, 1973.