

## 1991

« Les noyaux en pleines formes »  
Maubuisson, 10<sup>ème</sup> session – 16-21 septembre 1991

### Table des matières détaillée

Avant-propos Y. Abgrall	p. i
I - Highly deformed nuclei at high spin Z. Szymanski	p. 1
II - Approches de champ moyen et au-delà J.-F. Berger	p. 33
III - Au-delà de la méthode du champ moyen par la méthode de la coordonnée génératrice P.-H. Heenen	p. 117
IV - Algebraic approaches to nuclear structure K. Heyde	p. 153
V - Multicompteurs $4\pi\gamma$ de grande résolution en énergie B. Haas	p. 207
VI - Superdeformed nuclei R.V.F. Janssens, T.L. Khoo	p. 231
VII - Les isomères de fission D. Paya	p. 275
VIII - Utilisation pratique des excitations nucléaires à longue durée de vie – D. Cogny	p. 287
IX - Formes nucléaires et physique atomique G. Huber	p. 305
X - Experiments with shell structure in metal clusters S. Bjornholm, J. Borggreen, K. Hansen, T. Martin, T.D. Rasmussen, J. Pedersen	p. 311
XI - Metal clusters : theoretical approaches M. Brack	p. 325
Table ronde P. Bonche	p. 357
Liste des participants	p. 359

II 15 24

9760

**ECOLE INTERNATIONALE JOLIOT-CURIE  
DE PHYSIQUE NUCLEAIRE**

**Maubuisson, Gironde**

**10<sup>ème</sup> session, 16-21 Septembre 1991**

**Sous le patronage de**

**l'Institut de Physique Nucléaire et de Physique des Particules**

**avec la participation**

**de la Direction des Sciences de la Matière du CEA**

**et du Fonds National de la Recherche Scientifique de Belgique**

**LES NOYAUX EN PLEINES FORMES**

**Z. SZYMANSKI**

**J.F. BERGER**

**P.H. HEENEN**

**K. HEYDE**

**B. HAAS**

**R. JANSSENS**

**D. PAYA**

**D. GOGNY**

**G. HUBER**

**S. BJØRNHOLM**

**M. BRACK**

Cours enseignés aux précédentes sessions de l'Ecole Joliot-Curie de Physique Nucléaire.

1982 : COLLISIONS NUCLEAIRES AUX ENERGIES VOISINES DE L'ENERGIE DE FERMI

H. Flocard, J. Hüfner, J. Richert, B. Tamain, R. Babinet, J. Cugnon,  
D. Guerreau, C. Guet, J. Menet, H. Pirner

1983 : STRUCTURE NUCLEAIRE AUX FRONTIERES DE LA STABILITE

J.P. Blaisot, M. Epherre, C. Mahaux, M. Meyer, H. Sergolle, Z. Szymanski,  
S. Della Negra, J. Delorme, S. Gales, D. Gogny, B. Haas, J.P. Vivien

1984 : MESONS, BARYONS, QUARKS ET PHYSIQUE NUCLEAIRE

B. Desplanques, B. Frois, U. Gastaldi, E. Predazzi, G. Ripka, J. Arvieux,  
J.J. Aubert, M. Ericson, G. London, B. Vignon

1985 : LA MATIERE DANS TOUS SES ETATS

P. Bonche, J. Cugnon, R. Babinet, J.F. Mathiot, L. Van Hove, M. Buenerd,  
J. Galin, M.C. Lemaire, J. Meyer

1986 : SYMETRIES ET PHYSIQUE NUCLEAIRE

P. Depommier, S. Gales, Nguyen Van Giai, P. Guichon, P. Schuck, D. Goutte,  
M. Vergnes, M. Avenier, P. Hubert, G. Girardi, B. Loiseau

1987 : AU-DELA DU CHAMP MOYEN

K. Dietrich, G.J. Wagner, C. Grégoire, X. Campi, B. Silvestre-Brac,  
S. Platchkov, B. Mayer, Y. Abgrall, O. Bohigas, P. Grangé, C. Signarbieux

1988 : a) INSTRUMENTATION EN PHYSIQUE NUCLEAIRE ET  
PHYSIQUE DES PARTICULES

F. Sauli, V. Comparat, M. Suffert, J. Séguinot, P. Farthouat, R. Wigmans, B. Equer, D. L'Hôte,  
L. Fayard, H. Videau, J.M. Durand, A. Boudard, H. Fanet, F. Bourgeois, D. Perret-Gallix  
L. Gonzalez-Mestres

b) A LA RECHERCHE DU PLASMA DE QUARKS ET DE GLUONS : LES COLLISIONS  
D'IONS LOURDS ULTRARELATIVISTES - ANALYSE MULTIDIMENSIONNELLE

J.P. Blaisot, J.N. Capdevielle, A. Capella, J. Gosset, G. Landaud,  
P. Lutz, A. Morel, B. Pire, D. Vautherin

1989 : NUCLEONS DANS LE NOYAU, MAIS ENCORE ...

P. Grangé, J.F. Mathiot, M. Ericson, H.J. Pirner, M. Roy-Stephan, J. Delorme, R. Frascaria  
S. Gales, A. Magnon, M. Arnould

1990 : LA PHYSIQUE NUCLEAIRE DU LABORATOIRE AUX ETOILES

N. Prantzos, M. Arnould, E. Schatzman, J.P. Thibaud, P. Descouvemont, J.P. Dufour  
P. Quentin, E. Suraud, R. Schaeffer

Ces cours peuvent être consultés dans les bibliothèques des laboratoires concernés de l'IN2P3, du CEA,  
de l'UL Bruxelles et au CERN. Les cours 1989, 1990 peuvent être obtenus sur demande auprès de :

Josette GARRABOS

CEN Bordeaux

Le Haut-Vigneau

33175 Gradignan cedex, France

Les cours de la session 1988 pour a) sont en vente aux Editions de Physique, Paris - b) peuvent être  
obtenus sur demande auprès de Angela Delaunay à l'IN2P3.

CONSEIL SCIENTIFIQUE DE

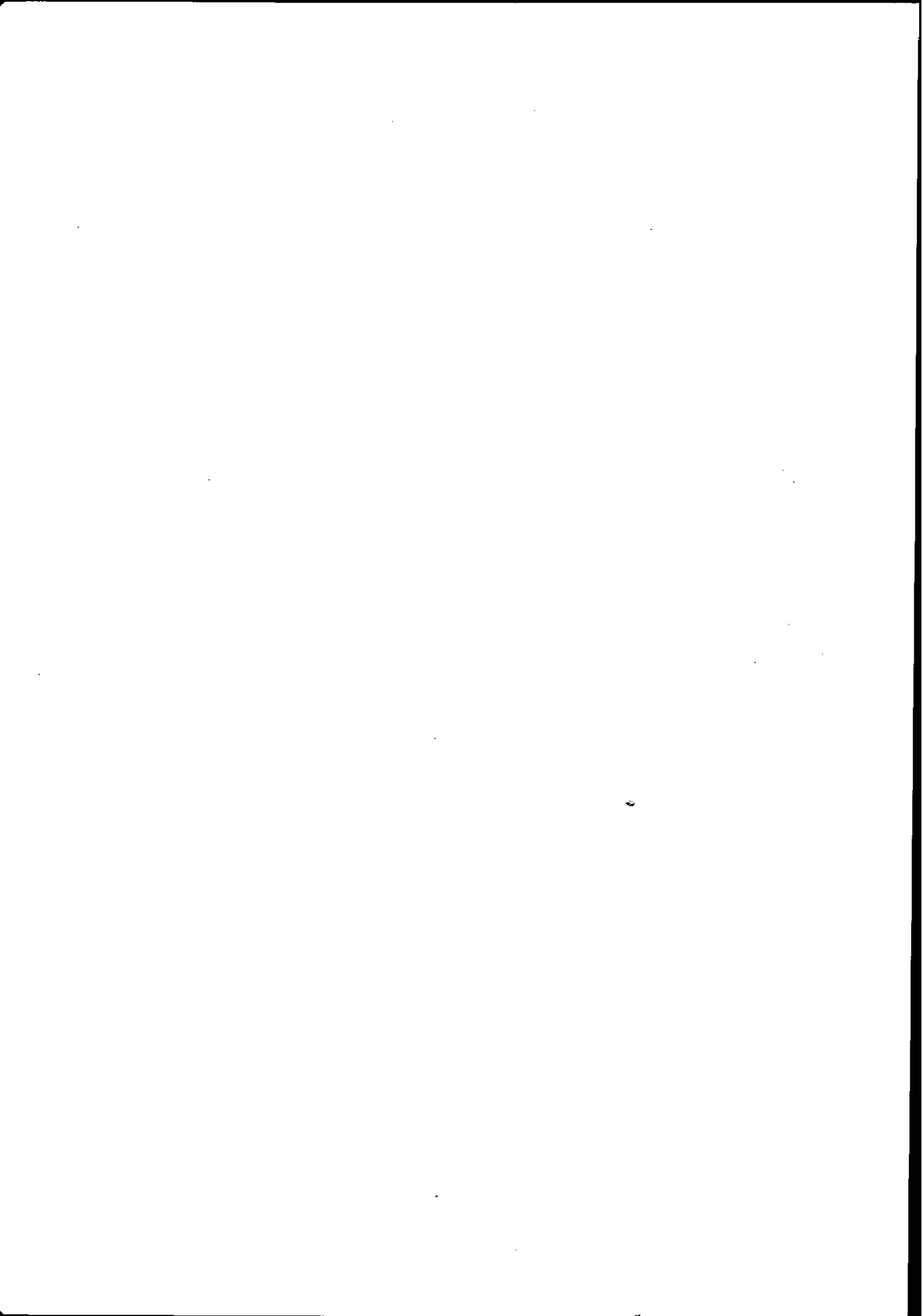
L'ECOLE JOLIOT-CURIE DE PHYSIQUE NUCLEAIRE 1991

Bordeaux CEN	J.P. DUFOUR
Bordeaux LPT	Y. ABGRALL
Caen GANIL	E. PLAGNOL, E. SURAUD
Clermont LPC	H. FONVIEILLE
Grenoble ISN	M. DURAND, S. KOX
Lyon IPN	J.Y. GROSSIORD, J. MEYER
Nantes LPN	B. REMAUD
Orsay CSNSM	P. AGUER, P. QUENTIN
Orsay IPN	P. CHOMAZ, R. FRASCARIA, J.F. MATHIOT
Saclay CEN	N. ALAMANOS, J.P. BLAIZOT, P. BONCHE, J. GOSSET, D. GOUTTE
Stasbourg CRN	C. BECK, B. HAAS
Bruxelles UL	P.H. HEENEN, C. WILLAIN-LECLERCQ
Liège U	J. CUGNON
Louvain UC	Y. EL MASRI
Mons U	F. MICHEL

COMITE D'ORGANISATION DE

L'ECOLE JOLIOT-CURIE DE PHYSIQUE NUCLEAIRE 1991

Y. ABGRALL, P. AGUER, D. GOUTTE, P.H. HEENEN, P. QUENTIN



# TABLE DES MATIERES

## AVANT-PROPOS

Y. ABGRALL

## HIGHLY DEFORMED NUCLEI AT HIGH SPIN 1

Z. SZYMANSKI

1. Elements of Physics	1
2. Shell structure	9
3. Symmetries	18
References	31

## APPROCHES DE CHAMP MOYEN ET AU DELA 33

J.F. BERGER

I. Introduction	33
II. Pourquoi une approche microscopique de la structure nucléaire?	35
III. Un défi toujours d'actualité!	37
IV. Approches de champ moyen et interactions effectives phénoménologiques	42
V. Une hiérarchie d'approximations fondée sur la théorie du champ moyen	48
VI. La méthode de Hartree-Fock-Bogolyubov	69
VII. Dérivation du Hamiltonien collectif microscopique et applications	94
VIII. Conclusions	113
Références	114

## AU DELA DE LA METHODE DU CHAMP MOYEN PAR LA METHODE DE LA COORDONNEE GENERATRICE 117

P.-H. HEENEN

1. Introduction	117
2. La méthode de la coordonnée génératrice	120
3. Les restaurations de symétrie	131
4. Les déformations octupolaires	140
Références	151

<b>ALGEBRAIC APPROACHES TO NUCLEAR STRUCTURE</b>	153
<i>K. HEYDE</i>	
1.1 Introduction	154
1.2 The nuclear shell-model	156
1.3 Collective modes of the nucleus	162
1.4 Conclusion	167
2.1 Introduction	168
2.2 Shell-model basis of collective quadrupole motion	168
2.3 Conclusion	178
3.1 Introduction	180
3.2 Symmetries	180
3.3 IBA-1 group structure and dynamic symmetries	190
3.4 Conclusion	195
Appendix	196
References	203
<b>MULTICOMPTEURS <math>4\pi\gamma</math> DE GRANDE RESOLUTION EN ENERGIE</b>	207
<i>B. HAAS</i>	
I. Introduction	207
II. Caractéristiques générales des détecteurs germanium	209
III. Probabilité de détection avec un multicompteur	214
IV. EUROGAM	218
V. Conclusions	228
Références	229
<b>SUPERDEFORMED NUCLEI</b>	231
<i>R.V.F. JANSSENS, T.L. KHOO</i>	
1. Introduction	232
2. A new region of superdeformation	233
3. Superdeformation in the A=150 region : "identical" bands	246
4. Identical bands in the A=190 region	255
5. Other important effects at large deformation	261

6. Feeding and decay of superdeformed bands	262
7. Summary and outlook	268
References	271
 <b>LES ISOMERES DE FISSION</b>	 275
<i>D. PAYA</i>	
1. Introduction	275
2. Historique	276
3. Techniques expérimentales	277
4. Propriétés de décroissance	279
5. Spins	281
6. Excitation des isomères	282
7. Conclusions	285
Références	286
 <b>UTILISATION PRATIQUE DES EXCITATIONS NUCLEAIRES</b>	 287
<b>A LONGUE DUREE DE VIE - LE GRASER</b>	
<i>D. GOGNY</i>	
Introduction	287
I. Quelques rappels	289
II. Définition d'un schéma graser	291
III. Les différentes approches du graser ces vingt dernières années	294
IV. Conclusion	301
Références	303
 <b>FORMES NUCLEAIRES ET PHYSIQUE ATOMIQUE</b>	 305
<i>G. HUBER</i>	
1. Introduction	305
2. Hyperfine structure and isotope shift	306



<b>3. Static moments and nuclear shape</b>	307
<b>4. Collinear laser spectroscopy</b>	307
<b>References</b>	310
<b>EXPERIMENTS WITH SHELL STRUCTURE IN METAL CLUSTERS</b>	311
<i>S. BJØRNHOLM, J. BORGGREEN, K. HANSEN, T. MARTIN, H.D. RASMUSSEN, J. PEDERSEN</i>	
<b>1. Introduction</b>	311
<b>2. The experiment</b>	312
<b>3. Magic numbers</b>	314
<b>4. Intensities</b>	317
<b>5. The quantum beat</b>	320
<b>6. Modern theories</b>	320
<b>7. Particles and waves</b>	322
<b>References</b>	322
<b>METAL CLUSTERS : THEORETICAL APPROACHES</b>	325
<i>M. BRACK</i>	
<b>1. Introduction</b>	325
<b>2. From the quantal many-body problem to semi-classical jellium drops</b>	326
<b>3. Density functional theory</b>	331
<b>4. The selfconsistent jellium model</b>	338
<b>References</b>	347
<b>Figure captions</b>	350
<b>TABLE RONDE</b>	357
<i>P. BONCHE</i>	
<b>LISTE DES PARTICIPANTS</b>	359

## Avant-propos

*Les progrès remarquables réalisés en spectroscopie gamma au cours de ces dernières années ont considérablement enrichi notre connaissance des modes d'excitation des noyaux et ont ouvert du même coup plusieurs champs d'investigation de la structure nucléaire. Parmi ceux-ci se distingue l'étude du comportement des noyaux dans des conditions extrêmes de spin, d'élongation, de températures,....*

*Le but de l'Ecole Joliot-Curie 1991 était précisément de faire le point sur les différents aspects de la structure du noyau pour lesquels les degrés de liberté associés au concept de forme jouent un rôle primordial.*

*Parallèlement aux percées dans le domaine expérimental, les théoriciens ont développé des moyens d'investigation performants et complémentaires qui permettent d'aborder les différents aspects d'une dynamique nucléaire qui s'avère particulièrement riche : structure quantique d'un noyau en rotation rapide, brisures spontanées de symétrie, spectroscopie des noyaux "mous", isomérismes, dynamique de la fission,...*

*Dans cette Ecole, ces problèmes ont ainsi été abordés dans le cadre d'approches phénoménologiques par Z. Szymanski ou d'approches microscopiques de champ moyen et au-delà (méthode de la coordonnée génératrice ou sa réduction à un hamiltonien collectif) par J.F. Berger et P.H. Heenen. Les développements récents concernant les méthodes algébriques (bosons en interaction,...) qui résultent de concepts de symétries dynamiques mais que l'on peut également appréhender en termes de modèle en couches ont été examinés par K. Heyde.*

*Savoir quelles sont les informations physiques contenues dans les spectres de rayonnement gamma et savoir les extraire est un art que nous a dévoilé B. Haas qui nous a présenté également le projet EUROGAM et les perspectives bientôt offertes par ce nouvel outil. Dans une revue expérimentale portant sur la super-déformation R. Janssens a fait le point sur un domaine particulièrement actif actuellement.*

*Les principales propriétés des isomères de fission, maillon essentiel dans l'étude de la structure nucléaire à grande élongation, ont été étudiées par D. Paya. Les isomères de forme et isomères-K pourraient présenter des caractéristiques intéressantes comme réservoir pour créer une inversion de population nucléaire. Leur utilisation potentielle dans la réalisation de lasers gamma a été abordée par D. Gogny.*

*La détermination des formes nucléaires peut également mettre en jeu des techniques expérimentales faisant largement appel à la Physique Atomique. Cet aspect a été développé dans le cours de G. Huber.*

*Enfin, comme il est souvent d'usage à l'Ecole Joliot-Curie, une partie de la session a été consacrée à un second thème qui permette une ouverture vers d'autres champs de la Physique. Dans cet esprit, S. Bjørnholm et M. Brack nous ont parlé, tant d'un point de vue expérimental que théorique, des agrégats métalliques dont la structure présente un grand nombre d'analogies, mais également des différences, avec celle du noyau atomique.*

*L'ensemble des cours et des discussions, ainsi que la table ronde animée par P. Bonche, ont renvoyé l'image d'un domaine de recherche très actif où le dialogue entre théoriciens et expérimentateurs est particulièrement fécond.*

*Si le dynamisme d'une discipline se mesure à sa capacité d'attirer des jeunes, nous sommes heureux de constater qu'environ 40% des participants préparaient une thèse ou l'avaient soutenue depuis peu. Cette année encore l'Ecole aura bien rempli son double rôle de formation des jeunes chercheurs, d'approfondissement et/ou de formation permanente pour les plus expérimentés.*

*Le succès de l'Ecole doit beaucoup à la compétence, au dévouement et à la gentillesse de Mlle J. Garrabos et Mme M. Gardrat du CEN de Bordeaux et de Mme S. Gozlan de l'IN2P3. Qu'elles trouvent ici l'expression de notre gratitude.*

*C'est également un plaisir de remercier le personnel et M. Pouget, Directeur du Centre "Arts et Vie" de Maubuisson, pour l'accueil et les excellentes conditions de travail qu'ils nous réservent.*

*L'Université Bordeaux I a assuré l'édition des cours de l'Ecole 1991. Que la Présidence et les services concernés trouvent ici l'expression de notre reconnaissance.*

*Cette année encore, le soutien de l'IN2P3, de la DSM du CEA et du FNRS belge ne nous a pas fait défaut. Nous sommes redevables à leurs responsables de contribuer aussi au développement de l'Ecole Internationale Joliot-Curie de Physique Nucléaire.*

*Pour le Comité d'Organisation  
Y. ABGRALL*

# Highly Deformed Nuclei at High Spin

Z. Szymański

*Institute of Theoretical Physics,  
Warsaw University, Warsaw, Poland*

## 1 Elements of Physics

Rotational bands can occur in principle on top of an arbitrary quantal state of a nucleus as long, as its intrinsic structure is deformed i.e. corresponds to a nonspherical distribution of nuclear matter. In the variety of all possible nuclear shapes the axially symmetric ones are most common and best known. The energies of the rotational states in one band obey the " $I(I+1)$  rule" i.e. the relation

$$E_I = \frac{\hbar^2}{2\mathcal{J}} I(I+1) \quad (1)$$

with angular momentum  $I$  changing in the range  $I_0, I_0 + 1, I_0 + 2, \dots$  or else  $I_0, I_0 + 2, I_0 + 4, \dots$  and  $I_0 + 1, I_0 + 3, \dots$  if the two parts of the band are treated separately as two distinct bands. Here,  $I_0$  is determined by the intrinsic state on top of which the band is built (often called a bandhead). The proportionality coefficient in eq. (1) defines the nuclear moment of inertia  $\mathcal{J}$  which will be discussed more extensively later.

We shall not go into the details in the physical description of rotational bands in nuclei at low angular momenta. Instead, we shall show an example of the bands in one nucleus at low energy and low angular momenta. Fig. 1.1 illustrates the low lying spectrum in the nucleus  $^{232}\text{Th}$ . Three well developed rotational bands are built on the ground-state, the axially symmetric vibrational state  $0^+$  (beta vibration), and the  $2^+$  bandhead assigned as a nonaxial vibration (gamma vibration). The  $4^+$  and  $6^+$  bandheads may correspond to the higher vibrational excitations (ref. [1]).

A most commonly known quantal picture of the rotational states has been suggested by A.Bohr and B.R.Mottelson [2-4] in terms of a particle-rotor model. The

232 Th

<u>24°</u>	<u>3619</u>			
		<u>20°</u>	<u>3248</u>	
<u>22°</u>	<u>3164</u>			
		<u>18°</u>	<u>2831</u>	
<u>20°</u>	<u>2691.4</u>			<u>18°</u>
				<u>2766.1</u>
		<u>16°</u>	<u>2440.3</u>	
				<u>16°</u>
<u>18°</u>	<u>2262.4</u>			<u>2445.3</u>
		<u>14°</u>	<u>2080.3</u>	
				<u>14°</u>
<u>16°</u>	<u>1858.7</u>			<u>2117.1</u>
		<u>12°</u>	<u>1754.7</u>	
				<u>12°</u>
<u>14°</u>	<u>1482.5</u>			<u>1801.4</u>
		<u>10°</u>	<u>1467.5</u>	
				<u>11°</u>
				<u>-164.1</u>
				<u>10°</u>
				<u>1513.0</u>
				<u>9°</u>
				<u>-137.1</u>
		<u>8°</u>	<u>1222.3</u>	
				<u>8°</u>
<u>12°</u>	<u>1137.1</u>			<u>1260.7</u>
		<u>6°</u>	<u>1023.4</u>	
				<u>7°</u>
				<u>-114.2</u>
		<u>4°</u>	<u>873.1</u>	
				<u>6°</u>
<u>10°</u>	<u>826.8</u>			<u>1051.2</u>
		<u>2°</u>	<u>774.5</u>	
				<u>5°</u>
				<u>960.3</u>
		<u>0°</u>	<u>730.6</u>	
				<u>4°</u>
				<u>829.7</u>
<u>8°</u>	<u>556.9</u>			<u>3°</u>
				<u>785.5</u>
				<u>2°</u>
<u>6°</u>	<u>333.2</u>	<u>0°</u>		
				<u>2°</u>
<u>4°</u>	<u>162.0</u>			
				<u>4°</u>
<u>2°</u>	<u>69.4</u>			
<u>0°</u>	<u>0</u>			

Fig. 1.1

corresponding approximate wave function has the structure of a product

$$\Psi(x) = D_{MK}^I(\alpha, \beta, \gamma)\chi_K(x') \quad (2)$$

where  $x(\equiv x_1, x_2, x_3)$  refers to all coordinates fixed in space,  $x'(\equiv x'_1, x'_2, x'_3)$  are coordinates related to the nuclear principal axes and  $(\alpha, \beta, \gamma)$  denote the Euler angles between the two reference systems. Quantity  $D_{MK}^I(\alpha, \beta, \gamma)$  denotes a Wigner function for finite rotations characterised by the total spin (i.e. the total angular momentum)  $I$  with  $M$  and  $K$  denoting its projections on the quantisation axes  $x_3$  and  $x'_3$  of the laboratory and body-fixed frames, respectively. Wave function (2) leads to the  $I(I+1)$  rule described by eq. (1). There appears, however, one important exception in odd- $A$  nuclei for  $K = 1/2$  where formula (1) has to be modified. Thus a more general formula reads (cf. e.g. ref. [4]):

$$E_I = \frac{\hbar^2}{2\mathcal{J}} \left\{ I(I+1) + (-1)^{I+1/2} (I+1/2) a \delta_{K1/2} \right\} \quad (3)$$

The appearance of the second term is connected first of all with the freedom in the choice of the positive direction along the  $x'_3$ -axis and, second, with the coupling between the  $K = 1/2$  and  $K = -1/2$  components by the angular momentum operator  $j_+$ . This leads to a decoupling of the  $K = 1/2$  orbit from rotation. Parameter  $a$  called the decoupling parameter can be expressed as

$$a = -\langle K = 1/2 | j_+ | \overline{K = 1/2} \rangle \quad (4)$$

the bar over the state  $|\overline{K = 1/2}\rangle$  denoting time reversal.

Let us now come to the discussion of nuclear rotation in terms of the quantal structure often referred to as the intrinsic structure as contrasted to the external rotation. This is done by an approximate semiclassical procedure called the cranking model [5]. The nucleus is rotated externally with constant rotational frequency  $\omega$  (i.e. angular velocity) about an axis fixed in space (say, the  $x_1$ -axis). A relation between the nuclear Hamiltonian  $H$  and that in the rotating system of reference  $H^\omega$  (called the cranking Hamiltonian) is given by classical mechanics (see e.g. ref. [6])

$$H^\omega = H - \omega J_1 \hbar \quad (5)$$

where  $J_1$  is the component of nuclear angular momentum along the rotation axis. Eigenvalues  $E^\omega$  of  $H^\omega$  (called Routhians) and eigenstates  $|\Psi^\omega\rangle$  describe the nucleus in a rotating system. The total angular momentum  $I$  is given in this model as

$$I = \langle \Psi^\omega | J_1 | \Psi^\omega \rangle \quad (6)$$

while the total energy

$$E = \langle \Psi^\omega | H | \Psi^\omega \rangle = E^\omega + \hbar I \omega \quad (7)$$

may be treated as function of  $I$  with  $\omega$  determined by the solution of eq.(1.6) with respect to  $\omega$ . Quantities  $\omega$  and  $I$  are canonically conjugate i.e.

$$\hbar \omega = \frac{dE}{dI} \quad (8)$$

and

$$\hbar I = -\frac{dE^\omega}{d\omega} \quad (9)$$

Let us now observe that the rotation of the system about an  $x_1$ -axis through an angle  $180^\circ$  leaves the cranking Hamiltonian invariant (if  $H$  itself has this property!). Thus an eigenvalue  $r = \exp(-i\pi\alpha)$  of the operator

$$R = \exp(-i\pi J_1) \quad (10)$$

is a good quantum number. It is called signature. We have the following relations between  $r$  and the allowed angular momentum  $I$  in the band

$$\begin{aligned} r &= +1 \quad (\alpha = 0); & I &= 0, 2, 4, \dots \\ r &= -1 \quad (\alpha = 1); & I &= 1, 3, 5, \dots \\ r &= -i \quad (\alpha = 1/2); & I &= 1/2, 5/2, 9/2, \dots \\ r &= +i \quad (\alpha = -1/2); & I &= 3/2, 7/2, 11/2, \dots \end{aligned} \quad (11)$$

It is just the signature quantum number that suggests to treat the rotational band  $I_0, I_0 + 1, I_0 + 2, \dots$  rather as two distinct bands with different signatures.

Let us come now to the moments of inertia. Actually two different moments of inertia may be useful in the description of bands at high angular momentum [7]. We define the kinematical moment of inertia

$$\mathcal{J}^{(1)} = I\hbar/\omega = (\hbar^2/2) \left( \frac{dE}{dI^2} \right)^{-1} \quad (12)$$

and the dynamical moment of inertia

$$\mathcal{J}^{(2)} = \hbar(dI/d\omega) = \hbar^2 \left( \frac{d^2E}{dI^2} \right)^{-1} \quad (13)$$

Obviously, for a rigid-body rotation defined by

$$E = \frac{\hbar^2}{2\mathcal{J}_0} I^2 \quad (14)$$

both moments of inertia coincide

$$\mathcal{J}^{(1)} = \mathcal{J}^{(2)} = \mathcal{J}_0 \quad (15)$$

The behaviour of the two moments of inertia  $\mathcal{J}^{(0)}$  and  $\mathcal{J}^{(2)}$  along the rotational band provides a very instructive insight into the properties of nuclei rotating with high angular momentum. Below, only two examples are given. Fig. 1.2a) illustrates the behaviour in the curve of  $\mathcal{J}^{(1)}$  versus  $\omega$  for the band in  $^{156}\text{Dy}$ . The multivalued dependence in the region around  $\omega = 0.3 \text{ MeV}/\hbar$  corresponds to the crossing between the two orbitals (i.e. two Routhian curves cross at certain  $\omega_{\text{cross}}$ ) lying on the yrast line. Since  $\omega$  is determined as a slope in the curve of energy  $E$  as function of  $I$  (cf. eq. (8)) the kinematical moment of inertia  $\mathcal{J}^{(1)}$  undergoes a sharp change (with  $\Delta\omega < 0$  locally) bending back in the plane of  $\mathcal{J}^{(1)}$  versus  $\omega$ . This behaviour is often referred to as backbending [9]. The dynamical moment of inertia  $\mathcal{J}^{(2)}$  exhibits even more rapid changes at the crossing point. If the crossing were ideally sharp the derivative  $dI/d\omega$  would become singular with a jump from  $+\infty$  down to  $-\infty$ . This is illustrated in Fig. 1.2b). Generally speaking all the configurations allowing for a rapid alignment in angular momentum give a large, positive contribution to  $\mathcal{J}^{(2)}$  according to eq. (13). On the other hand, if at certain region the nuclear configurations have a structure of closed shells, or subshells (or, in other words, there are no more orbits around the Fermi surface carrying large changes in  $\langle \mathcal{J}_1 \rangle$ ) then the angular momentum does not increase fast enough with  $\omega$  and, consequently, the quantity  $\mathcal{J}^{(2)}$  decreases in this region. Let us compare for example the superdeformed bands in the two neighbouring nuclei  $^{152}\text{Dy}$  and  $^{150}\text{Gd}$  (see Fig. 1.3). The  $\mathcal{J}^{(2)}$  moment of inertia in  $^{152}\text{Dy}$  is roughly constant while in  $^{150}\text{Gd}$  a rapid decrease in  $\mathcal{J}^{(2)}$  versus  $\omega$  can be seen. Fig. 1.3b) illustrates the orbit occupation of Routhians by protons. One can see that in  $^{150}\text{Gd}$  where the 64 protons are occupied a rather wide gap appears so that no more aligned orbits can be found below the Fermi surface. This situation is contrasted with  $^{152}\text{Dy}$  where the occupation of the 651 3/2 orbit leads to a rapid increase in the aligned angular momentum thus restoring the constant value of  $\mathcal{J}^{(2)}$ .

We shall only briefly mention two other phenomena that can occur in the domain of fast rotation: the band termination and the noncollective rotation. If the prolate nucleus which is originally axially symmetric (say, with respect to the  $x'_3$ -axis) rotates



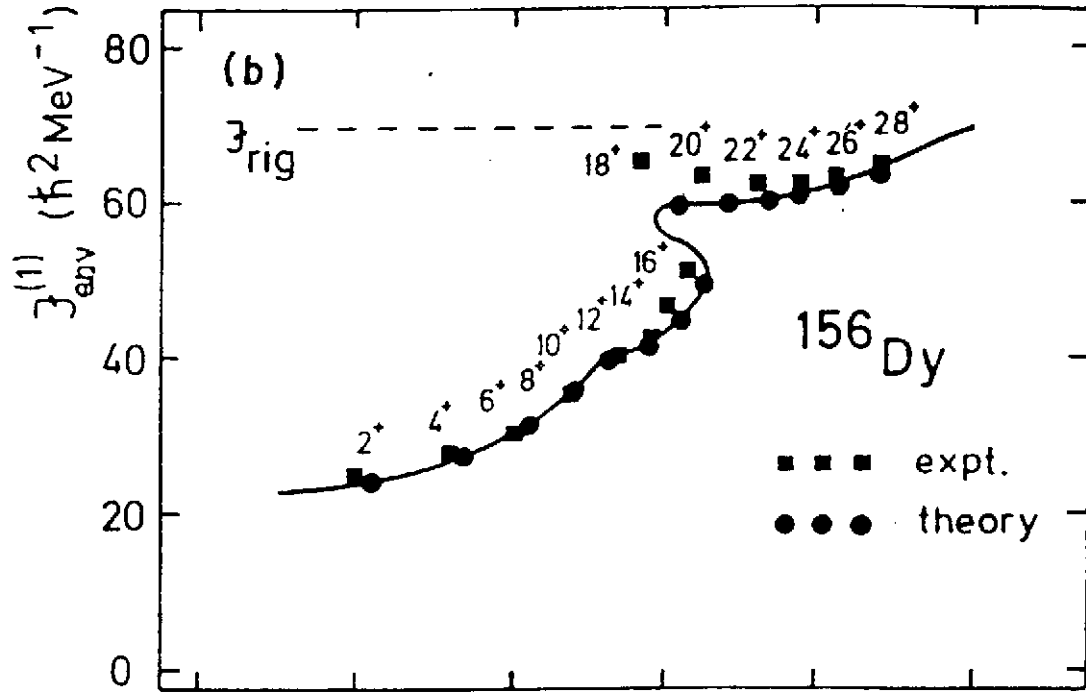


Fig. 1.2a

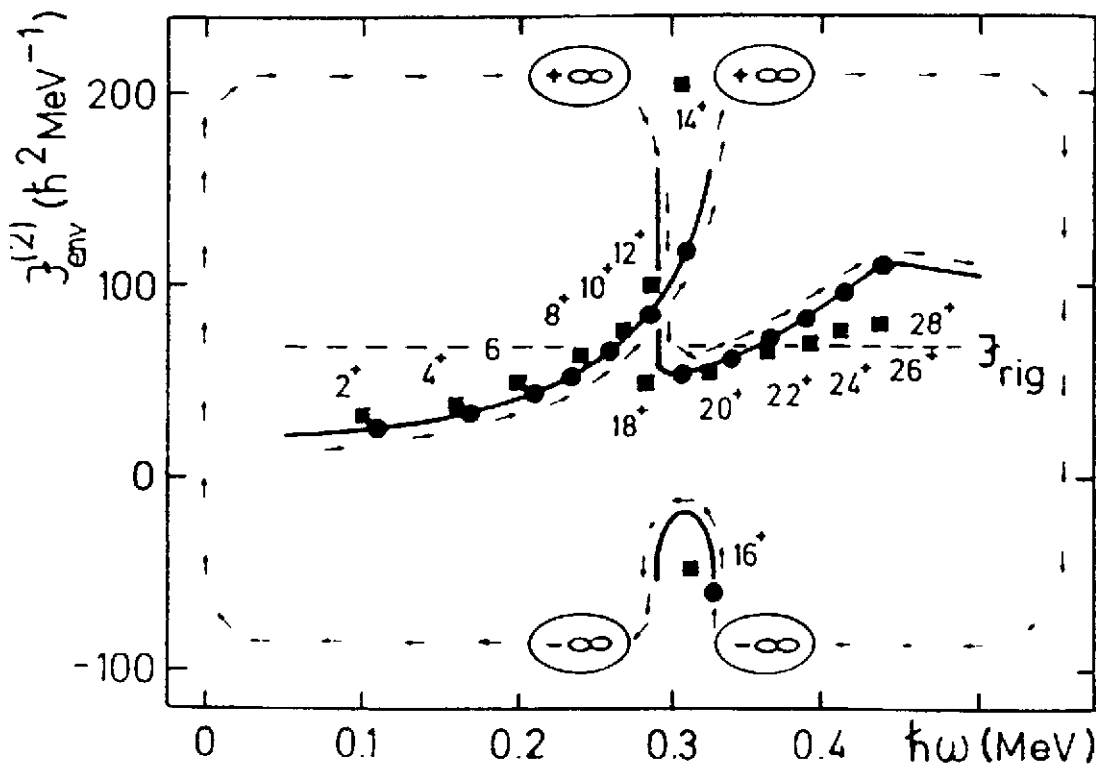


Fig. 1.2b

Fig. 1.3a

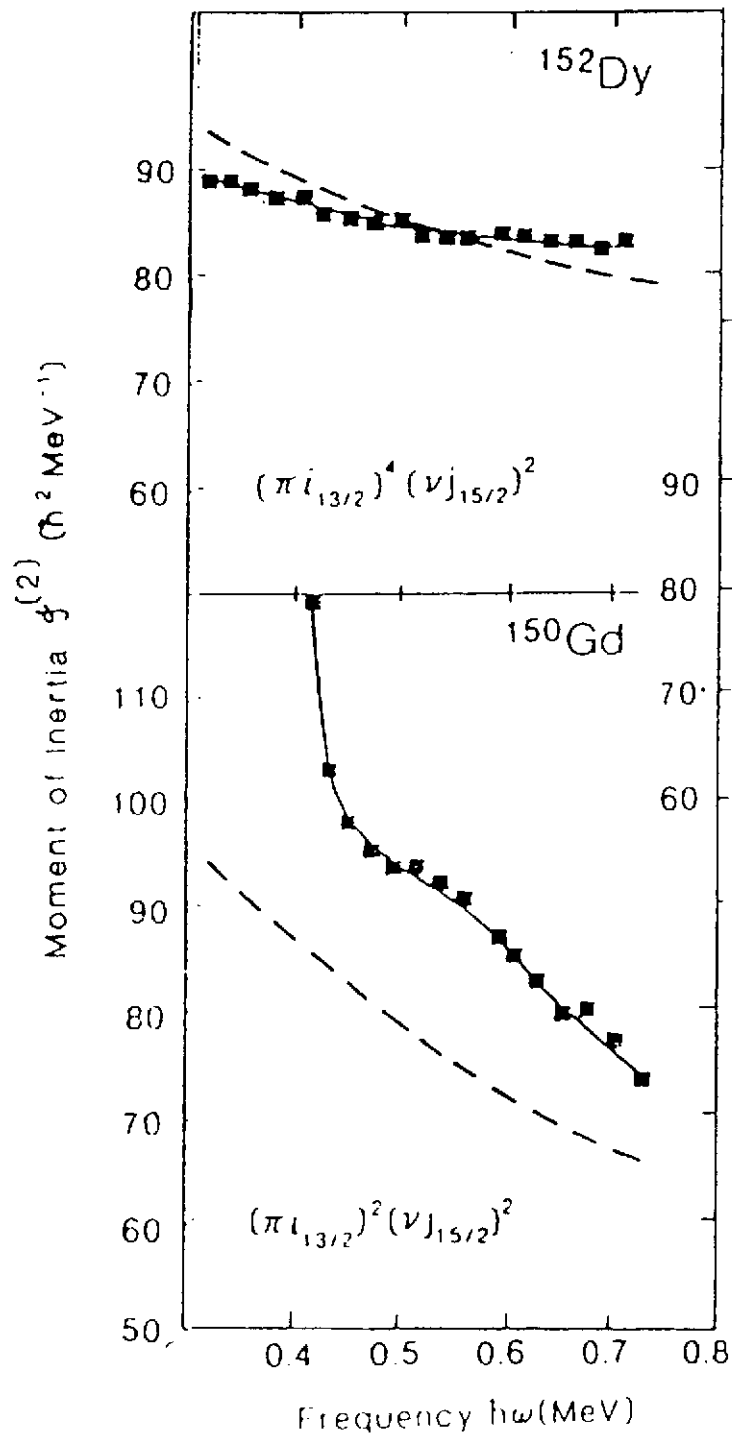
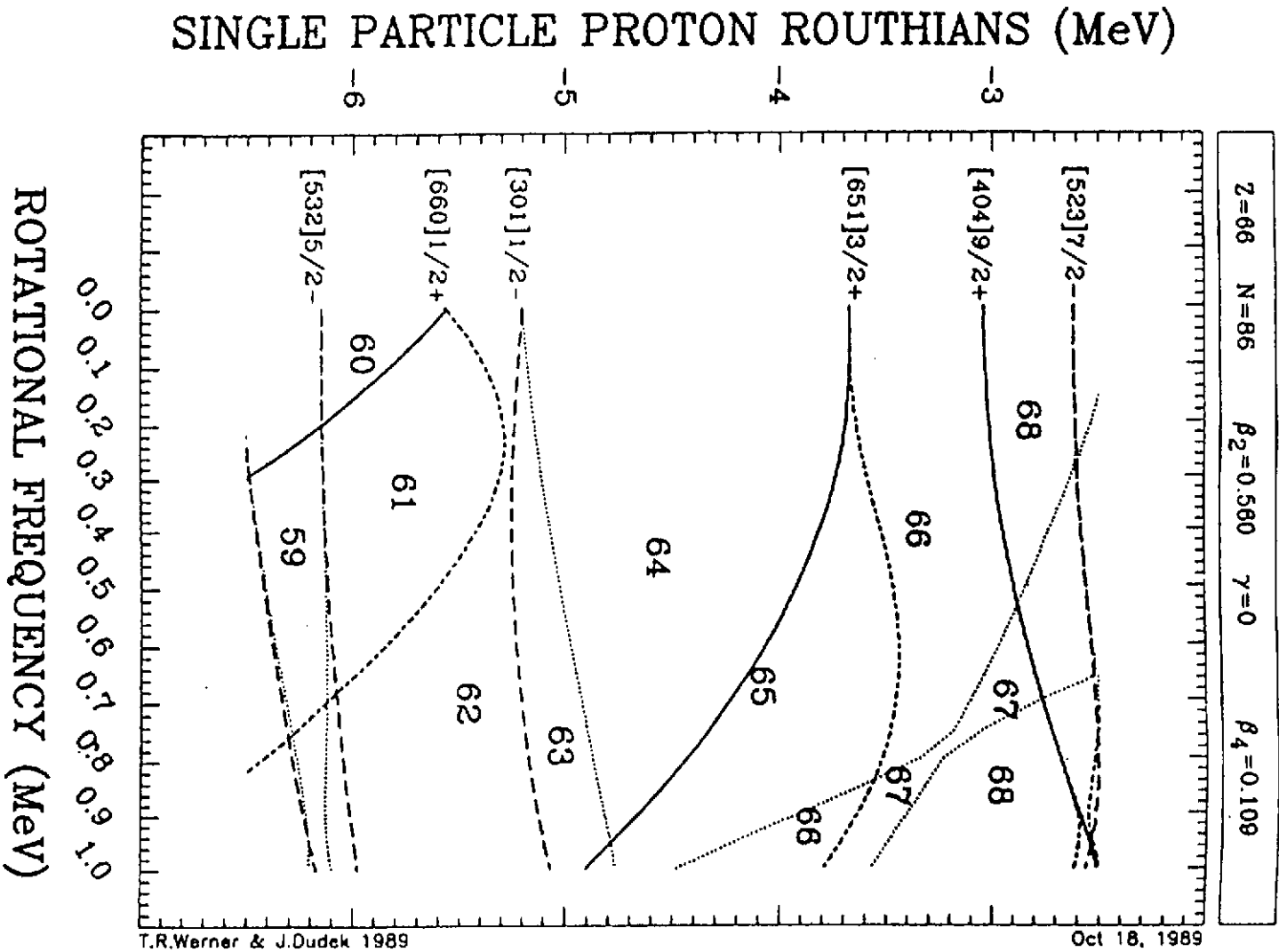


Fig. 1.3b



faster and faster about an axis perpendicular to the  $x'_3$ -axis (say, the  $x_1 = x'_1$ -axis) it may exhibit a tendency of adjusting its shape by attempting to locate more and more of its mass in the  $x'_2x'_3$ -plane. The resulting limiting value (band termination) occurs when the shape of the nucleus becomes axially symmetric (and generally oblate) with respect to the  $x'_1$ -axis (i.e. the rotation axis). Further collective rotation is no more possible. Further increase in the angular momentum above the point of band termination is only possible when the nucleonic configuration change. This single-particle mechanism of gaining angular momentum has, therefore, a less regular character corresponding to its single-particle structure. In particular, some isomeric states ("yrast traps") are possible in this region. We shall not deal with the last two phenomena as they seem to be irrelevant in the region of very much deformed nuclei that rotate fast (i.e. in the region of superdeformation).

## 2 Shell Structure

In order to discuss the possible onset of the very large deformations in nuclei induced by a fast rotation it is instructive to consider first the behaviour of an average nuclear system (i.e. independent of the detailed nucleonic configurations and their quantal structure). We shall thus consider first a rotation in the framework of classical physics and introduce a finite portion of nuclear matter which is able to respond to rotation mostly by changing its shape [11]. The centrifugal forces tend to deform the nucleus by locating as much mass as possible far from the rotation axis and compete with surface tension attempting to restore spherical shape. In addition, the tendency of deforming the nucleus is helped by the Coulomb repulsion between the protons. As a result of these tendencies the nucleus which is spherical at  $I = 0$  becomes oblate deformed and increases its deformation in the region of  $I$  between  $I = 0$  and  $I = I_{crit}$ . At certain critical value  $I_{crit}$  of angular momentum the system with oblate shape becomes unstable in favor of triaxial distortions tending finally (with further increase of  $I$ ) to the very elongated (prolate) shapes. This point can be considered as a transition to the superdeformed shape of an average nucleus described in terms of a rotating liquid drop. Some details of the above approach have been described in a lecture presented couple of years ago at this School [12]. The transition described above is well known in hydrodynamics as the Jacobi instability and was commonly applied in the investigations of the shapes in the rotating astronomical objects such as stars, planets, asteroids etc. (for some comparisons with nuclei see e.g. the reviews [12] and [13]). The astronomical objects are known to be oblate deformed in the

Table 2.1

=====

Typical Deformations.

Planets	$\beta$	Nuclei (A)	$\beta$
Mercury	0.0	(20)Ne	0.55
Venus	0.0	(156)Gd	0.25
Earth	-0.0026	(160)Dy	0.26
Moon	-0.0021	(170)Yb	0.28
Mars	-0.0062	(232)Th	0.20
Jupiter	-0.0671	(238)U	0.22
Saturn	-0.107	(244)Pu	0.23
Uranus	-0.025	(260)Fm	0.23
Pluto	?		
(some triaxial shapes):			
Satellites	(km)	Nuclei	(fm)
(Martian)			
Phobos	27x31.4x19.2	(54)Mg	4.62 3.33x2.67
Deimos	15x12x11		
(Jovian)			
Amalthea	135x85x77		
Asteroids			
Metis	122x95x55		
Kaliope	108x80x65		
Laetitia	128x75x42		

domain of a slow rotation. The existence of double stars may be considered as a result of fission following the formation of large elongated shapes due to the Jacobi instability. Some examples of comparison between the astronomical objects and nuclei are illustrated in Table 2.1 (taken from ref. [13]).

This beautiful analogy between stars, planets etc. from one side and atomic nuclei from the other should not perhaps be pushed too far. The main difference between the two physical systems lies in the obviously quantal structure of the physical laws governing atomic nuclei while astronomical objects remain classical.

It appears that the bunching in the quantal energy levels into shells has an important effect on nuclear structure and can modify essentially the response of the nuclear system to a fast rotation. Indeed it is the density of quantal levels near the Fermi surface, or — more generally — near the yrast line that is crucial for the argument. If the number of nucleons in a given nucleus corresponds at certain deformation to the very low local density of levels the system is relatively more stable and the formation of the exotic state (like the superdeformed one) becomes possible. In the situation of the extreme bunching of levels the corresponding numbers of nucleons may be considered as magic ones which are especially favourable for the formation of stable (or relatively more stable as compared to its neighbourhood) exotic states. Let us study this effect in a simplest system of independent nucleons in a potential of a nonrotating three dimensional anisotropic h.o. (=harmonic oscillator). It appears that even at the highest angular momenta seen in experiments so far the resulting rotational frequency  $\omega$  is in most cases appreciably lower than the frequencies  $\omega_1$ ,  $\omega_2$  and  $\omega_3$  characterising the h.o. potential. Thus in the first rough approximation we can disregard entirely the effect of rotation on the shell structure. The single-particle energies of a nucleon

$$e_{n_1 n_2 n_3} = \hbar\omega_1(n_1 + 1/2) + \hbar\omega_2(n_2 + 1/2) + \hbar\omega_3(n_3 + 1/2) \quad (16)$$

are characterised by the three frequencies  $\omega_i$  and three quantum numbers  $n_i$ , ( $i = 1, 2, 3$ ). One may employ the Nilsson deformation parameters  $\epsilon$  and  $\gamma$  and express the three h.o. frequencies as

$$\begin{aligned} \omega_1 &= \omega_0(\epsilon, \gamma) \left\{ 1 + (1/3)\epsilon \cos \gamma + (\epsilon/\sqrt{3}) \sin \gamma \right\} \\ \omega_2 &= \omega_0(\epsilon, \gamma) \left\{ 1 + (1/3)\epsilon \cos \gamma - (\epsilon/\sqrt{3}) \sin \gamma \right\} \\ \omega_3 &= \omega_0(\epsilon, \gamma) \left\{ 1 - (2/3)\epsilon \cos \gamma \right\} \end{aligned} \quad (17)$$

where the dependence of  $\omega_0$  on  $\epsilon$  and  $\gamma$  follows from the volume conservation condition

$$\omega_1 \omega_2 \omega_3 = \omega_0^3 \quad (18)$$

with  $\omega_0$  being a constant independent of  $\epsilon$  and  $\gamma$ .

The Bohr and Mottelson condition (ref. [4]) for the existence of the shell structure leads in this case to the requirement that the three h.o. frequencies  $\omega_i$  are proportional to the three (generally not very large) integer numbers

$$\omega_1 : \omega_2 : \omega_3 = a : b : c \quad (19)$$

It is very easy to see that the single-particle states with the same value of the quantum number  $N_{shell}$  defined as (ref. [4])

$$N_{shell} = an_1 + bn_2 + cn_3 \quad (20)$$

have the same energy. Thus the quantum number  $N_{shell}$  determines a set of degenerate states i.e.a shell for the deformation specified by eq. (19). Obviously further symmetries of the system are able to increase the degeneracy in the shell and, therefore, to make the bunching of levels even more pronounced. Thus in the case of spherical symmetry,  $a = b = c = 1$  the harmonic oscillator becomes isotropic and the quantum number  $N_{shell}$  overlaps with the main h.o. quantum number  $N$ :

$$N_{shell} = N = n_1 + n_2 + n_3 \quad (21)$$

The corresponding magic numbers define the closed shells with number of nucleons 2, 8, 20, 40, ...

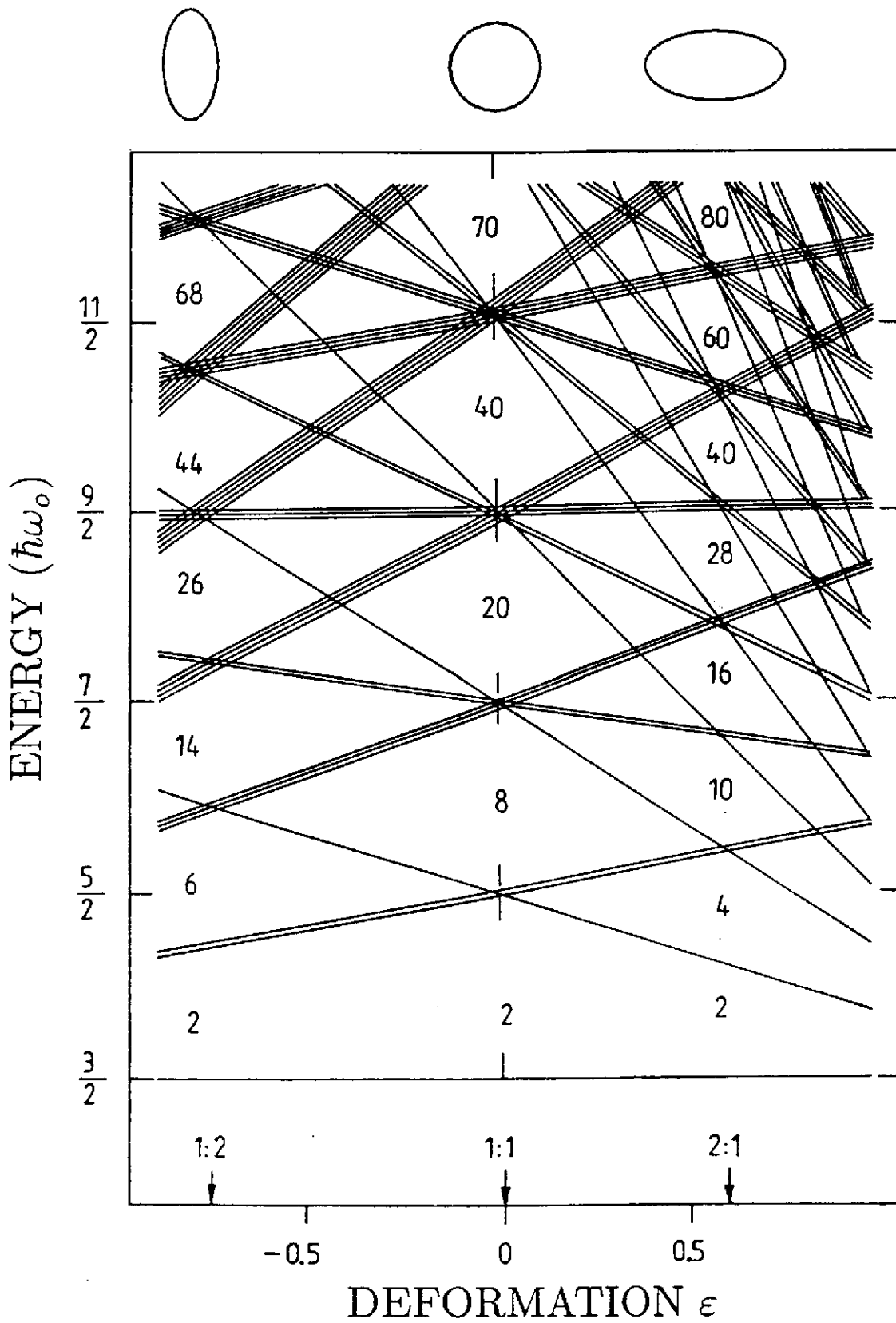
The case of axial symmetry leads also to some simplifications although the corresponding shell structure exhibits less degeneracies than in the isotropic case. Here, we can distinguish two possible chains of shapes with different shell structures, the prolate ones with

$$\begin{aligned} (a, b, c) &= (2, 2, 1) && \text{(superdeformed)} \\ &= (3, 3, 1) && \text{(hyperdeformed)} \\ &\dots && \text{(etc.)} \end{aligned}$$

and the oblate ones

$$\begin{aligned} (a, b, c) &= (1, 1, 2) && \text{(we may call it superoblate)} \\ &= (1, 1, 3) && \text{(we may call it hyperoblate)} \\ &\dots && \text{(etc.)} \end{aligned}$$

Fig. 2.1





The series of magic numbers corresponding to the closed (deformed) shells determined by the sets of numbers  $(a, b, c)$  are:

$$\begin{aligned} 2, 4, 10, 16, \dots & \text{ (superdeformed)} \\ 2, 4, 6, 12, \dots & \text{ (hiperdeformed)} \end{aligned}$$

and

$$\begin{aligned} 2, 6, 14, 26, \dots & \text{ (superoblate)} \\ 2, 6, 12, 22, \dots & \text{ (hiperoblate)} \\ \dots\dots\dots & \text{ (etc.)} \end{aligned}$$

Fig. 2.1 illustrates the h.o. levels plotted versus  $\epsilon$  for the axially symmetric shapes ( $\gamma = 0^\circ$  or  $60^\circ$ ). The spherical, superdeformed and superoblate shells can be easily identified.

Let us now investigate some of the possible triaxial cases leading also to some shell structure. In these cases, however, the shell effects become relatively weaker as there is less symmetry in the configurations leading to the less degenerate shells. Some configurations that seem to be simplest in this case may be called supertriaxial ( $\omega_1 : \omega_2 : \omega_3 = 4 : 3 : 2$ ), hipertriaxial ( $3 : 2 : 1$ ) etc. They define magic numbers as

$$\begin{aligned} 2, 2, 4, 6, 10, \dots & \text{ (supertraxial)} \\ 2, 4, 8, 14, 20, \dots & \text{ (hipertriaxial)} \\ \dots\dots\dots & \text{ (etc.)} \end{aligned}$$

Table 2.2 summarises all the deformed shells in the anisotropic harmonic oscillator which were discussed above.

All the possibilities for the formation of the exotic states presented so far correspond to the ideal case of the nuclear potential of a harmonic oscillator. In order to search for the more realistic description more refined potentials such as those of the modified h.o. (Nilsson), Woods-Saxon, folded Yukawa etc. (if not even more basic potentials generated by the Hartree-Fock procedure) should be employed. Some calculations in this direction have already been started (cf. refs. [14],[15]). We shall not go into detailed descriptions of these investigations. Instead, we would like to consider briefly a possibility of a simplified treatment that follows from the introduction of a specific symmetry in the nuclear systems, namely the pseudospin and pseudo-SU(3) symmetries. The natural symmetry related to the pure harmonic oscillator is as well

Table 2.2.

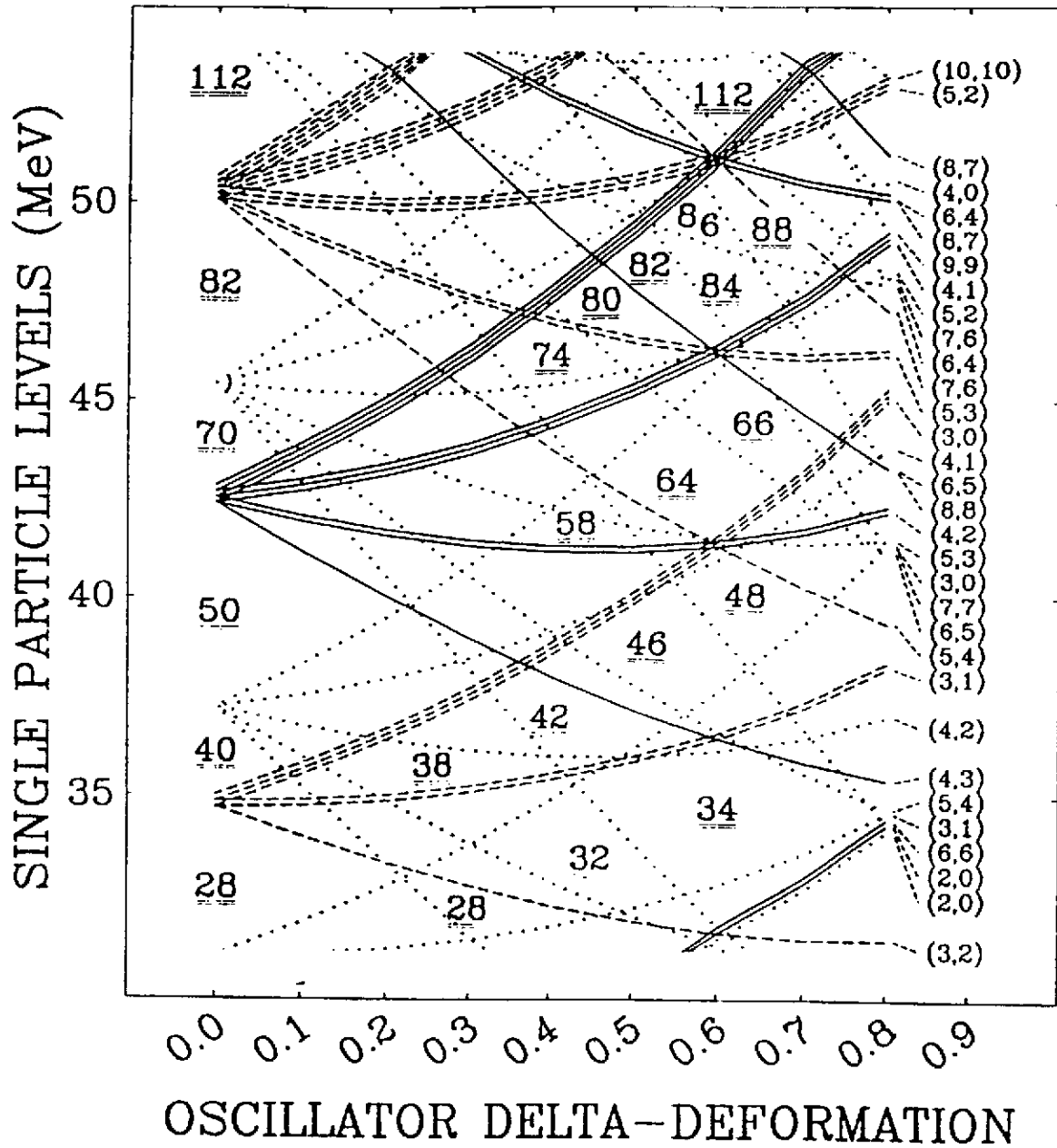
=====

Shell Structure in The Anisotropic Harmonic Oscillator.

	a:b:c	$\epsilon$	$\gamma$	Magic numbers
spherical	1:1:1	0.0	$0^\circ$	2, 8, 20, 40, 70, 112, 156, ...
superdeformed	2:2:1	0.600	$0^\circ$	2, 4, 10, 16, 28, 40, 60, ...
hyperdeformed	3:3:1	0.657	$0^\circ$	2, 4, 6, 12, 18, 24, 36, 48, 60, ...
.....	.....	.....	.....	.....
superoblate	1:1:2	0.750	$60^\circ$	2, 6, 14, 26, 44, 68, 100, ...
hyperoblate	1:1:3	1.200	$60^\circ$	2, 6, 12, 22, 36, 54, 78, 108, ...
.....	.....	.....	.....	.....
supertriaxial	4:3:2	0.577	$30^\circ$	2, 4, 6, 10, 12, 18, 22, 30, 36, 46, 54, ...
hypertriaxial	3:2:1	0.839	$30^\circ$	2, 4, 8, 14, 20, 30, 44, ...
.....	.....	.....	.....	.....

Fig. 2.2

### PSEUDO-OSCILLATOR & INTRUDERS



known, the special unitary symmetry in three dimensions i.e. the  $SU(3)$  symmetry [16]. However, the main failure of the pure h.o. nuclear potential consists on the lack of possibility of including the strong  $\vec{l} \cdot \vec{s}$  coupling in the nuclear Hamiltonian. Indeed, the  $\vec{l} \cdot \vec{s}$  term in the nucleus is strong enough to be able to shift from an every N-shell one subshell of highest orbital angular momentum  $l = N$  and total angular momentum  $j = l + 1/2$  down to the lower shell. Thus for example the  $j_{15/2}$ ,  $i_{13/2}$ ,  $h_{11/2}$ , etc. orbitals are shifted down from  $N = 7$  to  $N = 6$ , from  $N = 6$  to  $N = 5$ , from  $N = 5$  to  $N = 4$  etc., respectively. These are the well-known intruder states.

If for the moment we take apart the intruder states from each shell the remaining states in each major h.o. shell  $N$  (the so called normal parity states) may be cast artificially into a new major h.o. shell  $\tilde{N}$  with  $\tilde{N} = N - 1$ . All the states  $|Nljm\rangle$  except the intruder states can thus be renamed as the states of  $|\tilde{N}\tilde{l}\tilde{j}\tilde{m}\rangle$  with the following rule

$$|Nljm\rangle \implies |\tilde{N}\tilde{l}\tilde{j}\tilde{m}\rangle$$

with

$$\begin{aligned} \tilde{N} &= N - 1 \\ \tilde{l} &= l \pm 1 \text{ (for } j = l \pm 1/2 \text{)} \\ \tilde{j} &= j \\ \tilde{m} &= m \end{aligned} \tag{22}$$

This artificial procedure proves to be fruitful in that sense that all the normal parity states can then be described by the  $\widetilde{SU}(3)$  (pseudo- $SU(3)$ ) which is nothing else as the usual  $SU(3)$  symmetry related to the renamed  $\tilde{N}$  shell (cf. refs. [17],[18]). On the other hand, the intruder states have to be added finally as other states that do not belong to the  $\widetilde{SU}(3)$  scheme. Following the above procedure one can thus plot the nuclear energy levels as functions of deformation  $\epsilon$  by employing the harmonic oscillator scheme for all the  $\tilde{N}$ -shells and finally add all the intruder states that have been originally removed from the picture [19]. Fig.2.2 has been constructed by following the above recipe. The levels shown correspond to one type of nucleons (neutrons or protons, separately). Resulting "magic" numbers of nucleons i.e. the regions of low density of levels can be read off from this picture. It can be seen that the magic numbers corresponding to the deformation range  $\epsilon \sim 0.4$  to  $0.7$  occur around nucleon numbers in the regions 28-32, 38-46, 58-66, 72-86 and finally 100-114. This explains very well the existence fo the superdeformed shape in  $^{152}\text{Dy}$  with  $\epsilon \approx 0.6$ ,  $Z = 66$  and  $N = 86$ . Similar features show up for  $Z = 80$  and  $N = 112$  i.e. around the nucleus  $^{192}\text{Hg}$ .

### 3 Symmetries

In this section we shall discuss some properties of the superdeformed rotational bands in nuclei having in mind mostly the  $A = 150$  region (i.e. roughly around  $Z \sim 66$  and  $N \sim 86$ ). The region around  $A = 190$  (with  $Z \sim 80$  and  $N \sim 110$ ) exhibits similar features.

One of the most striking phenomenon is the appearance of the identical bands in the superdeformed region in some neighbouring pairs of nuclei. The identity means that the gamma-ray energies  $E_{\gamma I}$  in one nucleus are equal to a very good approximation to the gamma-ray energies  $E'_{\gamma I'}$  in the other nucleus. Two examples of such pairs of bands are shown in Table 3.1. The pairs of identical bands are also called twin bands. The almost exact (sometimes up to a fraction of 1 keV!) overlap of the gamma-ray energies coming from neighbouring nuclei is intriguing since in general the properties of neighbouring nuclei are never similar within a precision of 1 keV.

Apart from the identical bands some other relations between the gamma-ray energies  $E_{\gamma I}$  in neighbouring nuclei have been observed. In some pairs for instance the quantities  $E_{\gamma I}$  appear to be equal to a good approximation to the arithmetic averages of the energies in the neighbouring nucleus:  $1/2(E'_{\gamma I'} + E'_{\gamma I'+2})$ . This relation is sometimes referred to as the indirect twin bands. Finally, some different type of (weighted) averages hold in corresponding pairs  $E_{\gamma I} = 3/4 E'_{\gamma I'} + 1/4 E'_{\gamma I'+2}$  (called coupled pairs). The analysis of the above relations will be the topic of our main interest in this section.

Since the phenomena mentioned above seem to be related with the pseudo- $SU(3)$  and pseudospin symmetries let us first recall the most essential features of these symmetries (cf refs. [17] and [18]). Without following the historical path in the development of the concepts of those symmetries let us start by considering the recipes for changing the labels of the usual shell-model independent-particle states into the notation of the pseudo- $SU(3)$  (i.e.  $\widetilde{SU}(3)$ ) scheme. The relabelling of the states  $|Nljm\rangle$  in a spherical potential has been already specified before (cf. eq. (22)).

Now, the degeneracy of all the states  $|\widetilde{N}\widetilde{l}\widetilde{j}\widetilde{m}\rangle$  with respect to the quantum numbers  $\widetilde{l}, \widetilde{j}$  and  $\widetilde{m}$  (but not  $\widetilde{N}$ ) is just equivalent to the assumption of the pseudo- $SU(3)$  symmetry. Obviously, the pseudo- $SU(3)$  symmetry is only a crude approximation. A less restrictive symmetry is provided by the pseudospin symmetry that requires only the degeneracy between the pairs of states  $|\widetilde{N}\widetilde{l}\widetilde{j}\widetilde{m}\rangle$  with respect to  $\widetilde{j} = \widetilde{l} \pm (1/2)$  (apart, of course, from the standard degeneracy with respect to  $\widetilde{m}$ ). Thus for example within the pseudospin symmetry the pairs of states  $(g_{7/2}, d_{5/2})$  in other notation  $(\widetilde{f}_{7/2}, \widetilde{f}_{5/2})$

Table 3.1

=====

Examples of Identical Bands.  
 (experimental gamma-ray energies in keV)

150 Gd(II)	151 Tb(I)	151 Tb(II)	152 Dy
	1432.5	1449.0	1449.4
1378.0	1380.7	1401.2	1401.7
1327.0	1330.0	1354.0	1353.0
1277.0	1278.5	1305.0	1304.7
1228.0	1228.5	1255.0	1256.0
1179.0	1178.9	1207.0	1208.7
1131.0	1130.2	1160.8	1160.8
1084.0	1082.5	1111.5	1112.7
1037.0	1034.9	1064.0	1064.8
991.0	988.7	1016.0	1017.0
944.0	942.8	969.4	970.0
901.0	898.0	923.1	923.1
857.0	854.0	875.6	876.1
813.0	811.3	829.3	829.2
771.0	769.2	783.0	783.5
	728.0	736.8	737.5
		691.9	692.2
		646.9	647.2
		602.3	602.3

are degenerate. The same holds for a pair  $(d_{3/2}, s_{1/2}) = (\widetilde{p_{3/2}}, \widetilde{p_{1/2}})$  etc. In the more restrictive case of an  $SU(3)$  symmetry all the above four states (belonging to  $N = 4$  i.e.  $\tilde{N} = 3$ ) are degenerate. Of course the last symmetry is valid only very approximately in nuclei.

Now, it turns out that the  $SU(3)$  symmetry can be approximately extended into the deformed potentials. Namely the standard Nilsson asymptotic representation  $|Nn_3\Lambda l\rangle$  transforms as

$$|Nn_3\Lambda\Omega\rangle \Rightarrow |\tilde{N}\tilde{n}_3\tilde{\Lambda}\tilde{\Omega}\rangle$$

with

$$\begin{aligned} \tilde{N} &= N - 1 \\ \tilde{n}_3 &= n_3 \\ \tilde{\Lambda} &= \Lambda \pm 1 \text{ (for } \Omega = \Lambda \pm 1/2) \\ \tilde{\Omega} &= \Omega \end{aligned} \tag{23}$$

Thus for example some of the  $N = 5$  ( $\tilde{N} = 4$ ) states transform as

$$\begin{aligned} 541 \ 1/2 &\longrightarrow 44\widetilde{0} \ 1/2 \\ 530 \ 1/2 &\longrightarrow 43\widetilde{1} \ 1/2 \\ 532 \ 3/2 &\longrightarrow 43\widetilde{1} \ 3/2 \\ 521 \ 3/2 &\longrightarrow 42\widetilde{2} \ 3/2 \quad \text{etc.} \end{aligned} \tag{24}$$

On the other hand, the intruder  $N = 5$  states: 550 1/2, 541 3/2, 532 5/2, 523 7/2, 514 9/2 and 505 11/2 have no corresponding partners in the pseudospin scheme.

Let us now see what are the quantal orbits filling in one degenerate shell in the case of a superdeformed potential ( $\epsilon = 0.6; \gamma = 0^\circ$ ) in a pseudo- $SU(3)$  representation. Let us choose for example all the states that fill in the degenerate shell just above 66 nucleons in Fig. 2.2. It is easy to see that all these states form a 2:2:1 shell characterised by the quantum number

$$\tilde{N}_{shell} = 2\tilde{n}_\perp + \tilde{n}_3 = 5 \tag{25}$$

(the tildas over all the symbols in the above equation are to remind us that we are dealing with the  $\widetilde{SU}(3)$  scheme instead of  $SU(3)$ ). It is also easy to see that these states come from three pseudo-h.o. major shells with  $N = 3, 4$  and 5. Labelling those states with quantum numbers  $(\tilde{n}_3, \tilde{n}_\perp, \tilde{\Lambda})$  which are defined as a

product of states  $|\tilde{n}_3\rangle$  of a one-dimensional h.o. along the third axis with states  $|\tilde{n}_\perp\tilde{\Lambda}\rangle$  of a two-dimensional h.o. in the  $(x'_1x'_2)$  plane we obtain the following set of states in the superdeformed shell characterised by  $\tilde{N}_{shell} = 5$  (cf. eq. (25)):

$$\begin{array}{ccccc} & & (5, 0, 0) & & \\ & & (3, 1, -1) & & (3, 1, 1) \\ (1, 2, -2) & & (1, 2, 0) & & (1, 2, 1) \end{array}$$

Including in addition the spin degeneracy  $(+1/2)$  we obtain altogether 12 states in this shell which are strictly degenerate for the pure pseudo- $SU(3)$  scheme and should lie close to each other if the pseudo- $SU(3)$  symmetry is a good approximation.

Let us now see how the existence of the identical bands can be described in terms of the particle-rotor model [21] when the odd- $A$  nucleus exhibits a  $K = 1/2$  band. Thus modified expression (3) rather than (1) should be applied. It appears that the decoupling parameter  $a$  can be calculated in a closed form in the case of a pure h.o. potential. The result is

$$a = (-1)^N \quad (26)$$

where  $N$  is the major h.o. quantum number. In the case of a pseudo- $SU(3)$  symmetry the argument goes in analogous way except that  $N$  should be replaced by  $\tilde{N} = N - 1$ . Thus in the case of a pseudo- $SU(3)$  symmetry the decoupling parameter  $a$  is equal to

$$a = (-1)^{\tilde{N}} = -(-1)^N \quad (27)$$

Now it follows from eq. (1) that the gamma-ray energies are

$$E_{\gamma I} = E_{I+2} - E_I = \frac{\hbar^2}{2\mathcal{J}}(4I + 6) \quad (28)$$

On the other hand, the gamma-ray energies in the neighbouring odd nucleus with  $K = 1/2$  have to be calculated from eq. (3)

$$E'_{\gamma I'} = \frac{\hbar^2}{2\mathcal{J}'} \{4I' + 6 + 2a(-1)^{I'+1/2}\} \quad (29)$$

Let us now assume that

$$\begin{array}{l} \mathcal{J}' = \mathcal{J} \\ a = +1 \\ I' = I + 1/2 \end{array} \quad (30)$$



In this case we obtain the relation

$$E_{\gamma I} = E'_{\gamma I'} \quad (31)$$

which is just the relation characterising the twin bands. On the other hand, if  $a = -1$  the bands are not identical but instead

$$E'_{\gamma I'} = 1/2(E_{\gamma I} + E_{\gamma I+2}) \quad (32)$$

as can be easily seen from eq. (29). The two bands are then the indirect twin bands. Finally, if the odd- $A$  band is characterised by  $K \neq 1/2$  we have  $a = 0$  and one has to apply formula (1) for both the bands in the even and odd- $A$  nuclei. In this case it is easy to deduce (all the time we assume  $\mathcal{J}' = \mathcal{J}$  and  $I' = I + 1/2$ ) that

$$E'_{\gamma I'} = 3/4 E_{\gamma I} + 1/4 E_{\gamma I+2} \quad (33)$$

This is just the case of coupled bands. One has to emphasize that relations (31), (32) and (33) are only special cases and in general no definite relations between the neighbouring bands can be observed. All the above considerations have been deduced in the framework of the particle-rotor model.

Another description of the relations between the superdeformed rotational bands discussed above can be provided in terms of the angular momentum alignment ([22],[23]) of one rotational band (say, in the odd- $A$  nucleus) relative to the neighbouring band (say, in the even nucleus). Suppose that the dynamical moment of inertia  $\mathcal{J}^{(2)}$  in a band is constant. Then the plot of angular momentum versus the gamma-ray energies  $E_{\gamma I}$  is a straight line

$$I = m E_{\gamma I} + b \quad (34)$$

where parameter  $m$  is proportional to the moment of inertia  $\mathcal{J}^{(2)}$  and parameter  $b$  is related to the alignment. It is generally agreed by the experimentalists that the consecutive gamma-ray energies  $E_{\gamma I}$  correspond to  $I$  changing in intervals of 2, i.e. form a series

$$E_{\gamma I}, E_{\gamma I+2}, E_{\gamma I+4}, \dots$$

Then taking two values differing by  $\Delta I = 2$  we obtain

$$m = \frac{2}{E_{\gamma I+2} - E_{\gamma I}} \quad (35)$$

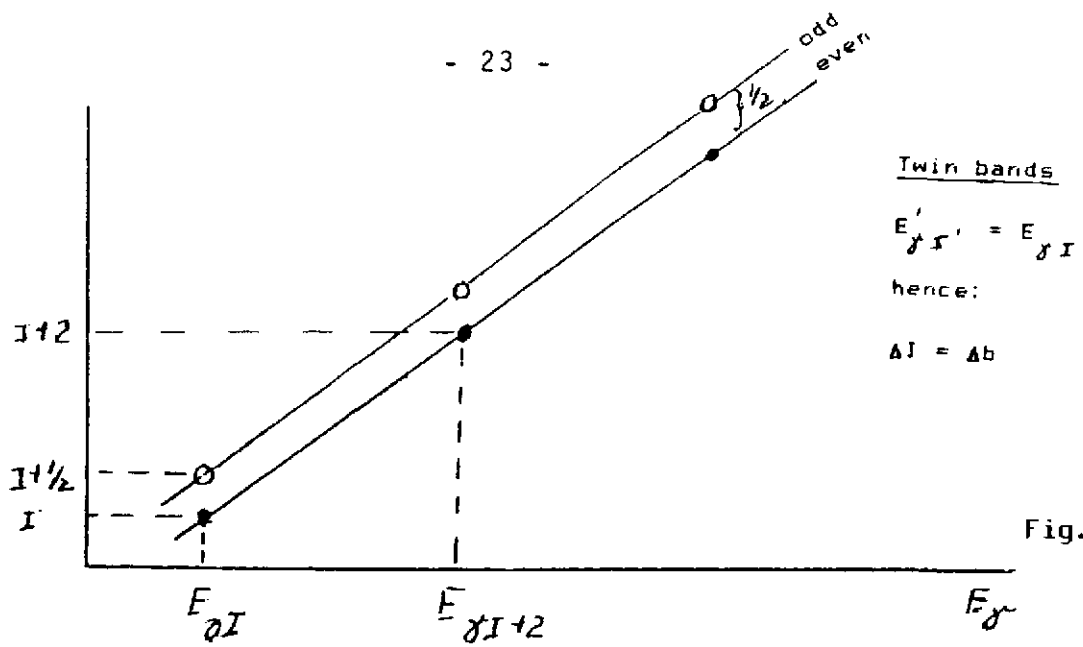


Fig. 3.1a

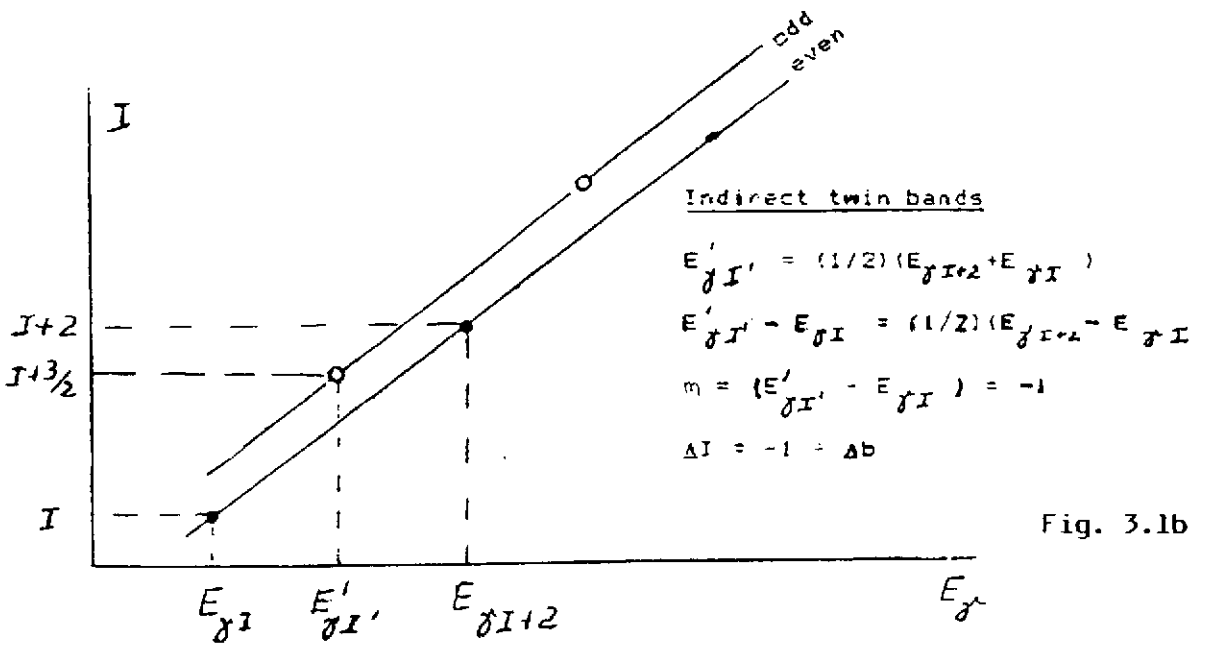


Fig. 3.1b

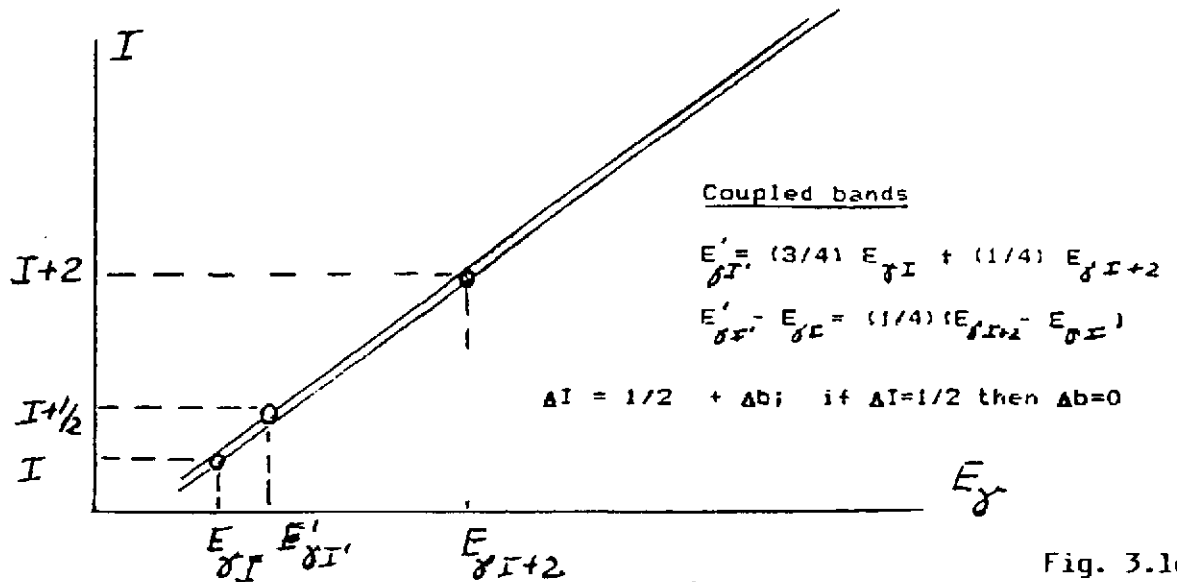


Fig. 3.1c

In the neighbouring (say, odd- $A$ ) nucleus we may expect a relation similar to that given by eq. (34) (say, valid for an even nucleus)

$$I' = mE'_{\gamma I'} + b' \quad (36)$$

where we have assumed the same moment of inertia in both the bands ( $m = m'$ ). Substraction (36) minus (34) gives

$$\Delta I = \{m(E'_{\gamma I'} - E_{\gamma I}) + \Delta b\} \text{ mod } 2 \quad (37)$$

The term mod 2 in this formula comes from the fact that  $I - I'$  is known only up to an integer multiple of 2. Here:

$$\Delta I = I' - I$$

and

$$\Delta b = b' - b$$

Eq. (37) may now be applied to the three possible cases: the twin bands, indirect twin bands and coupled bands (cf. eqs. (31), (32) and (33), respectively). The results are

$$\Delta I = \Delta b \text{ mod } 2 \quad (38)$$

for the twin bands,

$$\Delta I = (1 + \Delta b) \text{ mod } 2 \quad (39)$$

for the indirect twin bands and finally

$$\Delta I = (1/2 + \Delta b) \text{ mod } 2 \quad (40)$$

for the coupled bands. Last equation implies that  $\Delta b = 0$  if  $\Delta I$  were known to be  $\Delta I = 1/2$ . The above three possibilities are illustrated in Fig. 3.1a,b,c). Let us observe that the above considerations lead to the conclusion that in all the three above cases the alignment is quantised which seems to be an intriguing result since angular momentum projection on the  $x'_1$ -axis is defined as an expectation value only and thus should not be quantised in principle.

Finally, let us observe that the relative alignment between the two bands (36) and (34) can be also estimated from the theory employing the single-particle Routhians  $e_{\nu}^{\omega}$  as known functions of rotational frequency  $\omega$ . Indeed according to eq. (9) the slope in the Routhian curve (taken with minus sign) denotes its individual contribution

to the alignment. Thus the valence orbit in the odd-nucleus should have individual alignments

$$(j_1)_{\nu\nu} = -\frac{\partial e_{\nu}^{\omega}}{\partial \omega} \quad (41)$$

Let us observe that some definite relations for the alignment follow from the  $\widetilde{SU}(3)$  symmetry in the superdeformed bands (cf. refs. [22] and [23]). Indeed, considering an example of the  $N_{shell} = 5$  shell (cf. eq. (25) and the following text) we can conclude that the orbital part of angular momentum  $\tilde{l}_1$  cannot couple the states within one  $N_{shell}$ . In fact,  $\tilde{l}_1$  can only couple states with  $\Delta n_3 = +1$  while the states forming one shell contain only those values of  $n_3$  that differ by two units:  $\Delta n_3 = 0, 2, 4, \dots$ . Thus in the cranking Hamiltonian

$$H^{\omega} = H - \hbar\omega\tilde{j}_1 = H - \hbar\omega\tilde{l}_1 - \hbar\omega\tilde{s}_1 \quad (42)$$

only the spin part  $\tilde{s}_1$  can be active within a shell and, consequently, the resulting alignment can be only  $\pm 1/2$ . Thus in principle all the Routhian plots within the normal parity states in a superdeformed region should have the slopes ( $\frac{\partial e_{\nu}^{\omega}}{\partial \omega}$ ) equal  $-1/2$  or  $+1/2$ . This justifies the argument for the existence of the twin-, or indirect twin-bands. The above arguments are, however, only approximate since first of all the  $SU(3)$  symmetry does not hold exactly and second, there exists always a certain interaction with the intruder states which do not obey the above restrictions.

As a last topic in this section let us describe attempts to understand the phenomenon of twin bands, indirect twin bands etc. in terms of nuclear structure. The considerations discussed above give only the description of the phenomena either in terms of the decoupling parameter or else the relative alignment without really explaining why the moments of inertia in the two neighbouring bands are almost equal. Before presenting an attempt to answer this question let us see once again why this phenomenon seems to be so strange. In fact, when we add one nucleon to the rotating core several effects are expected. First of all the change in nuclear radius is expected and this should increase the moment of inertia. Simple estimates indicate that this fact should cause a change in the gamma-ray energies by an amount of the order of 10 keV i.e. one order of magnitude more than the observed differences in the twin bands. Similar effects are expected due to the polarisation of the nuclear core induced by the presence of one additional nucleon. Finally, nuclear rotation causes the alignment in nucleonic orbits which can also a priori cause differences between the even and odd- $A$  systems.

Let us now see how one can attempt to estimate some of the effects mentioned above [24],[25]. If the pseudo- $SU(3)$  is a good symmetry in the nucleus at high angular

momentum then the normal parity states in the nucleus should resemble roughly those in the harmonic oscillator. Let us first neglect the nuclear rotation. This approximation should be not so bad since even at the states with angular momentum considered as very high the corresponding angular velocity is still appreciably small as compared to the h.o. frequencies. Thus let us employ [25] an expression for the nuclear moment of inertia  $\mathcal{J}$  calculated in the nonrotating h.o. potential. The corresponding formula was obtained long ago by A. Bohr and B. R. Mottelson [26]

$$\mathcal{J} = \frac{\hbar}{2\omega_2\omega_3} \left\{ \frac{(\omega_2 + \omega_3)^2}{\omega_2 - \omega_3} (\Sigma_3 - \Sigma_2) + \frac{(\omega_2 - \omega_3)^2}{\omega_2 + \omega_3} (\Sigma_3 + \Sigma_2) \right\} \quad (43)$$

Here the anisotropic h.o. is characterised by the three frequencies  $\omega_1, \omega_2$  and  $\omega_3$  along axes 1, 2 and 3 respectively, while the occupation factors  $\Sigma_1, \Sigma_2$  and  $\Sigma_3$  describe the sums

$$\Sigma_\kappa = \sum_{\nu=occ.} (n_\kappa + 1/2), \quad \kappa = 1, 2, 3 \quad (44)$$

extending over all the occupied orbits. Equation (43) for the nuclear moment of inertia should be completed by the selfconsistency condition

$$\omega_1 \Sigma_1 = \omega_2 \Sigma_2 = \omega_3 \Sigma_3 \quad (45)$$

and the volume conservation condition

$$\omega_1 \omega_2 \omega_3 = \omega_0^3 \sim 1/A \quad (46)$$

In this way the resulting moment of inertia  $\mathcal{J}$  from eq.(43) becomes effectively a function of several parameters

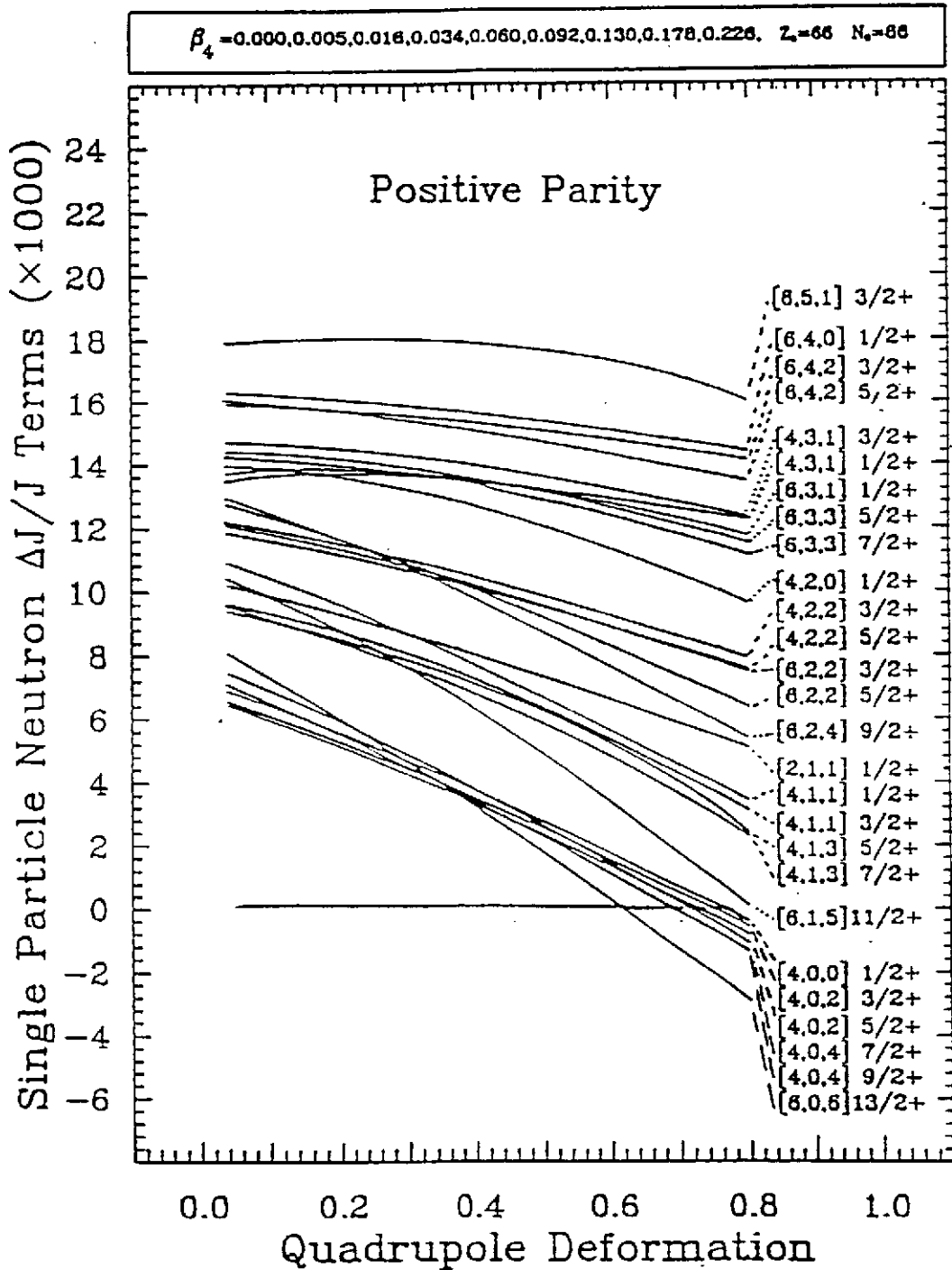
$$\mathcal{J} = F(A; \omega_1, \omega_2, \omega_3; \Sigma_1, \Sigma_2, \Sigma_3) \quad (47)$$

Now going over to the nearest odd- $A$  nucleus the parameters change

$$\begin{aligned} A &\longrightarrow A + 1 \\ \omega_\kappa &\longrightarrow \omega_\kappa + \delta\omega_\kappa \\ \Sigma_\kappa &\longrightarrow \Sigma_\kappa + \delta\Sigma_\kappa = \Sigma_\kappa + (n_\kappa + 1/2) \end{aligned} \quad (48)$$

where the last term comes from the orbit occupied by the valence particle. Now, employing the perturbation theory and eliminating the quantities  $\delta\omega_\kappa$  by means of the selfconsistency condition (45) and employing the volume conservation condition

Fig. 3.2



$E_{min} = -21.0$  (MeV),  $E_{max} = 20.30$  STANDARD.

USM: LIDUDEX

(cf. eq. (46)) one can arrive at the expression for  $\delta\mathcal{J}$  in the moment of inertia. Using the notation

$$\omega_1 = \omega_2 = \alpha\omega_3 = \Omega \quad (49)$$

$$\Sigma_1 = \Sigma_2 = \Sigma_3/\alpha = \Sigma \quad (50)$$

which is appropriate for the axially symmetric system we can express our formula as

$$\frac{\delta\mathcal{J}}{\mathcal{J}} = \frac{1}{3} \left\{ \frac{1}{A} - \frac{n_1 + 1/2}{\Sigma} - \frac{n_2 + 1/2}{\Sigma} \frac{\alpha^2 - 5}{\alpha^2 + 1} + \frac{n_3 + 1/2}{\Sigma} \frac{5\alpha^2 - 1}{\alpha(\alpha^2 + 1)} \right\} \quad (51)$$

Parameter  $\alpha$  is related to deformation and takes the value  $\alpha = 1$  for the spherical system,  $\alpha = 2$  for the superdeformed configuration and  $\alpha = 3$  for the hiperdeformed configuration.

There are two immediate conclusions that can be drawn from simple formula (51). First of all, the quantity  $\delta\mathcal{J}/\mathcal{J}$  depends essentially on the quantum numbers  $n_1, n_2$  and  $n_3$  characterising the valence orbit. It can be seen that  $\delta\mathcal{J}/\mathcal{J}$  is lowest for  $n_3 = 0$ . Secondly, quantity  $\delta\mathcal{J}/\mathcal{J}$  decreases with deformation increasing.

A more realistic description of the effect has been attempted approximately in terms of the Woods-Saxon potential [25] by employing formula (51) averaged by the expansion coefficients of the eigenstates in the Woods-Saxon potential in terms of the eigenstates in the h.o. potential. The results provide a remarkable observation that quantity  $\delta\mathcal{J}/\mathcal{J}$  is lowest for  $n_3 = 0$  (next lowest value occurs for  $n_3 = 1$ ) and drops down just for the superdeformed shape. This could perhaps explain why twin bands etc. that are observed at very large deformation do not show up at the usual deformations (say, at  $\epsilon = 0.2-0.3$  for heavy nuclei). The plots of  $\delta\mathcal{J}/\mathcal{J}$  versus  $\alpha$  for  $n_3 = 0, 1, 2, \dots$  are shown in Fig. 3.2. The appreciable decrease in  $\delta\mathcal{J}$  described in this model can be understood as a cancellation between the volume effect and core-polarisation induced by the valence nucleon. Preliminary calculations [25] including also the effect of rotation do not seem to change the main conclusion of the above argument.

Summing up the above considerations we can conclude that the strange relations (31), (32) and (33) occur in the case when the valence orbit is characterised by the h.o. quantum number  $n_3 = 0$  (or, at most  $n_3 = 1$ ) i.e. when it corresponds to the nuclear density concentrated mostly near the equatorial plane (axes 1 and 2 in the nucleus).

As the results obtained above are only approximate further investigations in this domain are necessary.

Fig. 3.3a

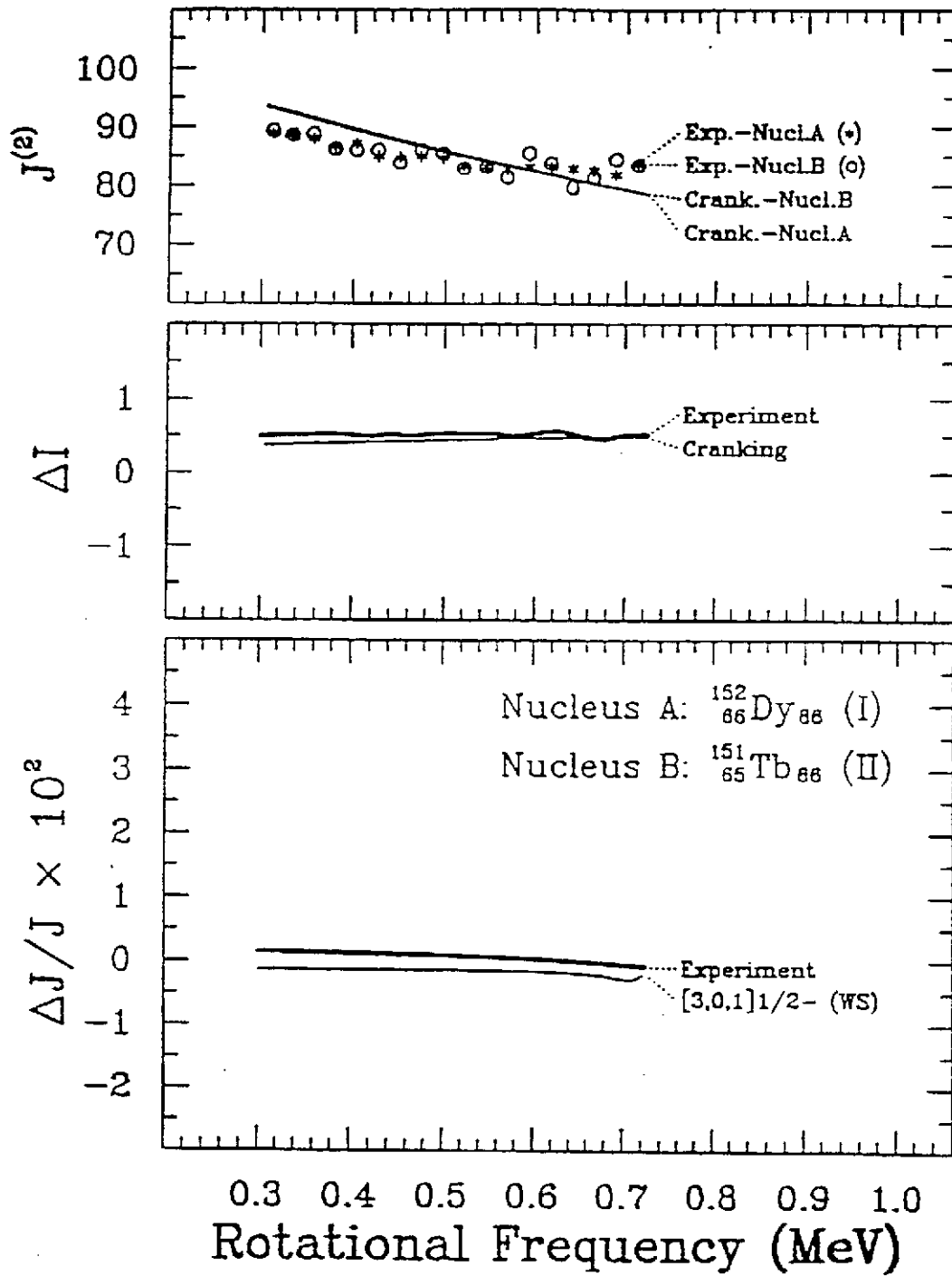
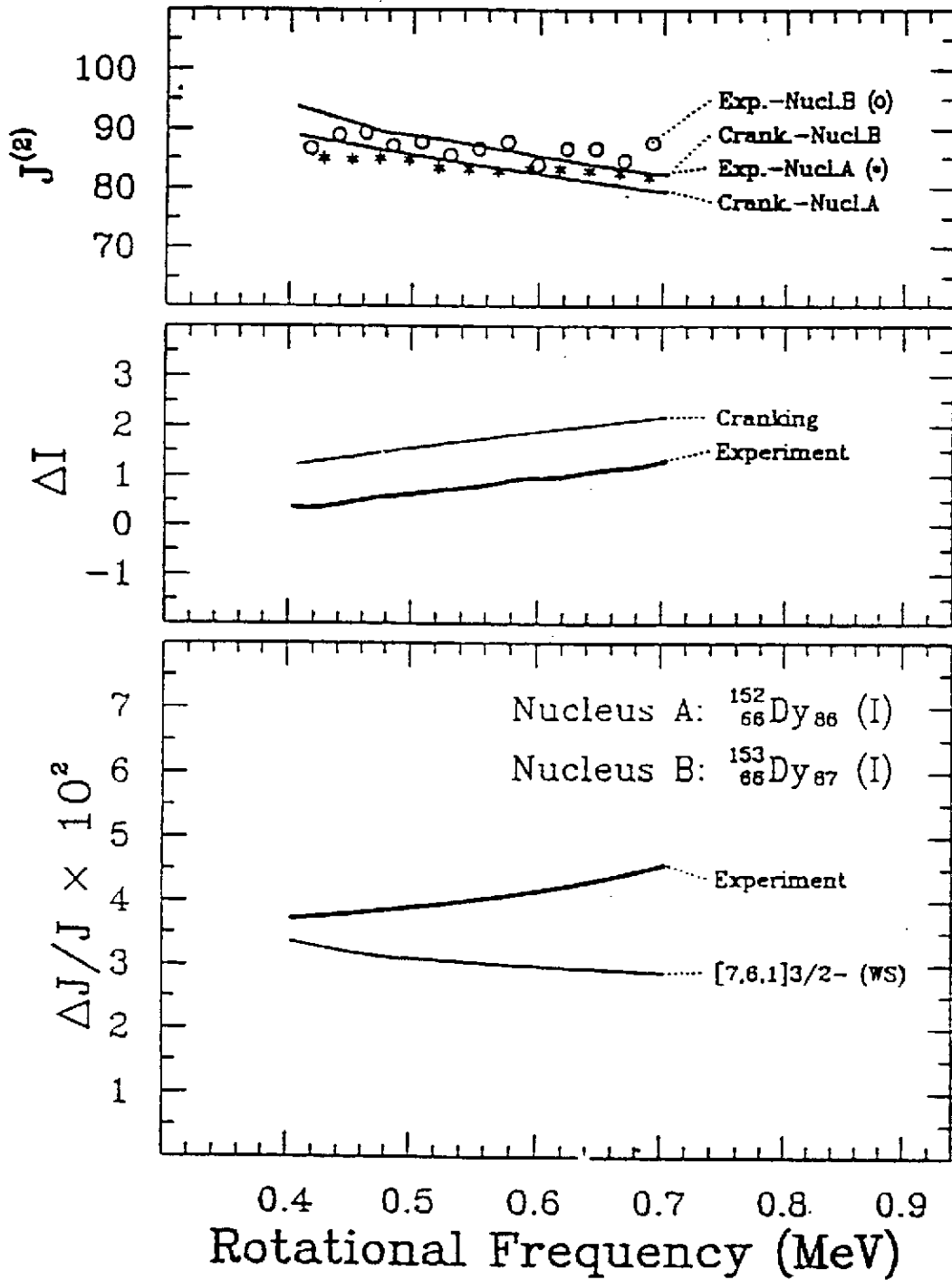




Fig. 3.3 b



Figs. 3.3a) and 3.3b) illustrate two cases; first with  $n_3 = 1$  where  $\delta\mathcal{J}/\mathcal{J}$  should be small and second with  $n_3 = 6$  where no definite relation between the bands are expected.

## References

1. W. Korten, J. Gerl, Ch. Ender, D. Habs, U.v. Helmold, H.W. Heyng, and D. Schwalm, Study of vibrational bands in  $^{232}\text{Th}$  with the crystal ball spectrometer, Max Planck Institut für Kernphysik, preprint.
2. A. Bohr, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. **26**, no 14 (1952).
3. A. Bohr and B.R. Mottelson, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. **27**, no 16 (1953)
4. A. Bohr and B.R. Mottelson, Nuclear Structure, Vol.2, (1975), ed. W.A. Benjamin Inc. Reading, London, Amsterdam and Don Mills Ontario, Sydney, Tokyo.
5. D.R. Inglis, Phys.Rev., **96** (1954) 1059 and **97** (1955) 701.
6. L.D. Landau and E. Lifshitz, Mekhanika, 1965, Nauka, Moscow.
7. A. Bohr and B.R. Mottelson, Proc.Nobel Symposium 50, Örenäs, Physica Scripta 24 (1981) 71.
8. M.A.J. de Voigt, J. Dudek and Z. Szymanski, Rev. Mod. Phys. **55** (1983) 949.
9. A. Johnson, H. Ryde and S. Hjorth, Nucl. Phys. **A179** (1972) 753.
10. J. Dudek, current work, 1990.
11. S. Cohen, F. Plasil and W.J. Swiatecki, Ann. Phys., N.Y., **82** (1974) 557.
12. Z. Szymanski, lectures delivered at Ecole Joliot Curie de Physique Nucleaire, Bombannes, 1983.
13. J.D. Garrett, lecture delivered at Int.School on Heavy Ion Physics, Erice, Italy, 1986.
14. W. Nazarewicz, R. Wyss and A. Johnsson, Nucl. Phys. **A503** (1989) 285.

15. J. Dudek and T. Werner, to be published.
16. J.P. Elliot, Proc. Roy. Soc., **245** (1958) 128 and 562.
17. K.T. Hecht and A. Adler, Nucl. Phys. **A137** (1969) 129; R.D. Ratna Raju, J.P. Draayer and K.T. Hecht, Nucl.Phys. **A202** (1973) 433.
18. A. Bohr, I. Hamamoto and B.R. Mottelson, Phys. Scripta, **26** (1982) 267.
19. J. Dudek, W. Nazarewicz, Z. Szymanski and G. Leander, Phys. Rev. Lett. **59** (1987) 1405.
20. T. Byrski, F.A. Beck, D. Curien, C. Schuck, P. Fallon, A. Alderson, I. Ali, M.A. Bentley, A.M. Bruce, P.D. Forsyth, D. Howe, J.W. Roberts, J.F. Sharpey-Schaffer, G. Smith and P.J. Twin, Phys. Rev. Letters **64** (1990) 1650.
21. W.Nazarewicz, P.J. Twin, P. Fallon and J.D. Garrett, Phys. Rev. Lett. **64** (1990) 1654.
22. F.S. Stephens et al. Phys. Rev. Lett. **64** (1990) 2623.
23. F.S. Stephens et al. Phys. Rev. Lett. **65** (1990) 301.
24. I. Ragnarsson in Proc. of Int. Conf. on Nucl. Struct. in the Nineties, Oak Ridge, Tennessee, April, 1990.
25. J. Dudek, Z. Szymanski and T. Werner, to be published.
26. A. Bohr and B.R. Mottelson, Mat. Fys, Medd. Dan. Vid. Selsk. **30** no 1 (1955).

## APPROCHES DE CHAMP MOYEN ET AU DELA

J.F. Berger

*Service PTN, CEA Bruyères-le-Châtel  
BP 12, 91680 Bruyères-le-Châtel, France*

### Résumé

Ces notes de cours présentent les fondements de l'approche microscopique du noyau fondée sur la théorie du champ moyen, les techniques qu'elle emploie, ainsi que les principales applications qui en ont été faites. Après un bref rappel de la philosophie de base d'une approche microscopique de la structure nucléaire, nous exposons les difficultés que l'on rencontre pour définir l'interaction nucléaire et mettre sur pied une méthode de résolution du problème à  $N$  corps à la fois abordable sur le plan numérique et quantitative. Nous décrivons ensuite une hiérarchie d'approximations successives permettant de surmonter ces difficultés. Les méthodes de Hartree-Fock, de Hartree-Fock-Bogolyubov, de même que la technique de dérivation des spectres collectifs à partir d'un hamiltonien dérivé du formalisme de la Coordonnée Génératrice sont développées en détail. De nombreuses applications à des situations nucléaires spécifiques sont présentées.

### Abstract

These lecture notes present the foundations of the microscopic approach of nuclei based on the mean field theory, with the techniques employed, as well as the main applications that have been performed in this context. After briefly recalling the basic philosophy of a completely microscopic approach of nuclear structure, the difficulties that one encounters for defining the nuclear interaction and for setting up both a tractable and quantitative method of solving the many-body problem are exposed. A sequence of approximations allowing one to overcome these difficulties is then described. The Hartree-Fock and Hartree-Fock-Bogolyubov methods, and the technique of obtaining nuclear collective spectra from a hamiltonian derived from the Generator Coordinate formalism are developed. Numerous applications to specific nuclear systems and processes are given.

## I. INTRODUCTION

La production de noyaux ou d'états nucléaires de structure inhabituelle (noyaux exotiques, grandes déformations, isomères, spins élevés, ...) et l'étude de leur propriétés représentent certainement le domaine d'activité le plus prometteur de la physique nucléaire contemporaine. Du point de vue des applications pratiques, trop rarement souligné, les découvertes que l'on peut en attendre sont susceptibles d'être à l'origine de technologies inédites comme, par exemple dans le cas des isomères nucléaires de grande durée de vie, le stockage d'énergie (cf. le cours de

D.Gogny). Sur un plan plus fondamental, ces données nouvelles, en mettant à l'épreuve notre capacité à décrire le comportement d'ensembles de nucléons en interaction et leurs excitations, contribuent à l'améliorer. Grâce aux remarquables progrès expérimentaux réalisés ces dernières années, la masse et les premiers états excités de noyaux très éloignés de la vallée de stabilité sont accessibles aux mesures. Il en est de même d'états très déformés, en rotation plus ou moins rapide, comme ceux qui constituent les bandes "super-déformées". La quantité impressionnante de données expérimentales obtenues récemment dans ces domaines (voir par exemple la Réf. <sup>1)</sup>) a déjà suscité de nombreux travaux théoriques. Parmi les différentes approches utilisées, les méthodes phénoménologiques fondées sur le modèle de la goutte liquide et la correction de couches de Strutinsky sont les plus employées (cf. le cours de Z.Szymanski). Un autre type d'approches, le Modèle des Bosons en Interaction (IBA) fait également l'objet d'un cours à cette Ecole. Le présent exposé est consacré à un type de méthode particulièrement bien adapté à la description de structures nucléaires exotiques: l'approche complètement microscopique fondée sur la théorie du champ moyen et ses différentes extensions.

Il ne sera pas possible de décrire dans ce qui suit l'ensemble du formalisme et des techniques relatives à la théorie du champ moyen (il y faudrait plusieurs livres !). Cet exposé est divisé en huit Chapitres. Après la présente Introduction, nous rappelons l'intérêt d'une approche microscopique de la structure nucléaire (Chapitre II). Puis nous exposons brièvement les problèmes que l'on rencontre pour bâtir ce genre d'approche (Chapitre III). Les fondements de la théorie du champ moyen telle qu'elle est appliquée aujourd'hui sont décrits dans le Chapitre IV. Le Chapitre V donne une vue d'ensemble des méthodes et techniques qui permettent de construire par approximations successives une description du noyau intégrant des corrélations de plus en plus élaborées. Le Chapitre VI sera consacré au principe et à différents aspects des méthodes Hartree-Fock et Hartree-Fock-Bogolyubov. Dans le Chapitre VII nous développerons l'une des techniques permettant de dériver un Hamiltonien collectif dans un cadre complètement microscopique et présenterons différents résultats obtenus avec cette méthode, en particulier dans le domaine des superdéformations. Le Chapitre VIII conclut l'ensemble de cet exposé.

Nous avons autant que faire se peut évité d'utiliser l'arsenal des techniques mathématiques habituellement employé dans les présentations similaires, comme par exemple le formalisme de la seconde quantification. Nous avons également essayé de limiter au maximum les développements mathématiques et le nombre des formules, tentant plutôt de rendre plausibles les expressions qui apparaissent. L'exposé y perd certainement en rigueur, mais y gagne probablement en longueur et (peut-être) en clarté. Le lecteur intéressé par les détails mathématiques des différentes théories pourra les trouver dans les ouvrages de la Bibliographie Générale donnée à la fin. Certaines méthodes fondées sur la théorie du champ moyen, comme la méthode de la RPA, ne sont pas du tout abordées. De même, nous ne disons rien des méthodes microscopiques dépendant du temps (TDHF, ATDHF, méthode de la Coordonnée Génératrice dépendant du temps) et de leurs applications aux processus nucléaires de grande amplitude (fission, collisions noyau-noyau). Là aussi, nous renvoyons le lecteur aux exposés généraux de la Bibliographie

Générale et aux articles spécialisés. La méthode de la Coordonnée Génératrice, simplement esquissée dans cet exposé, et le problème des restaurations de symétries sont décrites en détail dans le cours de P.H.Heenen à cette Ecole.

La plupart des illustrations et applications que nous présentons dans cet exposé sont tirées de travaux réalisés à Bruyères-le-Châtel avec l'interaction de Gogny. Ceci ne veut pas dire que les mêmes études n'ont pas été réalisées dans d'autres laboratoires. Souvent elles l'ont été, avec une qualité comparable à la nôtre. Les exemples que nous mentionnons dans la suite sont simplement ceux auxquels nous avons eu le plus facilement accès, et que nous connaissons le mieux.

## II. POURQUOI UNE APPROCHE MICROSCOPIQUE DE LA STRUCTURE NUCLEAIRE ?

Les Figures 1, 2 et 3 montrent des exemples de distributions de densité de nucléons dans un certain nombre de noyaux. Elles ont été calculées avec la méthode de Hartree-Fock-Bogolyubov dont il sera question dans le Chapitre VI, et l'interaction D1 de Gogny. Le point important que nous voulons souligner ici est que, avec cette méthode, la répartition spatiale des nucléons est un résultat du calcul: la distribution obtenue est celle qui minimise l'énergie totale du système (compte tenu éventuellement de contraintes globales comme par exemple la symétrie axiale ou la valeur du moment quadrupolaire). La forme précise de la densité nucléaire n'est donc pas imposée *a priori*.

Ces trois Figures montrent que, suivant le système étudié, les distributions de nucléons peuvent adopter des formes extrêmement variées, difficilement prévisibles. D'autre part, la densité à l'intérieur des noyaux est loin d'être uniforme. Lorsqu'on calcule les moments multipolaires associés à ces densités, on trouve des valeurs non nulles, même pour les ordres élevés. Si l'on admet que le potentiel moyen vu par un nucléon suit approximativement la distribution de densité, il est bien évident qu'il est impossible d'en définir une paramétrisation capable de prévoir l'ensemble des dépendances spatiales auxquelles on peut s'attendre. L'intérêt d'une approche microscopique est précisément d'éviter d'avoir à se préoccuper de ce problème: les distributions de densité, le potentiel moyen, et, plus généralement toutes les quantités globales sont obtenues à partir de la seule donnée de l'interaction entre les nucléons. Contrairement aux approches phénoménologiques, une méthode complètement microscopique ne contient aucun paramètre dépendant de A, Z ou de la configuration nucléaire à laquelle on s'attend. Ce type de méthode est donc particulièrement bien adaptée à la description des systèmes pour lesquels il n'existe qu'une information expérimentale fragmentaire.

Il est important de remarquer qu'une approche microscopique introduit nécessairement tous les degrés de liberté nucléaires susceptibles de se manifester (dans la limite où on ignore les degrés de liberté des particules autres que les nucléons), qu'ils soient de nature individuelle (mouvements de quelques nucléons) ou collective (mouvements cohérents de l'ensemble des

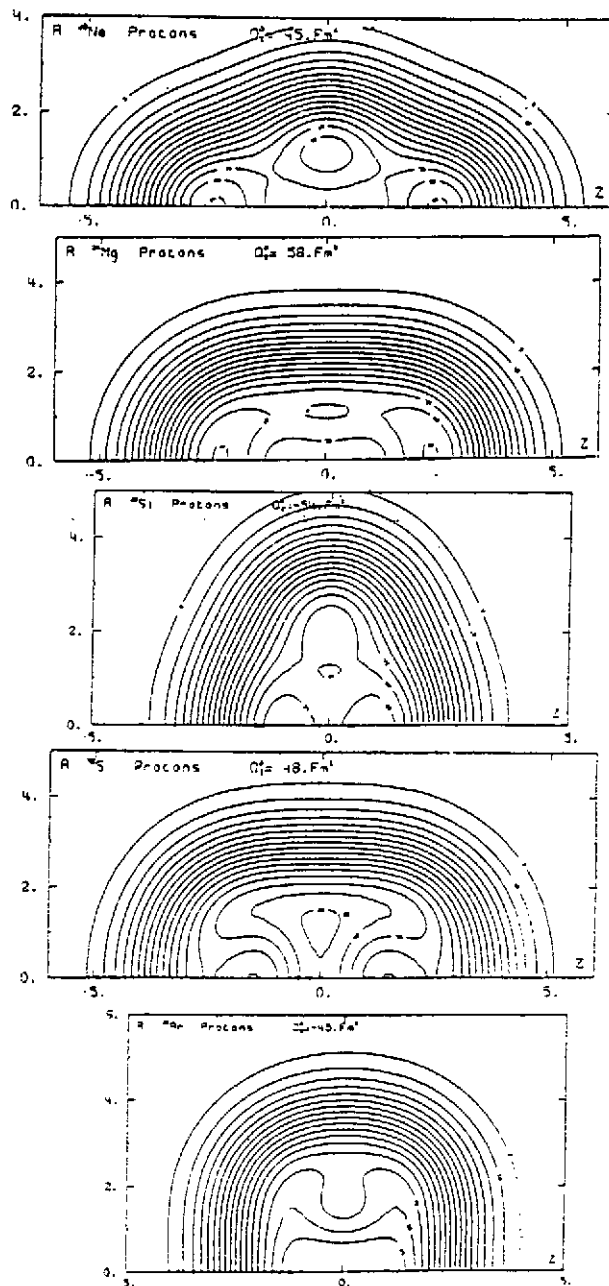


Figure 1: Isodensités de protons de l'état fondamental des cinq noyaux de la couche sd:  $^{20}\text{Ne}$ ,  $^{24}\text{Mg}$ ,  $^{28}\text{Si}$ ,  $^{32}\text{S}$  et  $^{36}\text{Ar}$  calculées à l'approximation de Hartree-Fock-Bogolyubov avec l'interaction de Gogny. La symétrie axiale autour de Oz (axe horizontal) est imposée.  $R$  représente la direction radiale. Les échelles sont en  $f\text{m}$ .

nucléons). Par exemple, partant d'un hamiltonien microscopique, il est possible de définir un champ moyen dont les états propres gouvernent le mouvement individuel des nucléons. Ce champ moyen est lui-même capable d'osciller sous l'effet de l'interaction résiduelle entre les nucléons selon un nombre infini de modes, générant ainsi les excitations collectives du système. En ce sens, une approche microscopique fournit automatiquement une description unifiée du mouvement individuel et collectif des nucléons.

Remarquons également qu'une approche microscopique a le mérite de formuler dès le début

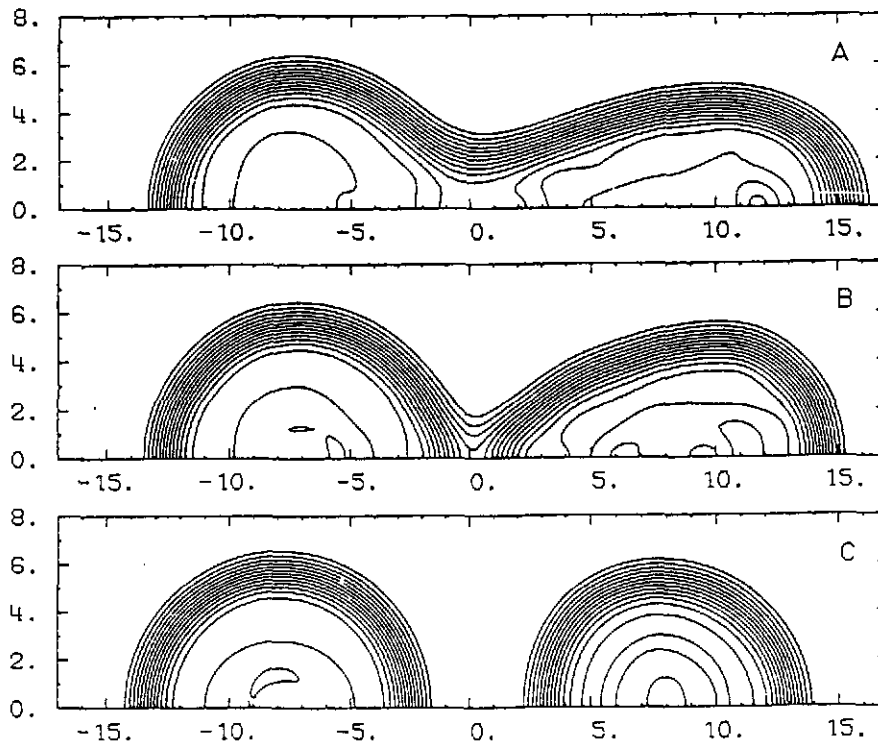


Figure 2: Isodensités neutrons + protons d'un noyau de  $^{240}\text{Pu}$  en cours de fission à une élongation constante, calculées à l'aide de la méthode de Hartree-Fock-Bogolyubov avec contraintes et l'interaction de Gogny. La symétrie axiale autour de Oz (axe horizontal) est imposée. Les échelles sont en *fm*.

le problème de la physique des noyaux dans un cadre théorique précis. Son point de départ est le hamiltonien qui gouverne la dynamique de  $A$  nucléons en interaction selon les lois de la mécanique quantique. Les méthodes à employer sont connues: ce sont celles de la théorie à  $N$  corps, avec l'ensemble des approximations possibles qu'elle propose. En particulier, les états nucléaires sont obtenus sous la forme de fonctions d'onde relatives à l'ensemble des  $A$  nucléons. Les fonctions d'onde "partielles" qui apparaissent souvent dans des étapes intermédiaires (par exemple des fonctions d'onde collectives dans un espace restreint), résultent d'approximations clairement spécifiées de la fonction d'onde à  $A$  corps du noyau, approximations dont on peut en principe toujours contrôler la validité.

### III. UN DEFI TOUJOURS D'ACTUALITE !

Une approche microscopique des noyaux se heurte dès le départ à deux difficultés principales: tout d'abord l'interaction entre les nucléons n'est pas complètement connue. En effet, il n'existe pas (pour l'instant) de méthode praticable qui permettent de dériver l'interaction entre deux ou plusieurs nucléons à partir de leurs constituants et de la théorie de la chromodynamique quantique. Par ailleurs, les expériences de diffusion N-N et les propriétés du deutéron ne fournissent qu'une partie des éléments de matrice de l'interaction nucléaire, ceux



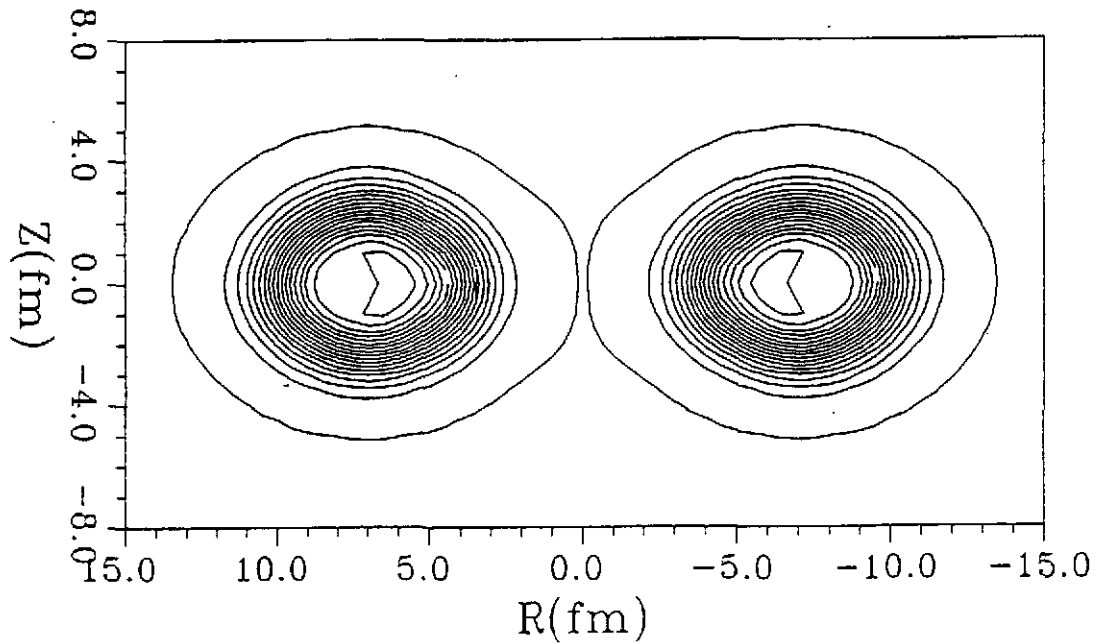


Figure 3: Isodensités de neutrons d'un noyau de  $^{192}\text{Hg}$  contraint à adopter une déformation oblate très importante. Le noyau est de révolution autour de l'axe Oz (vertical), de sorte que le noyau se présente sous la forme d'un tore.

à deux corps entre des états de nucléons particuliers. La seconde difficulté provient de la complexité du formalisme et des calculs numériques auxquels conduit le problème à N corps avec une interaction comportant généralement un coeur très répulsif. La détermination du potentiel d'interaction entre deux nucléons a donné lieu à un nombre de travaux qui dépasse largement celui dévolu à tout autre problème de physique nucléaire <sup>2)</sup>. De nombreuses formes de potentiel d'interaction N-N ont été proposées, par exemple, les potentiels de Reid <sup>3)</sup>, de Hamada-Johnston <sup>4)</sup>, et, plus récemment ceux de Paris <sup>5)</sup> et de Bonn <sup>6)</sup>. Ils sont ajustés sur les données de la diffusion N-N et les propriétés du deutéron. Même dans les approches les plus élaborées où la forme du potentiel est obtenue à partir d'échanges de mésons (échange d'un pion, OPEP, pour la composante de longue portée  $r > 2\text{fm}$ , échange de deux pions et d'un méson  $\omega$  pour la composante de portée intermédiaire  $1 < r < 2\text{fm}$ ), un minimum d'ingrédients phénoménologiques est nécessaire. La répulsion à courte distance ( $r < .8\text{fm}$ ), en particulier, est due à un ensemble de phénomènes complexes (échanges multiples de pions et de mésons lourds, interactions entre mésons, résonances méson-nucléon dans les états intermédiaires, ...) qu'il n'est pas possible d'inclure explicitement et qui sont simulés empiriquement. Des ajustements phénoménologiques sont également souvent nécessaires dans les composantes à longue et à moyenne portée de la force: les constantes de couplage méson-nucléon et/ou les masses des mésons doivent être pris à des valeurs différentes de celles expérimentalement connues.

Les techniques permettant de résoudre le problème de A fermions en interaction forte ont été abondamment étudiées dans les années 50-60. La plus connue est la méthode de Brueckner-Bethe-Goldstone <sup>7-8)</sup> (un exposé particulièrement clair de cette méthode est celui de B.D.Day

(1967)<sup>8)</sup>). La technique utilisée consiste en premier lieu à "se débarrasser" de la partie très répulsive à courte portée de l'interaction N-N qui interdit toute description en termes de particules indépendantes et tout développement perturbatif. Ceci est accompli en étudiant la collision de deux nucléons au sein du milieu nucléaire. Ce problème de diffusion nucléon-nucléon particulier présente de nombreuses ressemblances avec celui de deux nucléons libres. En particulier, il est possible de définir, par analogie avec la matrice de réaction (souvent notée T) de la diffusion N-N libre<sup>9)</sup>, une matrice de réaction pour la diffusion de deux nucléons à l'intérieur du noyau. Cette dernière, habituellement appelée matrice G ou matrice de réaction de Brueckner, réintègre complètement l'influence du cœur répulsif de l'interaction sur les fonctions d'onde des deux nucléons qui diffusent. Plus précisément, la matrice de réaction G donne, par définition, l'amplitude de transition entre les états de deux nucléons se propageant indépendamment l'un de l'autre dans le noyau avant et après collision. Ses éléments de matrice sont donc définis entre des états à deux nucléons indépendants à l'intérieur du noyau. Il en résulte que G se comporte comme une interaction effective pour des nucléons occupant des états de ce type.

Le point important qu'il convient de souligner concerne l'ordre de grandeur des éléments de matrice de G et de l'interaction effective qu'elle définit: grâce au principe d'exclusion de Pauli, les collisions N-N à l'intérieur du noyau sont peu probables. En effet, pour une collision donnée entre deux nucléons, beaucoup des états finals ne sont pas disponibles car ils sont occupés par les autres nucléons. Il s'ensuit que les éléments de matrice de G, et, par conséquent, ceux de l'interaction effective correspondante, sont d'un ordre de grandeur raisonnable, et même relativement petits, contrairement à ceux de l'interaction N-N nue initiale. Grâce à cette dernière propriété et au fait que G fournit l'interaction effective entre nucléons indépendants, il est possible, après avoir réécrit le hamiltonien en terme de G, de prendre comme première approximation de l'état fondamental du noyau un état de particules indépendantes. Cet état est obtenu en minimisant l'énergie totale du noyau. Cette procédure conduit à des équations du type Hartree-Fock et constitue une approximation de champ moyen pour l'état fondamental du noyau. C'est la méthode de Brueckner-Hartree-Fock<sup>10,11)</sup>.

En fait, l'approximation de champ moyen fondée sur la matrice G n'est généralement pas suffisante. Les corrections d'ordre supérieur à cette approximation ne peuvent être négligées. Pour les calculer, l'énergie du système est développée en série de perturbation autour de la solution de champ moyen. Le développement en série est organisé de façon à tenir compte successivement des corrélations à 3, 4, ... corps non incluses dans la définition de G et la convergence de la série est rapide: alors que les corrélations à 3 corps apportent une contribution notable à l'énergie, celles à 4 corps et plus sont petites<sup>8,11)</sup>.

Une autre approche du problème nucléaire à N corps qui inclut en une seule fois les corrélations à courte portée intégrées par la méthode de Brueckner et les corrections d'ordre supérieur, est celle du développement en amas couplés<sup>12)</sup>. La fonction d'onde du noyau est exprimée sous la forme générale  $\Psi = e^S \Phi$ , où  $\Phi$  est un déterminant de Slater et  $S$  un opérateur somme de contributions à 1, 2, 3, ... corps. D'autres techniques, moins générales que les deux précédentes,

ont été également développées et appliquées essentiellement au cas de la matière nucléaire infinie (un ensemble de neutrons et de protons sans charge, remplissant tout l'espace avec une densité déterminée): fonctions d'onde du type de Jastrow, méthodes HNC, Monte-Carlo, notamment <sup>13)</sup>.

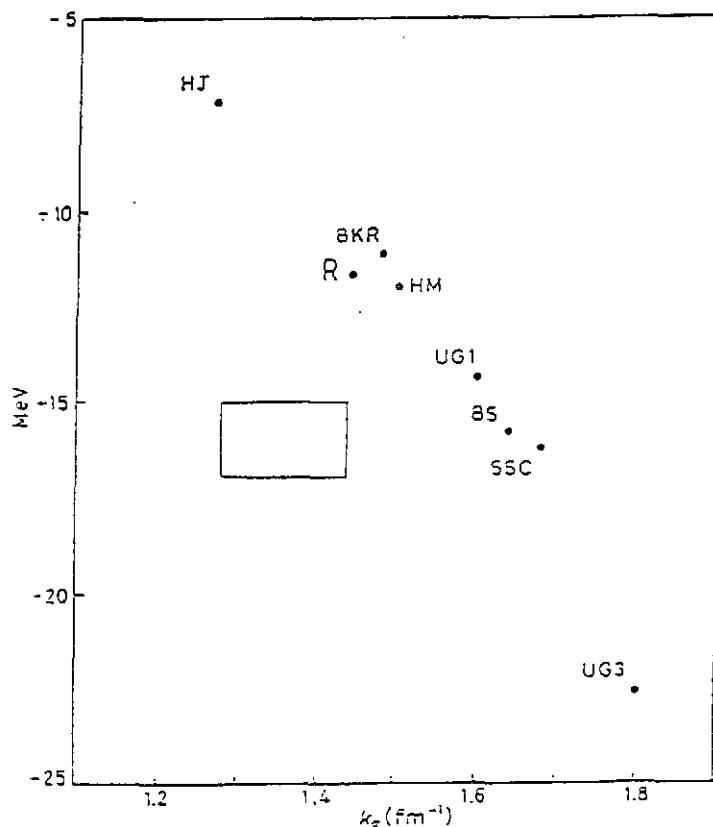


Figure 4: Points de saturation, c'est-à-dire minima des courbes donnant l'énergie de liaison par particule en fonction de la densité, dans la matière nucléaire infinie. Les différents points correspondent à différentes interactions N-N nues. Ils s'alignent approximativement le long d'une ligne, la "ligne de Coester", qui passe nettement à l'écart de la zone du point de saturation empirique (rectangle). La densité de nucléons est donnée en fonction du moment de Fermi  $k_F$  par la formule  $\rho = 2k_F^3/3\pi^2$ . Cette Figure est tirée de la Ref. <sup>13)</sup>.

Le principe d'une description des noyaux à partir d'une interaction reproduisant les données expérimentales de la diffusion N-N et du deutéron est donc bien défini. Il va sans dire qu'il s'agit d'une approche extrêmement complexe. Mise à part leur complexité, toutes ces approches ont l'inconvénient majeur de fournir des résultats décevants en ce qui concerne les propriétés nucléaires les plus élémentaires. Les forces réalistes dérivées dans les années 50-60, de même que celles construites plus récemment à partir d'échanges de mésons, sont loin de reproduire, par exemple, le point de saturation de la matière nucléaire infinie (c'est-à-dire les coordonnées du minimum de la courbe donnant l'énergie de liaison par particule en fonction de la densité, Fig.4), ou l'énergie de liaison et le rayon de l'<sup>16</sup>O ( Fig.5) <sup>13,14)</sup>. Les potentiels N-N donnant une énergie de liaison correcte fournissent une densité trop forte. Inversement, ceux reproduisant la densité nucléaire expérimentale sous-estiment considérablement l'énergie de liaison par particule. Il

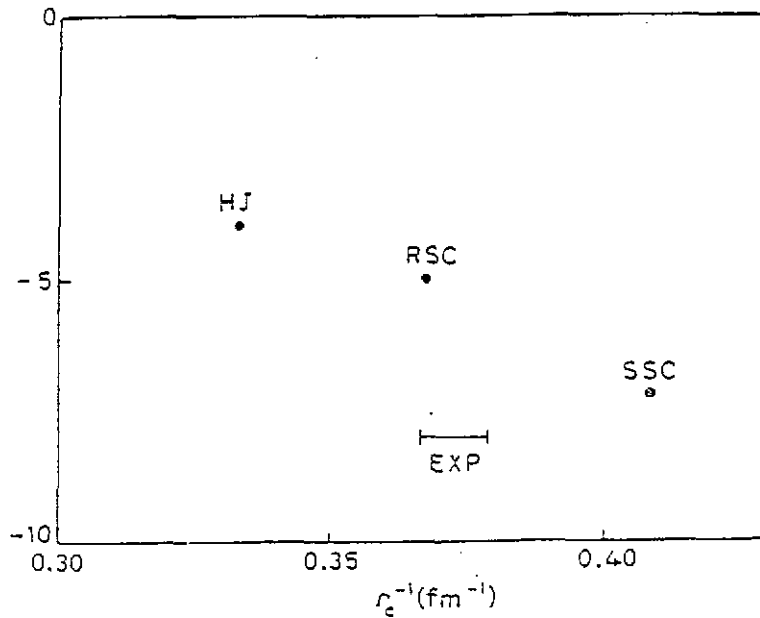


Figure 5: Points de saturation, c'est-à-dire énergies de liaison par particule en fonction du rayon, obtenus dans l'  $^{16}\text{O}$  avec la méthode du développement en amas couplés <sup>12)</sup>. Les différents points correspondent à différentes interactions N-N nues et le trait horizontal représente la zone du point de saturation empirique. Cette Figure est tirée de la Ref. <sup>13)</sup>.

est clair que ces interactions ne contiennent pas tous les ingrédients nécessaires pour décrire ne serait-ce que l'état fondamental des noyaux connus. On peut remarquer que les travaux consacrés au problème nucléaire à 3 ou 4 corps se heurtent également à cette difficulté de retrouver les données connues à partir d'une interaction la plus fondamentale possible <sup>15)</sup>. Il en est de même des calculs de modèle en couches où l'interaction résiduelle à employer dans un espace restreint est déduite de l'interaction N-N nue <sup>16,17)</sup>. On peut dire que, malgré les progrès réalisés dans les vingt dernières années, le problème de la définition de l'interaction existant entre les nucléons d'un noyau est toujours ouvert. Il est probable que des avancées notables dans ce domaine ne seront réalisées dans le futur qu'en faisant intervenir les degrés de liberté non-nucléoniques et les effets relativistes, à partir d'une modélisation des équations de la chromodynamique. De nombreux travaux dans ce sens sont en cours <sup>18)</sup>.

Avant de clore ce paragraphe, signalons que des calculs récents fondés sur une extension relativiste de la méthode de Brueckner parviennent à reproduire de façon satisfaisante le point de saturation dans la matière nucléaire infinie <sup>19)</sup>. Les raisons de ce succès ne sont pas parfaitement comprises. D'une part, la structure de la généralisation relativiste utilisée n'est pas complètement clarifiée, d'autre part le Lagrangien de départ contient des paramètres phénoménologiques ajustés.

#### IV. APPROCHES DE CHAMP MOYEN ET INTERACTIONS EFFECTIVES PHENOMENOLOGIQUES

L'un des apports les plus importants des théories fondamentales qui viennent d'être esquissées a été de dégager le rôle central joué par la matrice  $G$  comme interaction effective entre les nucléons d'un noyau. En particulier, comme il a été signalé plus haut, la matrice  $G$  est l'interaction qui doit être employée lorsque l'état du noyau est représenté par une fonction d'onde de particules indépendantes, c'est-à-dire dans toute approche de type champ moyen.

De la présentation donnée dans la Section précédente on peut déduire que cette quantité n'a pas une structure très simple. La matrice  $G$  représente une interaction N-N effective non locale (c'est-à-dire  $\langle \vec{r}_1 \vec{r}_2 | G | \vec{r}'_1 \vec{r}'_2 \rangle \neq \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}'_1) \delta(\vec{r}_2 - \vec{r}'_2) f(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$ ) et dépendante de l'énergie. Dans le cas de la matière nucléaire infinie, il est possible d'en dégager la forme générale moyennant quelques approximations <sup>11)</sup>. Ceci provient du fait qu'un système infini est invariant par translation et que, par conséquent, les "orbitales" des nucléons sont des ondes planes. En revanche, dans le cas des noyaux finis, l'expression de  $G$  ne peut être obtenue que numériquement, et au prix de calculs extrêmement complexes. Afin d'obtenir tout de même le comportement de  $G$  dans les noyaux, deux types de techniques ont été employées. La première, l'approximation de densité locale (Local Density Approximation ou LDA <sup>20)</sup>) revient à supposer qu'un noyau est localement une portion de matière nucléaire infinie dont la densité est celle du noyau au point considéré. Elle consiste à prendre comme interaction effective entre deux nucléons situés en  $\vec{r}_1$  et  $\vec{r}_2$ , la matrice  $G$  calculée dans une matière nucléaire infinie de densité constante égale à  $\rho(\vec{R})$ , densité du noyau au point  $\vec{R} = (\vec{r}_1 + \vec{r}_2)/2$ . La seconde technique est le développement de la matrice densité (Density Matrix Expansion ou DME <sup>21)</sup>). Dans cette méthode, l'équation intégrale de la diffusion fournissant  $G$  est simplifiée en développant la matrice densité  $\rho(\vec{r}, \vec{r}')$  sur la non-localité  $\vec{r} - \vec{r}'$ , et en remplaçant la dépendance en énergie par une moyenne calculée comme dans la matière nucléaire infinie. Dans les deux cas, la forme de l'interaction effective qui apparaît dépend fortement de la densité nucléaire  $\rho(\vec{R})$ . Employées à partir d'une interaction nue de forme classique, ces méthodes ne fournissent pas, comme le laisse présager la discussion de la section III précédente, les valeurs correctes des énergies de liaison et des rayons des noyaux finis. Il est nécessaire pour y parvenir d'apporter des corrections phénoménologiques à l'interaction effective obtenue <sup>22)</sup>.

Etant données ces difficultés et la nécessité de recourir de toute façon à des ingrédients phénoménologiques pour définir l'interaction N-N nue ou pour corriger l'interaction effective que l'on peut en déduire, un certain nombre de travaux ont été réalisés vers la fin des années 60 visant à bâtir une approche de la structure nucléaire partant directement d'une forme paramétrisée de l'interaction effective. La paramétrisation adoptée est déterminée de façon à simuler le comportement d'une matrice  $G$  dans le noyau. De plus elle est choisie la plus simple possible, ceci afin de permettre des calculs de structure nucléaire complexes. Les paramètres qui interviennent sont ajustés pour reproduire un certain nombre de données essentielles. Dans

cette optique, les interactions effectives phénoménologiques qui ont été construites jusqu'ici retiennent des propriétés de G la forte dépendance vis-à-vis de la densité nucléaire. En revanche, les paramétrisations sont choisies indépendantes de l'énergie. De même, elles ne comportent généralement pas de terme tenseur. Etant donnée leur similarité avec une matrice G, ces interactions phénoménologiques intègrent les corrélations dues au "coeur dur" de l'interaction N-N nue (les corrélations dites "de courte portée") et peuvent être employées avec des états de particules indépendantes. En particulier, l'état fondamental des noyaux est obtenu en minimisant la valeur moyenne de l'énergie calculée avec ce type d'états. Cette procédure, qui est la base de l'approximation de champ moyen, conduit dans sa version la plus simple à la méthode DDHF (Density Dependent Hartree-Fock) et, lorsque les corrélations d'appariement sont prises en compte, à la méthode DDHFB (Density Dependent Hartree-Fock-Bogolyubov) dont il sera question dans le Chapitre VI.

Différentes interactions effectives phénoménologiques ont été proposées dans les vingt dernières années. Les plus employées à l'heure actuelle sont l'interaction de Skyrme <sup>23)</sup> fondée sur l'approximation DME, et l'interaction de portée finie D1 de D.Gogny <sup>24)</sup>. L'interaction de Skyrme se présente sous la forme suivante:

$$\begin{aligned}
 v_{12} = & t_0 (1 + x_0 P_\sigma) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \\
 + t_1 \frac{1}{2} & \left[ \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \overleftrightarrow{\nabla}_{12}^2 + \overleftarrow{\nabla}_{12}^2 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \right] + t_2 \overleftarrow{\nabla}_{12} \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \cdot \overrightarrow{\nabla}_{12} \\
 + i W_{LS} & \overleftarrow{\nabla}_{12} \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \times \overrightarrow{\nabla}_{12} \cdot (\vec{\sigma}_1 + \vec{\sigma}_2) \\
 + t_3 (1 + P_\sigma) & \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \rho\left(\frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{2}\right) \\
 + (1 + 2\tau_{1z}) & (1 + 2\tau_{2z}) \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}
 \end{aligned}$$

où  $P_\sigma$  est l'opérateur qui échange les spins des deux nucléons,  $\overleftrightarrow{\nabla}_{12} = \frac{1}{2}(\overrightarrow{\nabla}_{r_1} - \overrightarrow{\nabla}_{r_2})$  agissant sur les états situés à sa droite,  $\overleftarrow{\nabla}_{12}$  le même opérateur agissant sur les états situés à sa gauche et  $\vec{\sigma}$  le vecteur formé par les trois matrices de Pauli. Les trois premiers termes représentent la partie centrale de la force, le quatrième est un terme spin-orbite de portée nulle, le cinquième le terme dépendant de la densité et le sixième l'interaction coulombienne entre les protons ( $\tau_z = 1/2$  pour les protons et  $-1/2$  pour les neutrons). La présence des termes de contact  $\delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$  simplifie considérablement les expressions du champ moyen à l'approximation Hartree-Fock. En particulier, le champ d'échange n'a pas à être calculé: il est égal au champ direct (Cf. le Chapitre VI pour une définition de ces composantes du champ moyen).

L'interaction D1 de Gogny a pour expression:

$$\begin{aligned}
 v_{12} = & \sum_{j=1}^2 e^{-(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2 / \mu_j^2} (W_j + B_j P_\sigma - H_j P_\tau - M_j P_\sigma P_\tau) \\
 & + i W_{LS} \overleftarrow{\nabla}_{12} \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \times \overrightarrow{\nabla}_{12} \cdot (\vec{\sigma}_1 + \vec{\sigma}_2) \\
 & + t_3 (1 + x_0 P_\sigma) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \left[ \rho \left( \frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{2} \right) \right]^\alpha \\
 & + (1 + 2\tau_{1z}) (1 + 2\tau_{2z}) \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}
 \end{aligned}$$

où  $P_\sigma$  et  $P_\tau$  sont les opérateurs d'échange de spin et d'isospin des deux nucléons. La différence essentielle entre cette interaction et celle de Skyrme est que la partie centrale de D1 est de portée finie (les deux portées valent respectivement  $\mu_1 = .7 fm$  et  $\mu_2 = 1.2 fm$ ). Grâce à cette propriété, les paramètres de l'interaction ont pu être ajustés de façon à reproduire non seulement les propriétés globales des noyaux liés au champ moyen, mais également l'intensité des corrélations d'appariement qui existent entre les nucléons. Celles-ci jouent en effet un rôle fondamental dans la structure des noyaux et doivent pratiquement toujours être prises en compte. Dans le cas de la force de Skyrme, les corrélations d'appariement sont évaluées en ajoutant au hamiltonien une force résiduelle d'appariement, de forme généralement monopolaire, dont l'intensité est déterminée au moyen d'un paramètre empirique qui dépend du noyau traité, de la déformation nucléaire envisagée, etc ... Rappelons à cet égard qu'une force à deux corps de portée nulle conduit à des corrélations d'appariement dont l'intensité est soit nulle soit infinie. Il résulte de ceci qu'il n'est possible de donner une description entièrement microscopique de l'appariement qu'avec une interaction N-N de portée finie.

A titre d'exemple, nous présentons les différentes quantités qui ont été ajustées afin de déterminer les paramètres de l'interaction de Gogny. Ces quantités concernent les propriétés:

- de la matière nucléaire infinie:
  - point de saturation:  $E/A$  et  $k_F$
  - incompressibilité  $K_\infty$
  - paramètre d'asymétrie  $a_\tau$
- de la matière nucléaire semi-infinie:
  - coefficient de surface  $a_S$
- de quelques noyaux:
  - l'énergie de liaison et le rayon de l'  $^{16}O$  et du  $^{90}Zr$
  - la différence d'énergie entre les niveaux  $1p_{1/2}$  et  $1p_{3/2}$  dans l'  $^{16}O$  (afin de déterminer l'intensité de l'interaction spin-orbite)

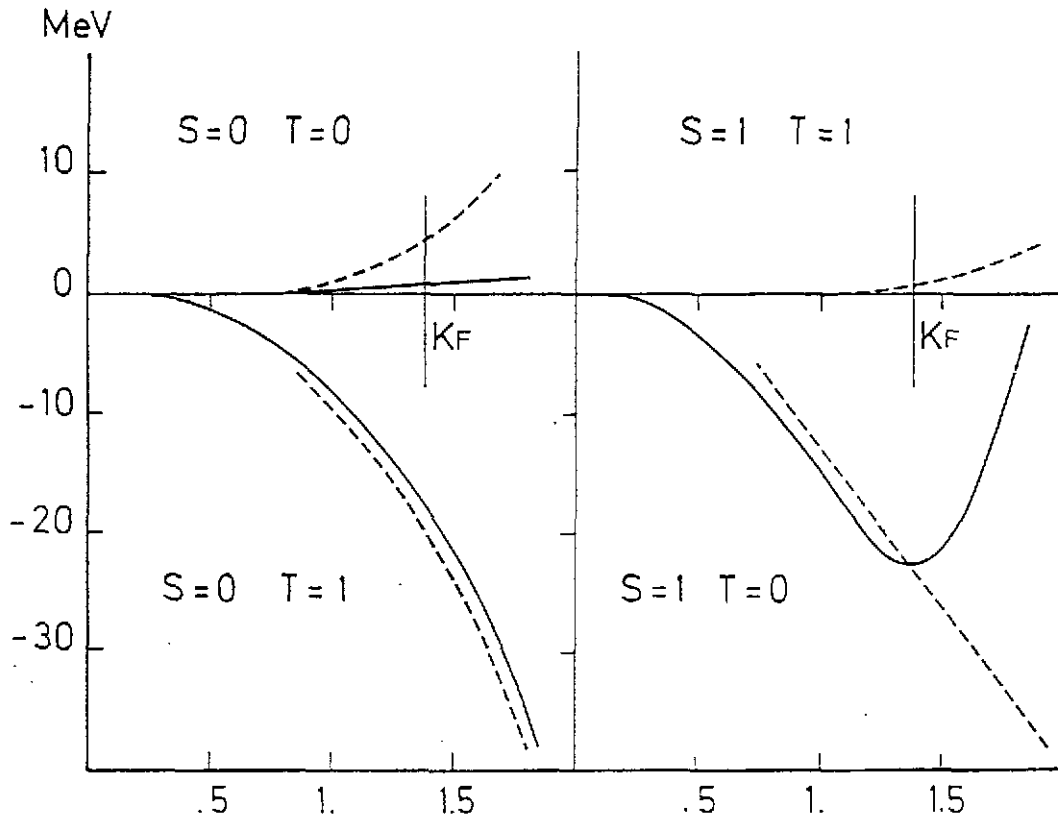


Figure 6: Courbes de saturation obtenues avec l'interaction D1 dans la matière nucléaire infinie (trait plein) comparées avec celles données par une matrice G typique (trait pointillé). S et T sont respectivement le spin total et l'isospin total de deux nucléons qui interagissent dans ce milieu. L'énergie de liaison totale par particule est la somme des quatre contributions (S,T) = (0,0), (0,1), (1,0) et (1,1). La barre verticale au point  $K_F$  donne la position du moment de Fermi au point de saturation. La contribution de l'énergie cinétique  $3\hbar^2 K_F^2 / 10M$  où  $M$  est la masse du nucléon n'est pas incluse dans ces courbes.

- d'un élément de matrice du type  $\langle \alpha S = 0 T = 1 | v_{12} | \alpha S = 0 T = 1 \rangle$  pris entre des états de l'oscillateur harmonique de deux nucléons couplés à un spin total 0 et à un isospin total 1. Cet élément de matrice gouverne les propriétés d'appariement de la force. Il est contraint à être négatif (attractif) et sa valeur est déterminée de façon à retrouver les différences de masses pair-impair dans quelques isotopes de l'étain.

L'ajustement de ces différentes quantités fournit les valeurs suivantes des paramètres de D1:  $\mu_1 = 0.7 \text{ fm}$ ,  $\mu_2 = 1.2 \text{ fm}$ ,  $W_1 = -1720.30 \text{ MeV}$ ,  $B_1 = 1300.00 \text{ MeV}$ ,  $H_1 = -1813.53 \text{ MeV}$ ,  $M_1 = 1397.60 \text{ MeV}$ ,  $W_2 = 103.64 \text{ MeV}$ ,  $B_2 = -163.48 \text{ MeV}$ ,  $H_2 = 162.81 \text{ MeV}$ ,  $M_2 = -223.93 \text{ MeV}$ ,  $t_3 = 1390.60 \text{ MeV}$ ,  $x_0 = 1$ ,  $\alpha = 1/3$  et  $W_{LS} = -130 \text{ MeV}$ .

Les propriétés de cette interaction au point de saturation dans la matière nucléaire sont:  $a_V = -16.0 \text{ MeV}$  (énergie de liaison par nucléon),  $k_F = 1.35 \text{ fm}^{-1}$  (moment de Fermi),  $K_\infty = 209 \text{ MeV}$  (module d'incompressibilité) et  $a_S = 19.0 \text{ MeV}$  (coefficient de surface).

Bien que le nombre des quantités physiques et des noyaux utilisés pour déterminer les paramètres des forces effectives telles que D1 soit réduit, ces forces effectives phénoménologiques



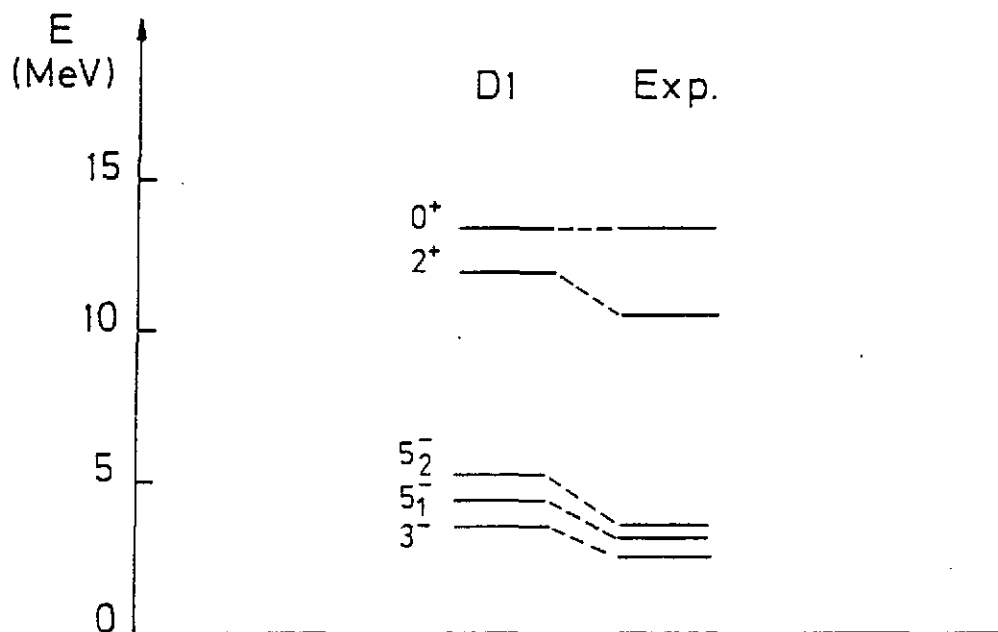
$^{208}\text{Pb}$ 

Figure 7: Energies des résonances géantes  $0^+$ ,  $2^+$ ,  $3^-$  et  $5^-$  obtenues dans le  $^{208}\text{Pb}$  avec la méthode de la RPA (Random Phase Approximation) et l'interaction de Gogny. Les énergies expérimentales ont été mesurées par le groupe de Saclay <sup>25</sup>).

se révèlent capables de rendre compte quantitativement d'un nombre impressionnant de propriétés nucléaires, ceci dans toute la table de masse. Les Figures 6, 7, 8 et le Tableau I donnent des exemples de résultats obtenus avec l'interaction D1 ainsi ajustée. Il semble que, en dépit de leur forme relativement simple, ces forces effectives simulent, sans doute par l'intermédiaire du terme en densité, des effets à N corps qui ne sont pas inclus dans une matrice G conventionnelle comme, par exemple, la transformation temporaire d'un nucléon en résonance  $\Delta$  ou l'effet de "réhabillage" des nucléons par le champ des mésons <sup>14</sup>).

Il est bon de souligner cependant que les formes de paramétrisations adoptées étant limitées, elles peuvent ne pas être applicables à tous les cas qui peuvent se présenter (noyaux très asymétriques en protons et neutrons, densités éloignées de la densité nucléaire normale, ...). D'autres incertitudes à propos de ces forces phénoménologiques concernent par exemple l'interprétation de l'interaction résiduelle lorsque les grandeurs physiques ajustées sont des quantités expérimentales dont la description dépasse le cadre du champ moyen. Il est clair que seule la comparaison avec l'expérience peut définir le domaine de validité de ces interactions. Ces remarques ne doivent naturellement pas faire oublier que l'approche qu'elles permettent de construire est authentiquement microscopique, en ce sens que les seuls paramètres utilisés sont ceux introduits dans la définition de l'interaction (moins d'une quinzaine généralement), et qu'ils sont fixés une fois pour toutes. A cet égard, le degré de phénoménologie que comporte ce genre d'approche n'a rien de commun avec celui introduit dans les modèles nucléaires courants.

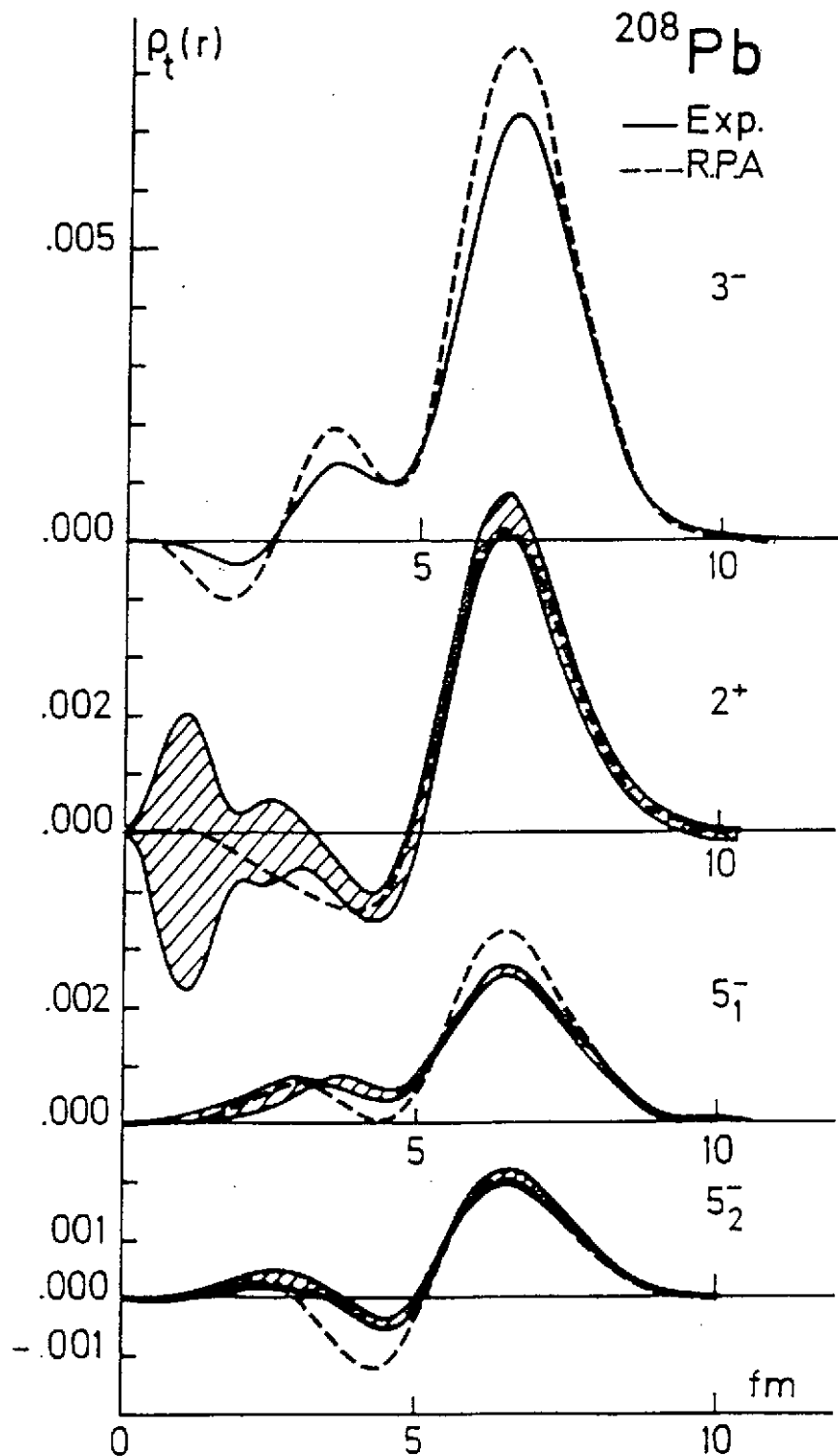


Figure 8: Densités de transition entre l'état fondamental et les états  $0^+$ ,  $2^+$ ,  $3^-$  et les deux états  $5^-$  du  $^{208}\text{Pb}$  calculées avec la méthode de la RPA (Random Phase Approximation) et l'interaction de Gogny. Ces états sont ceux dont l'énergie est donnée sur la Figure 7. Les courbes en trait plein sont les densités de transition extraites des expériences de diffusion d'électrons du groupe de Saclay <sup>25</sup>). Ces grandeurs mesurent le nombre de nucléons participant à l'excitation des différents états en fonction de leur distance au centre du noyau.

$Sn$	$B_{exp}$	$\Delta_{exp}$	$J_{exp}^{\Pi}$	$-E_{HFB}$	$\Delta_{HFB}$	$J_{HFB}^{\Pi}$
112	953.538			953.065		
113	961.284	1.271	1/2 <sup>+</sup>	960.641	1.609	1/2 <sup>+</sup>
114	971.583			971.434		
115	979.130	1.007	1/2 <sup>+</sup>	978.585	1.402	1/2 <sup>+</sup>
116	988.692			988.939		
117	995.636	1.192	1/2 <sup>+</sup>	995.860	1.386	1/2 <sup>+</sup>
118	1004.963			1005.553		
119	1011.447	1.311	1/2 <sup>+</sup>	1011.891	1.541	1/2 <sup>+</sup>
120	1020.554			1021.310		
121	1026.725	1.322	3/2 <sup>+</sup>	1027.136	1.667	11/2 <sup>-</sup>
122	1035.541			1036.295		
123	1041.487	1.272	11/2 <sup>-</sup>	1041.988	1.462	11/2 <sup>-</sup>
124	1049.978			1050.605		
125	1055.711		11/2 <sup>-</sup>	1056.121		11/2 <sup>-</sup>
132	1102.700			1102.772		

Tableau I. Résultats obtenus avec l'interaction de Gogny dans la série des isotopes de l'étain. Les deuxième, troisième et quatrième colonnes contiennent respectivement les valeurs expérimentales de l'énergie de liaison, du "gap" (différence entre l'énergie de liaison d'un isotope impair et la moyenne de celles des deux pair-pairs voisins) et du spin de l'état fondamental. Les trois colonnes suivantes contiennent les mêmes quantités calculées à l'approximation de Hartree-Fock-Bogolyubov.

Signalons pour terminer l'apparition ces dernières années d'une approche de champ moyen relativiste fondée sur la donnée d'un Lagrangien d'interaction méson-nucléon effectif local <sup>26)</sup>. Les fonctions d'onde nucléaires, supposées de particules indépendantes, sont calculées par la méthode de Hartree (c'est-à-dire, en omettant le champ moyen d'échange, cf. Chapitre **VI**), ce qui simplifie grandement les calculs numériques. Le principal avantage de cette méthode est de fournir une description de l'interaction spin-orbite à partir de l'échange d'un méson vectoriel. Les paramètres (masses des mésons et constantes de couplage aux nucléons) sont ajustées de façon à retrouver les propriétés de la matière nucléaire infinie. L'application aux noyaux finis de cette approche semble donner, dans le cadre de l'approximation considérée, des résultats quantitativement aussi satisfaisants que les approches microscopiques non relativistes <sup>27)</sup>.

## V. UNE HIERARCHIE D'APPROXIMATIONS FONDEE SUR LA THEORIE DU CHAMP MOYEN

L'approximation de champ moyen ou approximation de particules indépendantes consiste à supposer que les nucléons évoluent dans le noyau sous la seule influence d'un potentiel commun, celui qu'ils créent collectivement.

Les faits expérimentaux qui justifient cette approximation sont bien connus. Citons notamment le succès du modèle en couches avec, en particulier, la stabilité accrue des noyaux dont le nombre de neutrons et/ou de protons correspond aux nombres magiques. Une autre indication est obtenue en calculant le libre parcours moyen d'un nucléon dans le milieu nucléaire. D'après G.Bertsch <sup>28)</sup>, un nucléon ayant 10 MeV d'énergie cinétique parcourt environ 15 fm, ce qui est supérieur au diamètre des noyaux courants. Un libre parcours aussi grand provient du principe d'exclusion de Pauli. Les collisions à deux corps entre les nucléons sont fortement inhibées car une partie des états finals possibles sont déjà occupés. Il s'ensuit qu'un nucléon "ne ressent" qu'un potentiel global qui tend en moyenne à le rappeler à l'intérieur du noyau. D'une façon imagée, on peut dire que, au cours de leur mouvement, les nucléons "se heurtent" bien plus souvent à la "paroi" constituée par la surface interne du noyau qu'entre eux.

La Théorie du champ moyen peut être définie comme les différentes méthodes permettant de déterminer le champ nucléaire moyen à partir des interactions élémentaires entre les nucléons. Autrement dit, contrairement aux approches phénoménologiques du modèle en couches où le champ moyen est directement postulé sous forme paramétrisée, cette théorie se propose de le dériver. L'ingrédient de base est le hamiltonien microscopique qui gouverne la dynamique des nucléons individuels:

$$H = \sum_{i=1}^A \frac{\vec{p}_i^2}{2M} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^A v_{ij}^{eff} \quad (1)$$

$M$  est la masse du nucléon et le terme d'interaction est construit avec la force effective  $v_{ij}^{eff}$  entre les nucléons. Comme nous l'avons souligné, c'est en effet ce type de force N-N qui doit être employé dans toute approche fondée sur l'approximation de particules indépendantes.

La première des méthodes de dérivation du champ moyen qui vient à l'esprit est analogue à celle employée dans les atomes: c'est la méthode de Hartree-Fock. Elle consiste à adopter pour la fonction d'onde de l'état fondamental d'un noyau ayant  $A$  nucléons un déterminant de Slater  $\Psi_{HF}$ , c'est-à-dire un produit antisymétrisé de  $A$  orbitales de nucléons  $\phi_\alpha$ :

$$\Psi_{HF}(x_1, x_2, \dots, x_A) = \det[\phi_{\alpha_1}(x_1) \cdot \phi_{\alpha_2}(x_2) \cdot \dots \cdot \phi_{\alpha_A}(x_A)] \quad (2)$$

où  $x_i = (\vec{r}_i, \sigma_i, \tau_i)$  représente l'ensemble des variables d'espace, de spin et d'isospin du nucléon numéro  $i$  et les  $\alpha_i$  sont les nombres quantiques des orbitales occupées par les nucléons. Par exemple en symétrie sphérique, le choix habituel est  $\alpha = (n, l, j, m)$ , où  $n$  est un nombre quantique radial et  $l(l+1)$ ,  $j(j+1)$  et  $m$  sont respectivement les valeurs propres de  $\vec{l}^2$  (carré du moment orbital d'un nucléon),  $\vec{j}^2$  (carré du moment angulaire total) et  $j_z$  (projection de  $\vec{j}$  sur l'axe Oz).

Les orbitales  $\phi_\alpha$  sont obtenues en minimisant l'énergie totale du noyau

$$E = \frac{\langle \Psi_{HF} | H | \Psi_{HF} \rangle}{\langle \Psi_{HF} | \Psi_{HF} \rangle} \quad (3)$$

calculée avec le hamiltonien effectif (1).

Sans entrer dans les détails ici (voir à ce propos le Chapitre VI), l'application de ce principe variationnel conduit aux équations de Hartree-Fock:

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2M}\nabla^2 + \mathcal{U}_{HF}[\phi_\alpha]\right) \phi_{\beta_i}(x) = \epsilon_{\beta_i} \phi_{\beta_i}(x), \quad i = 1, 2, \dots, A$$

Ces équations se présentent comme un système de  $A$  équations de Schrödinger couplées dans lesquelles le potentiel est le champ moyen  $\mathcal{U}_{HF}$ . Celui-ci est une fonctionnelle des orbitales  $\phi_\alpha$  (et de l'interaction effective  $v_{ij}^{eff}$ ) de sorte que les  $A$  équations constituent en fait un système non linéaire (nous reviendrons sur la définition de  $\mathcal{U}_{HF}$  et sur les propriétés de ces équations dans le Chapitre VI). La résolution des équations Hartree-Fock fournit les orbitales des nucléons  $\phi_\alpha$ , les énergies à une particule correspondantes  $\epsilon_\beta$ , ainsi que le champ moyen  $\mathcal{U}_{HF}$ . On peut également calculer l'énergie totale du système à l'aide de (3), ce qui fournit une approximation  $E_{HF}$  de l'énergie de l'état fondamental du noyau.

Le point important que nous voulons souligner ici est que l'énergie  $E_{HF}$  et la fonction d'onde  $\Psi_{HF}$  ne sont pratiquement jamais des approximations raisonnables de l'énergie et de la fonction d'onde de l'état fondamental des noyaux. Les seules exceptions sont les noyaux magiques, c'est-à-dire les noyaux pour lesquels le dernier niveau occupé par les nucléons (le niveau de Fermi) correspond à une couche complète à la fois pour les protons et les neutrons. Dans les autres cas, la théorie du champ moyen doit être généralisée en prenant comme point de départ une fonction d'onde de forme plus riche que (2). Afin d'introduire cette généralisation, examinons tout d'abord les raisons de l'insuffisance de l'approche Hartree-Fock dans les noyaux.

### 1. Insuffisance de la méthode de Hartree-Fock

La partie gauche de la Figure 9 représente schématiquement le remplissage des niveaux dans l'état fondamental Hartree-Fock  $\Psi_{HF}$  et dans un état excité à une particule-un trou  $\Psi_{HF}^{pt}$  d'un noyau "magique" (supposé construit avec une seule sorte de particules, des neutrons par exemple). Le premier état a pour énergie  $E_{HF}$  et le second  $E_{HF} + \Delta$  où  $\Delta = \epsilon_p - \epsilon_t$  est l'énergie nécessaire pour transférer un nucléon du niveau  $t$  au niveau  $p$ . Dans le cas d'un noyau magique  $\Delta$  est au moins égal à la différence en énergie séparant deux couches majeures, c'est-à-dire typiquement 4 à 6 MeV.  $\Psi_{HF}$  est donc très loin d'être dégénéré avec les différents états excités à une particule-un trou, et, *a fortiori* avec ceux à deux particules-deux trous, trois particules-trois trous, etc ... Au contraire, dans un noyau "non magique" (partie droite de la Figure 9),  $\Delta$  est beaucoup plus petit, généralement moins de 1 MeV. Il peut même s'annuler. Il s'ensuit que  $\Psi_{HF}$  et certains des états  $\Psi_{HF}^{pt}$  ont des énergies proches, voire identiques. Ces états peuvent alors être couplés par l'interaction résiduelle qui reste entre les nucléons une fois que l'on a tenu compte du champ moyen (celle-ci est de l'ordre de 2 MeV). Plus précisément, partant du hamiltonien microscopique (1), on peut faire apparaître l'interaction résiduelle  $V$  en additionnant et soustrayant de  $H$  le champ moyen. Ceci donne:

$$H = H_0^{HF} + V \quad (4)$$

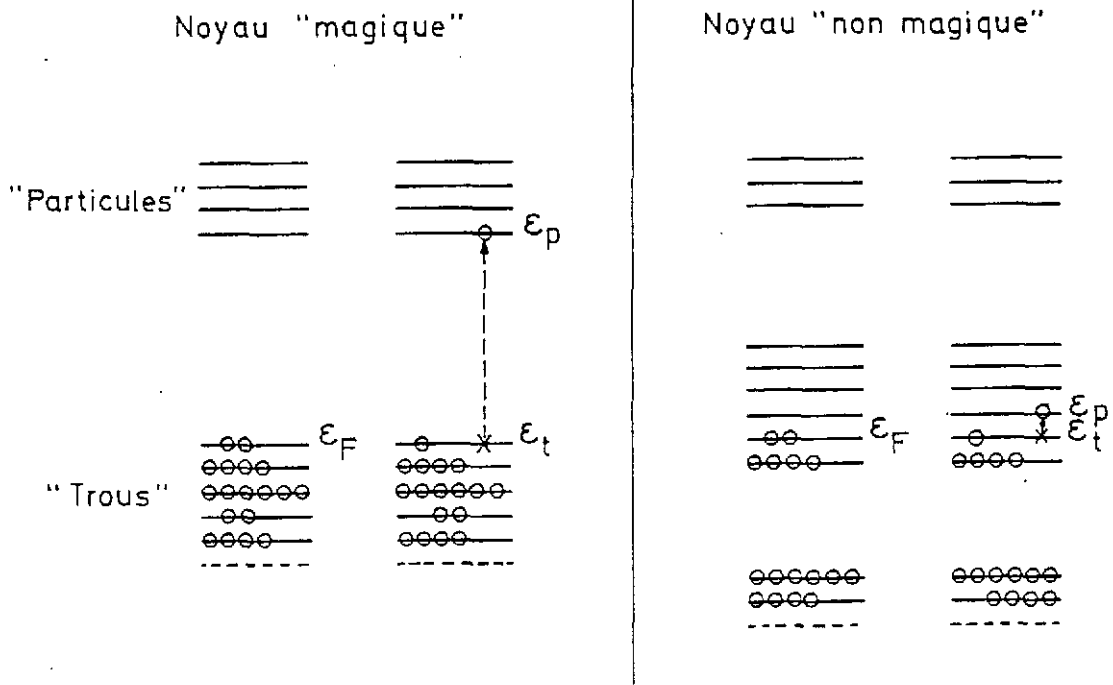


Figure 9: Représentation schématique de l'occupation des niveaux à une particule dans l'état fondamental d'un noyau et dans un état excité à une particule-un trou à l'approximation Hartree-Fock. La partie gauche de la Figure correspond à un noyau magique. Celle de droite à un noyau non magique.

avec:

$$H_0^{HF} = \sum_{i=1}^A \left[ \frac{\vec{p}_i^2}{2M} + \mathcal{U}_{HF}(i) \right] \quad (5)$$

et:

$$V = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^A v_{ij}^{eff} - \sum_{i=1}^A \mathcal{U}_{HF}(i) \quad (6)$$

Les états  $\Psi_{HF}$  et  $\Psi_{HF}^{pt}$  sont états propres de  $H_0^{HF}$ :

$$H_0^{HF} \Psi_{HF} = E_{HF} \Psi_{HF}$$

$$H_0^{HF} \Psi_{HF}^{pt} = (E_{HF} + \epsilon_p - \epsilon_t) \Psi_{HF}^{pt}$$

L'état fondamental "vrai" du noyau est en fait un état propre  $\Psi$  de  $H$  avec comme valeur propre l'énergie "vraie"  $E$  ( $E < E_{HF}$ ):

$$H \Psi = E \Psi$$

On peut formellement obtenir  $\Psi$  et  $E$  en diagonalisant  $H$  dans la base constituée de  $\Psi_{HF}$  et de l'ensemble des états excités à  $n$  particules- $n$  trous. Le résultat dépend de l'intensité du couplage introduit par les éléments de matrice de l'interaction résiduelle  $V$  comparé aux énergies d'excitation des différents états. Dans le cas d'un noyau magique, ce couplage est faible et

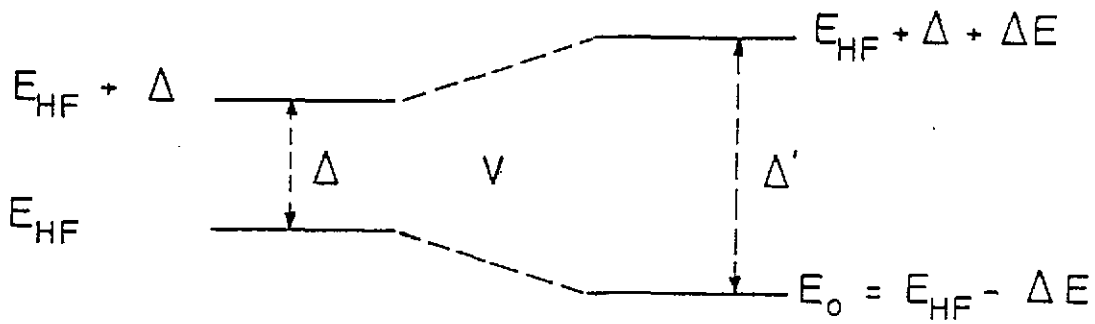


Figure 10: Effet de l'interaction résiduelle  $V$  sur les énergies de l'état fondamental et du premier état excité à une particule-un trou définis à l'approximation Hartree-Fock. Lorsque l'interaction résiduelle est "branchée", la différence en énergie entre les deux états augmente, et l'énergie de l'état fondamental est abaissée (ceci quel que soit le signe de  $V$ ).

$\Psi \simeq \Psi_{HF}$ ,  $E \simeq E_{HF}$ .  $\Psi_{HF}$  et  $E_{HF}$  sont alors de bonnes approximations de l'état fondamental et de l'énergie totale du noyau. Au contraire, dans un noyau non magique  $V$  couple fortement  $\Psi_{HF}$  et les états excités de basse énergie, de sorte que  $\Psi$  est une superposition de ces différents états. L'énergie  $E$  diffère alors notablement de  $E_{HF}$ . La situation est schématisée sur la Figure 10 dans le cas d'un seul état excité  $\Psi_{HF}^{p1}$  couplé au fondamental Hartree-Fock  $\Psi_{HF}$ . On obtient le résultat bien connu que l'effet de  $V$  est d'augmenter la différence en énergie entre l'état fondamental et l'état excité. Cette augmentation est d'autant plus grande que la différence d'énergie initiale  $\Delta$  est plus petite comparée à  $V$ . Par exemple, avec  $V = 2MeV$ ,  $\Delta = 5MeV$  devient  $\Delta' = 6.4MeV$  et l'énergie  $E_{HF}$  est abaissée de  $700keV$ . Lorsque  $\Delta = 800keV$ ,  $\Delta' = 4MeV$  et l'énergie  $E_{HF}$  est abaissée de  $1.6MeV$ , ceci avec la même valeur de  $V$ .

Etant donné que la plupart des noyaux sont non magiques, il est donc pratiquement toujours nécessaire de prendre en compte l'interaction résiduelle entre les nucléons. Une façon de le faire serait d'utiliser la méthode précédente, c'est-à-dire de diagonaliser  $H$  dans la base constituée de  $\Psi_{HF}$  et de l'ensemble de ses états excités à  $n$  particules- $n$  trous. En fait, cette méthode est la plupart du temps impraticable car le nombre des configurations excitées qu'il faut inclure pour arriver à une bonne approximation de l'énergie vraie  $E$  est généralement colossal. Devant cette impossibilité de tenir compte en une seule fois des effets de l'interaction résiduelle  $V$ , on adopte une méthode par étapes. Elle consiste à réintégrer successivement les différentes composantes de  $V$  en commençant par les plus importantes. Pour ce faire, on enrichit progressivement la forme de la fonction d'onde de l'état fondamental en prenant des expressions de plus en plus élaborées. Cette technique conduit à une hiérarchie d'approximations successives que nous allons décrire brièvement.

## 2. Inclusion des corrélations d'appariement

La composante  $S=0$ ,  $T=1$  de l'interaction résiduelle est celle qui intéresse deux nucléons de même nature et ayant les projections de leurs spins opposées (rappelons que  $S(S+1)$  et  $T(T+1)$ )

sont respectivement les valeurs propres du carré de  $\vec{S} = \vec{s}_1 + \vec{s}_2$  et du carré de  $\vec{T} = \vec{t}_1 + \vec{t}_2$ , où  $\vec{s}_1, \vec{s}_2, \vec{t}_1$  et  $\vec{t}_2$  sont les spins et isospins des deux nucléons qui interagissent). Cette composante est attractive et relativement forte. Une indication de ceci est donnée par les courbes de saturation dans la matière nucléaire infinie de la Figure 6. La composante  $S=0, T=1$  de l'interaction résiduelle crée donc une "énergie de liaison" entre deux nucléons identiques de spins opposés. Son effet est alors de générer des paires de nucléons corrélés au sein du noyau. Ce mécanisme d'appariement est très proche de celui qui apparaît entre les électrons d'un métal supra-conducteur sous l'effet de l'interaction résiduelle électron-électron attractive générée par les oscillations du réseau cristallin. De la même façon que dans les métaux, cette tendance à l'appariement suggère d'adopter pour l'état fondamental des noyaux, au lieu d'une fonction d'onde de particules indépendantes, une fonction d'onde de paires indépendantes, les paires étant constituée de deux nucléons ayant une énergie de corrélation à déterminer. Une fonction d'onde de paires de ce type est nécessairement plus riche qu'une fonction d'onde Hartree-Fock car elle se ramène à une fonction d'onde de particules indépendantes lorsque l'énergie de corrélation entre les nucléons des paires s'annule.

La théorie du champ moyen fondée sur une fonction d'onde de paires indépendantes est une généralisation de la méthode de Hartree-Fock qui porte le nom de méthode de Hartree-Fock-Bogolyubov. Nous décrivons plus en détail les fondements et la formulation de la théorie de Hartree-Fock-Bogolyubov dans le Chapitre VI. Contentons-nous de dire ici que cette théorie est calquée sur celle de Hartree-Fock: la fonction d'onde de Hartree-Fock-Bogolyubov est déterminée en minimisant l'énergie totale du noyau et conduit à des équations auto-consistantes non linéaires. Les excitations individuelles de type particule-trou de la théorie Hartree-Fock sont remplacées par des excitations "à deux quasi-particules". Lorsque leur énergie est grande (5 MeV ou plus) celles-ci sont pratiquement identiques à des excitations particule-trou de la théorie Hartree-Fock. Autrement dit, ces excitations consistent à transférer un nucléon d'une orbite basse à une orbite d'énergie plus élevée. Les excitations à deux quasi-particules de basse énergie (au voisinage de 2 MeV) représentent au contraire un phénomène complètement différent: elles consistent à briser la corrélation qui existe entre deux nucléons appariés.

### 3. Inclusion des corrélations responsables des excitations collectives

Dans la méthode de Hartree-Fock-Bogolyubov l'état fondamental est approchée par une fonction d'onde de paires indépendantes  $\Psi_{HFB}$  qui incorpore une partie de l'interaction résiduelle  $V$ . Il en résulte qu'après avoir appliqué la méthode de Hartree-Fock-Bogolyubov l'interaction résiduelle  $V'$  qui demeure est plus petite que  $V$  (dans le cas d'un noyau magique, où l'appariement est nul, on a évidemment  $\Psi_{HFB} = \Psi_{HF}$  et  $V' = V$ ). En adoptant une décomposition de  $H$  du type (4), ceci peut s'écrire formellement:

$$H = H_0^{HF} + V = H_0^{HFB} + V', \quad \|V'\| \leq \|V\| \quad (7)$$

où  $H_0^{HFB}$  est un hamiltonien de paires indépendantes défini d'une façon analogue à (5).



Bien que plus faible en général que  $V$ ,  $V'$  n'est pas nécessairement négligeable. L'expérience prouve que son principal rôle est de générer des excitations du noyau qui sont des superpositions cohérentes d'un grand nombre d'excitations élémentaires particule-trou (ou, plus précisément, d'excitations de quasi-particules). Autrement dit,  $V'$  est responsable du mouvement collectif des nucléons. L'utilité d'incorporer cette composante de l'interaction résiduelle dans la description de l'état fondamental des noyaux est déterminée en analysant le comportement du noyau lorsqu'on l'oblige à se déformer. Pour ce faire la méthode habituelle consiste à chercher l'état d'énergie la plus basse du noyau lorsqu'il est en équilibre avec des champs extérieurs qui le polarisent. Mathématiquement, cette méthode revient à ajouter au hamiltonien microscopique (1) les opérateurs  $Q_i$  qui décrivent les champs extérieurs, avec un facteur multiplicatif  $\lambda_i$  qui en définit l'intensité:

$$H \longrightarrow H - \lambda_1 \cdot Q_1 - \lambda_2 \cdot Q_2 - \dots \quad (8)$$

puis à résoudre les équations de Hartree-Fock-Bogolyubov. Cette technique est la méthode de Hartree-Fock-Bogolyubov avec contraintes. L'emploi de plusieurs opérateurs  $Q_i$  permet d'imposer différents types de déformations au noyau (élongation, triaxialité, déformation en poire, ..., voir plus loin). Avec des champs extérieurs et des intensités convenablement choisis, il est possible de communiquer au noyau une forme caractérisée par des paramètres de déformation  $q_1, q_2, \dots$  arbitraires. En faisant varier les paramètres  $\lambda_i$ , les déformations  $q_i$  communiquées au noyau changent. Cette méthode fournit ainsi un ensemble d'états de Hartree-Fock-Bogolyubov  $\Psi_{HFB}(q)$  indicés par un jeu de paramètres  $(q_1, q_2, \dots) \equiv q$ , et un ensemble de valeurs de l'énergie de Hartree-Fock-Bogolyubov:

$$E_{HFB}(q) = \frac{\langle \Psi_{HFB}(q) | H | \Psi_{HFB}(q) \rangle}{\langle \Psi_{HFB}(q) | \Psi_{HFB}(q) \rangle} \quad (9)$$

Cette fonction de  $q$  est la surface d'énergie potentielle du noyau dans l'espace des déformations générées par les  $Q_i$ . Elle mesure l'énergie qu'il faut donner au noyau pour lui communiquer des déformations représentées par  $q$ , c'est-à-dire l'énergie de déformation du noyau.

Les surfaces d'énergie potentielle des noyaux sont des quantités essentielles car elles donnent des indications sur la déformabilité du noyau. La Figure 11 donne une représentation schématique de surfaces d'énergie potentielle vis-à-vis d'un seul type de déformation  $q$ . Celui-ci est, par exemple, le moment quadrupolaire du noyau, une quantité qui mesure son élongation.  $q_0$  est la déformation du noyau lorsqu'on applique la méthode de Hartree-Fock-Bogolyubov sans contraintes. C'est en effet la déformation qui minimise l'énergie totale du noyau. Pour obtenir les autres points des surfaces d'énergie potentielle il est nécessaire d'employer la méthode de Hartree-Fock-Bogolyubov avec une contrainte d'intensité variable. En partant de  $q_0$  et en augmentant l'intensité de la contrainte, les états du noyau que fournit la méthode de Hartree-Fock-Bogolyubov sont de plus en plus déformés. Nous supposons ici que la déformation  $q_1$  représentée sur la Figure est suffisamment éloignée de  $q_0$  pour que les fonctions d'onde Hartree-Fock-Bogolyubov obtenues en  $q_0$  et en  $q_1$  soient devenues pratiquement orthogonales,

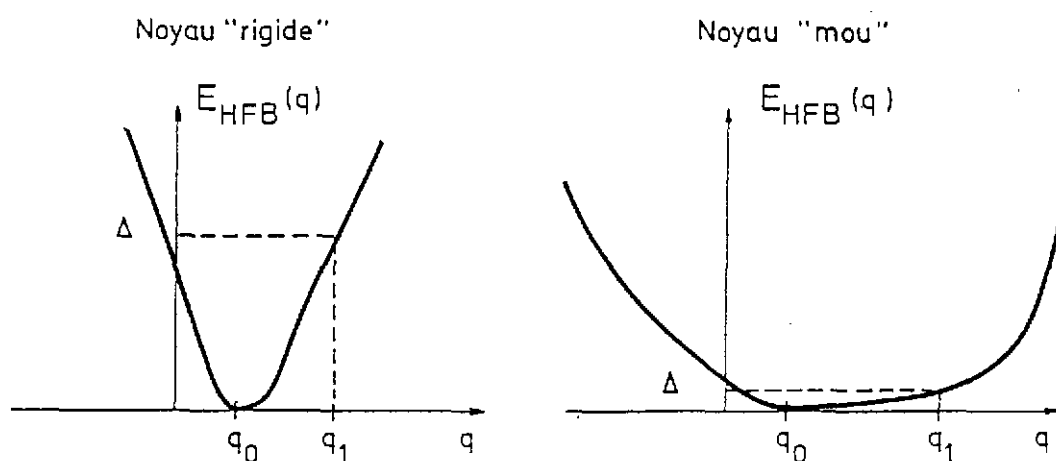


Figure 11: Représentation schématique des surfaces d'énergie potentielle vis-à-vis d'un seul type de déformation  $q$  dans le cas d'un noyau rigide (à gauche) et dans le cas d'un noyau mou (à droite).  $q_0$  est la déformation qui minimise l'énergie totale, et  $q_1$  est défini dans le texte.

c'est-à-dire:

$$\langle \Psi_{HFB}(q_0) | \Psi_{HFB}(q_1) \rangle \simeq 0$$

(Notons à ce propos que les différents états  $\Psi_{HFB}(q)$  ne constituent pas un ensemble d'états orthogonaux: si on suppose ces états normés, les recouvrements  $\langle \Psi_{HFB}(q) | \Psi_{HFB}(q') \rangle$  valent l'unité lorsque  $q = q'$  et sont des fonctions (généralement) continues décroissantes de  $|q - q'|$ . La partie gauche de la Figure représente un noyau "rigide". Dans ce cas, la différence en énergie

$$\Delta = E_{HFB}(q_1) - E_{HFB}(q_0)$$

entre les états  $\Psi_{HFB}(q_1)$  et  $\Psi_{HFB}(q_0)$  est supérieure aux éléments de matrice de l'interaction résiduelle  $V'$  obtenue en  $q_0$ .  $\Psi_{HFB}(q_0)$  est alors une bonne approximation de l'état fondamental du noyau. Au contraire, dans le cas d'un noyau "mou" (partie droite de la Figure), la différence en énergie  $\Delta$  est petite, et l'interaction résiduelle  $V'$  est capable de coupler des états de Hartree-Fock-Bogolyubov ayant deux déformations différentes. Cette situation est analogue à celle décrite dans le paragraphe 1 à propos des excitations particule-trous d'un état déterminé par la méthode de Hartree-Fock. L'interaction résiduelle  $V'$  ne peut pas être négligée dans le cas d'un noyau mou et il est nécessaire d'adopter pour la fonction d'onde de l'état fondamental une forme plus générale qu'un état de Hartree-Fock-Bogolyubov afin de prendre en compte son effet.

La Figure 12 donne des exemples de surfaces d'énergie potentielle obtenues avec une contrainte sur le moment quadrupolaire de masse dans les isotopes du Fer, du Nickel et du Zinc. L'énergie de déformation n'a pas été tracée sur cette Figure en fonction de la valeur moyenne du moment quadrupolaire de masse, mais en fonction d'un paramètre de déformation

$$\beta = (\pi/5)^{1/2} A^{-1} \langle r^2 \rangle^{-1} \times q_{20} \quad (10)$$

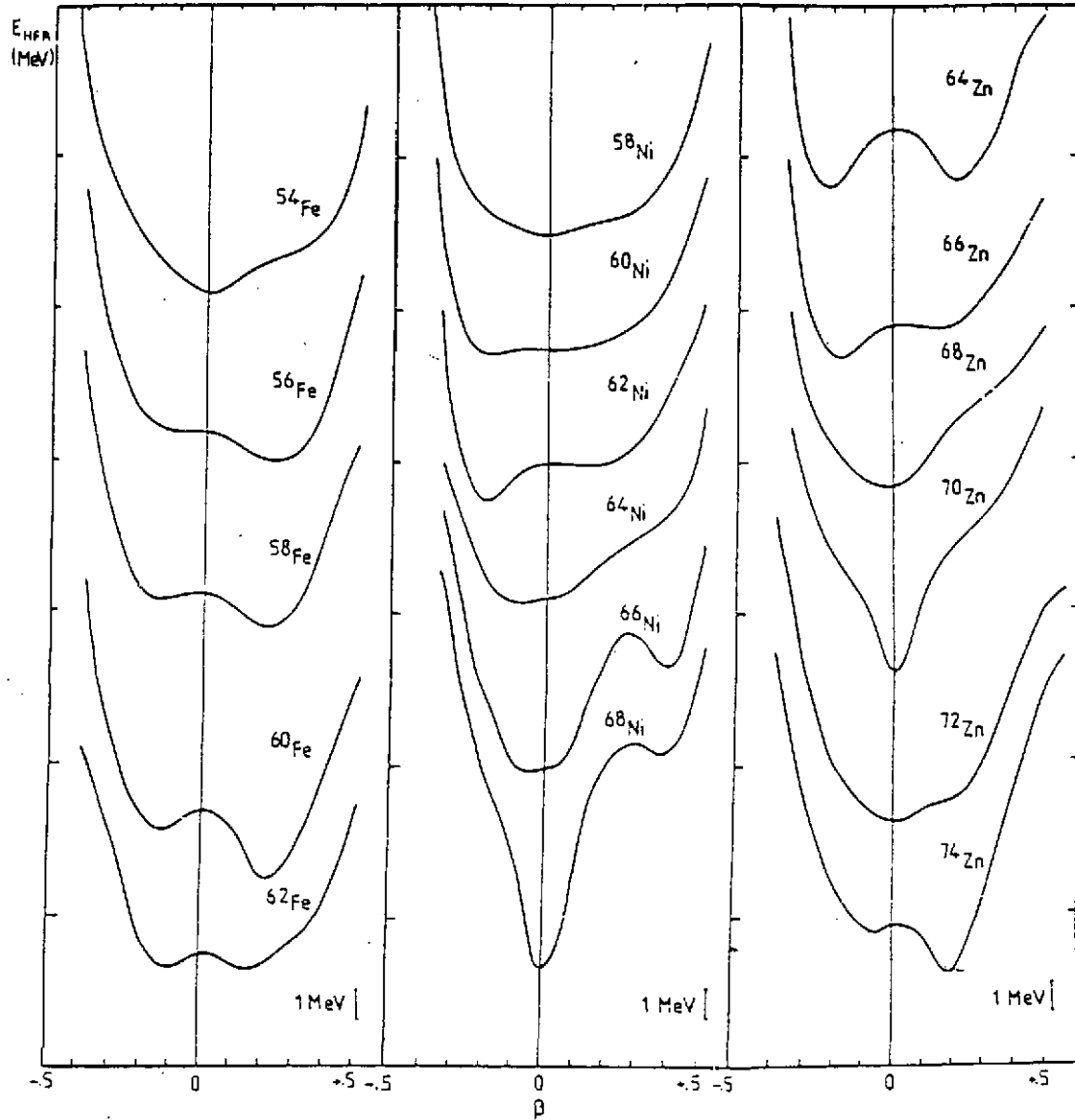


Figure 12: Surfaces d'énergie potentielle obtenues avec une contrainte sur le moment quadrupolaire de masse dans les isotopes du Fer, du Nickel et du Zinc. L'énergie de déformation n'est pas représentée en fonction du moment quadrupolaire mais en fonction d'un paramètre de déformation  $\beta$  qui lui est proportionnel (voir le texte).

qui lui est proportionnel. L'avantage de ce paramètre est de mesurer la déformation quadrupolaire intrinsèque des noyaux indépendamment de leur nombre de masse. Cette Figure ne permet pas de juger parfaitement du degré de mollesse des isotopes représentés: il faudrait donner pour chacun d'eux l'équivalent de la déformation  $q_1$  de la Figure 11. En fait, les calculs réalisés pour tracer ces courbes indiquent que la plupart des noyaux représentés sont mous. Les seules exceptions sont le  $^{68}\text{Ni}$ , le  $^{70}\text{Zn}$  et, à un moindre degré le  $^{66}\text{Ni}$ . Ceci signifie que parmi les noyaux de cette Figure, ces derniers sont les seuls pour lesquels l'état fondamental peut être représenté par un état de Hartree-Fock-Bogolyubov unique. Cette situation pourrait être généralisée à pratiquement toute la table de masse, hormis peut-être les noyaux légers: à l'instar de la

méthode de Hartree-Fock, la méthode de Hartree-Fock-Bogolyubov simple (sans contraintes) ne permet pas de trouver l'état fondamental d'un grand nombre de noyaux ....

Il est relativement aisé de deviner quel type de fonction d'onde peut convenir à la description de l'état fondamental d'un noyau mou: l'interaction résiduelle  $V'$  ayant tendance à mélanger les états ayant des déformations différentes, il semble naturel de choisir comme forme de fonction d'onde un "mélange de configurations" constitué des états de Hartree-Fock-Bogolyubov pris à toutes les déformations possibles. Etant donné que les déformations sont repérées par un indice continu  $q$ , ceci conduit à une superposition d'états sous forme intégrale du type:

$$\tilde{\Psi}(x_1, x_2, \dots, x_A) = \int f(q) \Psi_{HFB}(q)(x_1, x_2, \dots, x_A) dq \quad (11)$$

La variable  $q$  représente éventuellement un ensemble de plusieurs paramètres de déformation  $q = (q_1, q_2, \dots)$ . Autrement dit, l'intégrale peut être une intégrale multiple. Les coefficients de la superposition linéaire que constitue (11) sont représentés par la fonction  $f(q)$ . Cette fonction est *a priori* inconnue. La méthode la plus naturelle pour la déterminer (et ceci est une constante de toute approche microscopique du noyau) consiste à procéder de la même façon que dans les théories Hartree-Fock et Hartree-Fock-Bogolyubov, c'est-à-dire à minimiser l'énergie totale du noyau construite avec le hamiltonien microscopique (1). Ce principe variationnel fournit une équation pour  $f(q)$  qui se présente sous forme intégrale. La théorie fondée sur la fonction d'onde (11) constitue la méthode de la Coordonnée Génératrice, proposée par Hill et Wheeler il y a près de quarante ans <sup>29)</sup>, et l'équation intégrale donnant les  $f(q)$  est souvent appelée "équation de Hill-Wheeler". Nous en dirons quelques mots de plus dans le Chapitre VII. En particulier, nous montrerons comment, sous certaines conditions, ce type d'équation intégrale peut se ramener à une équation différentielle du second ordre qui présente beaucoup de ressemblance avec une équation de Schrödinger. Un exposé détaillé de la méthode de la Coordonnée Génératrice dans toute sa généralité est donné dans le Cours de P.-H. Heenen à cette Ecole.

La méthode de la Coordonnée Génératrice permet donc de déterminer la fonction d'onde de l'état fondamental des noyaux mous ainsi que son énergie. Il est important de noter qu'elle fournit également les excitations collectives (énergies et fonctions d'onde) correspondant aux modes collectifs introduits dans la superposition (11). En effet, résoudre l'équation de Hill-Wheeler revient à diagonaliser le hamiltonien microscopique (1) dans l'espace sous-tendu par les états de Hartree-Fock-Bogolyubov déformés  $\Psi_{HFB}(q)$ . La méthode fournit donc un ensemble d'états propres et de valeurs propres de l'énergie que l'on peut interpréter comme représentant l'état fondamental (corrélé) du noyau et ses excitations collectives. Nous donnerons des exemples de spectres d'états collectifs obtenus de cette façon dans le Chapitre VII.

Pour terminer ce paragraphe, précisons que la méthode de Hartree-Fock-Bogolyubov avec contraintes ne sert pas simplement à tester le rôle de l'interaction résiduelle dans la description de l'état fondamental des noyaux, c'est-à-dire à déterminer leur degré de mollesse. Les surfaces d'énergie potentielle peuvent être étendues à des déformations très éloignées de celles

de l'état fondamental et leur structure aux grandes déformations donne des renseignements fondamentaux sur les différents états que peut adopter le noyau. Par exemple, la présence de minima secondaires indique l'existence d'états isomériques de forme. De même, en prolongeant à l'extrême les surfaces d'énergie potentielle on obtient le chemin de fission des noyaux lourds. Des exemples de telles surfaces d'énergie potentielle sont donnés dans les Figures 14 à 18.

#### 4. Inclusion d'autres types de corrélations

Il est clair qu'arrivé à ce point, le lecteur courageux se doutera qu'inclure dans la description de l'état fondamental d'un noyau les corrélations de longue portée responsable des excitations collectives n'est pas forcément suffisant. Il n'est pas exclu, en effet, qu'une partie de l'interaction résiduelle "restante"  $V''$  couple un état fondamental du type (11) à certaines de ses excitations. Quelle peut être la nature de ces excitations ? Imaginons une surface d'énergie potentielle ( $S_0$ ) représentant les variations de  $E_{HFB}(q)$  et la surface d'énergie potentielle ( $S_1$ ) obtenue en ajoutant en chaque point  $q$  l'énergie de l'excitation élémentaire à deux quasi-particules la plus basse  $\Delta E(q)$ . ( $S_1$ ) représente les variations de  $E_{HFB}^{(1)}(q) = E_{HFB}(q) + \Delta E(q)$ , énergie de l'état excité à deux quasi-particules  $\Psi_{HFB}^{(1)}(q)$ . En principe,  $V''$  couple faiblement les états  $\Psi_{HFB}(q)$  et  $\Psi_{HFB}^{(1)}(q)$  pris à la même déformation. Ceci est une conséquence de la description de ces états à l'approximation de Hartree-Fock-Bogolyubov. En revanche,  $V''$  est capable de coupler des états  $\Psi_{HFB}(q)$  et  $\Psi_{HFB}^{(1)}(q')$  pris à des déformations différentes  $q$  et  $q'$ . En effet il est tout-à fait possible de trouver deux déformations  $q$  et  $q'$  telles que  $E_{HFB}(q) \simeq E_{HFB}^{(1)}(q')$ . Dans une telle situation, l'état fondamental du noyau doit inclure à la fois les états  $\Psi_{HFB}(q)$  et les états excités  $\Psi_{HFB}^{(1)}(q')$ . Ce couplage particulier combinant des excitations individuelles et des excitations de type collectif est souvent dénommé "couplage quasi-particule vibration". Pour en tenir compte, il faut une fois de plus généraliser le forme de la fonction d'onde de l'état fondamental: la discussion qui précède montre que la fonction d'onde (11) pourra par exemple être remplacée par:

$$\bar{\Psi} = \int (f^{(0)}(q) \Psi_{HFB}(q) + f^{(1)}(q) \Psi_{HFB}^{(1)}(q)) dq \quad (12)$$

où la dépendance en  $(x_1, x_2, \dots, x_A)$  des fonctions  $\Psi$  est sous-entendue. Les fonctions inconnues  $f^{(0)}$  et  $f^{(1)}$  devront (comme toujours) être déterminées en minimisant la valeur moyenne de l'énergie construite avec le hamiltonien (1). Les équations que l'on obtient pour ces fonctions se présentent comme deux équations de Hill-Wheeler couplées. De la même façon que dans le cas de la méthode de la Coordonnée Génératrice simple, leur résolution fournit non seulement les coefficients de mélange de l'état fondamental, mais également tout un spectre d'états excités. Notons que l'on peut imaginer des formes encore plus générales que (12), où non plus un seul, mais plusieurs types d'excitations individuelles de quasi-particules sont introduites à chaque déformation. Dans ce cas les équations à résoudre forment un système d'équations intégrales couplées. La structure de l'état fondamental et des états excités qui en résulte est alors extrêmement riche.

Signalons que le couplage entre excitations individuelles et collectives est particulièrement

nécessaire dans les noyaux impairs en protons et/ou en neutrons. Ces noyaux sont en effet décrits à l'approximation du "blocking" de la méthode de Hartree-Fock-Bogolyubov, approximation qui consiste à les considérer comme une excitation à une quasi-particule du noyau pair-pair voisin. Dans ce cas, il arrive souvent que l'excitation à une quasi-particule soit pratiquement dégénérée avec une excitation collective du "coeur" pair-pair. L'interaction résiduelle est alors capable de coupler ces deux types d'excitations, et il devient nécessaire d'adopter une fonction d'onde telle que (12) pour l'état fondamental de ces noyaux.

En fait, il est clair que le traitement du couplage entre modes individuels et collectifs avec une fonction d'onde ressemblant à (12) soulève de grandes difficultés numériques. Ceci explique certainement l'absence à peu près totale (à la connaissance de l'auteur) de travaux entrepris jusqu'ici dans ce domaine (nous entendons: dans un cadre complètement microscopique). Citons cependant les travaux d'esprit très proche réalisés avec la force de Skyrme où le couplage quasi-particule - rotations est décrit de façon entièrement microscopique<sup>30</sup>. En ce qui concerne les vibrations, on sait que l'inclusion de leur couplage aux excitations individuelles est nécessaire dans de nombreux noyaux. Par exemple, certains isotopes de l'étain ont des états collectifs au voisinage de 2 MeV, énergie proche de la première excitation à deux quasi-particules. Dans ce cas, l'état fondamental et le premier état excité sont nécessairement des mélanges d'excitations collectives et individuelles. Une description correcte de ces noyaux nécessite donc en principe d'employer une fonction d'onde au moins aussi générale que (12).

### 5. Choix des champs extérieurs de contrainte

Comment détermine-t-on le nombre et la nature des champs extérieurs à introduire dans la méthode de Hartree-Fock-Bogolyubov avec contraintes?

D'une façon générale, on peut dire que le choix de ces champs extérieurs est en grande partie dicté par l'expérience (au double sens du terme). Les excitations collectives de basse énergie correspondent toujours à des modes de vibration de multipolarité basse (quadrupolaire et octupolaire le plus souvent). Aussi, emploie-t-on la plupart du temps les opérateurs multipolaires d'ordre 2 et 3 pour tester les propriétés collectives des noyaux au voisinage de leur état fondamental. Exprimés en représentation  $\vec{r} = (r, \theta, \varphi)$ , ce sont:

- le moment quadrupolaire axial:  $\hat{Q}_{20} = \sqrt{16\pi/5} \sum_{i=1}^A r_i^2 Y_2^0(\theta_i, \varphi_i)$
- le moment quadrupolaire triaxial:  $\hat{Q}_{22} = \sqrt{4\pi/5} \sum_{i=1}^A r_i^2 (Y_2^2(\theta_i, \varphi_i) + Y_2^{-2}(\theta_i, \varphi_i))$
- le moment octupolaire:  $\hat{Q}_{30} = \sqrt{4\pi/7} \sum_{i=1}^A r_i^3 Y_3^0(\theta_i, \varphi_i)$

Ces opérateurs sont des moments multipolaires de masse, c'est-à-dire incluant les  $A$  nucléons, différents des opérateurs multipolaires de charge qui servent à définir les transitions électriques entre deux niveaux nucléaires. Les opérateurs ci-dessus agissent respectivement sur l'allongement du noyau le long de l'axe (intrinsèque) Oz, sur sa déformation relative le long des axes Ox et Oy et sur son asymétrie droite-gauche (droite signifiant  $z > 0$  et gauche  $z < 0$ ). Les

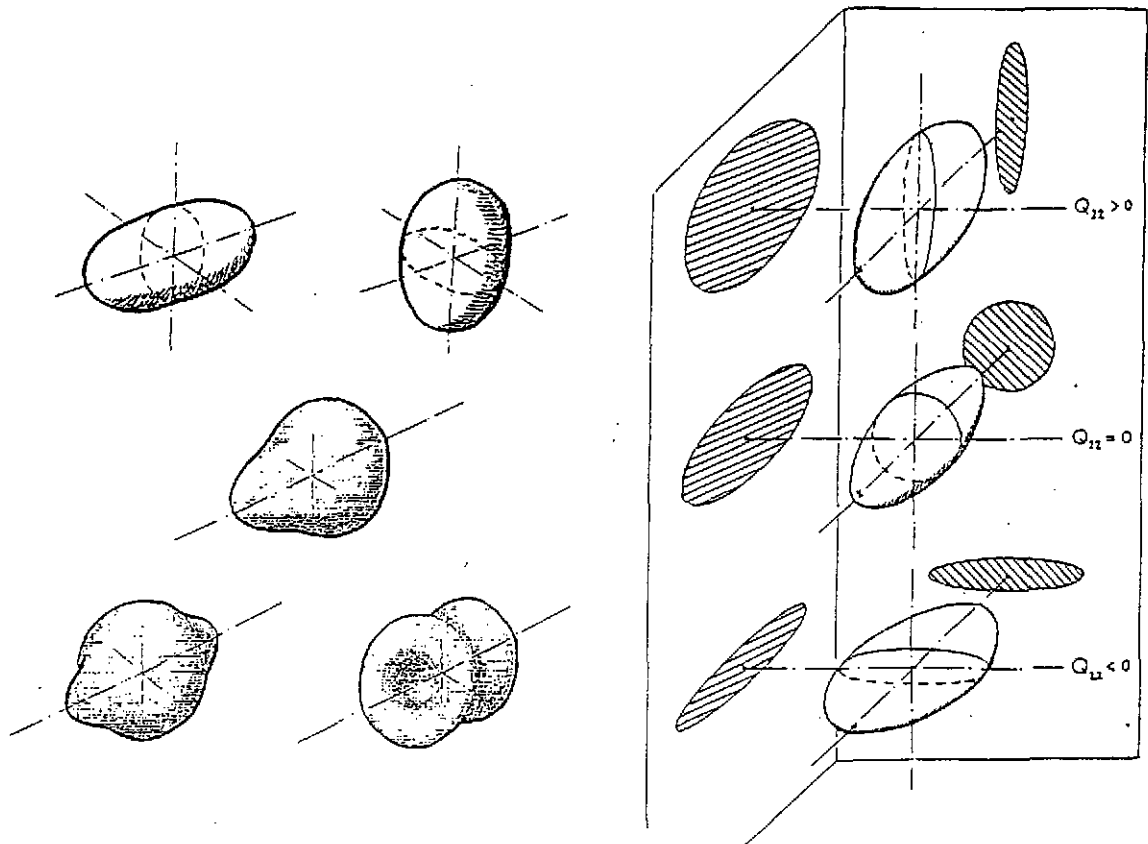


Figure 13: Partie gauche, de haut en bas et de gauche à droite: formes nucléaires ayant respectivement: un moment quadrupolaire  $q_{20}$  positif, un moment quadrupolaire négatif, un moment octupolaire  $q_{30}$  non nul, un moment hexadécapolaire  $q_{40}$  positif, un moment hexadécapolaire négatif. Partie droite, de haut en bas: formes nucléaires correspondant à des valeurs positives, nulles et négatives du moment quadrupolaire triaxial  $q_{22}$ . La direction verticale est celle de l'axe  $Oy$ . L'axe  $Oz$  pointe vers l'arrière de la Figure.

déformations qu'ils engendrent sont représentées sur la Figure 13. Notons que l'on se sert de ces opérateurs non seulement pour générer des déformations nucléaires, mais également pour les mesurer. Par exemple, les degrés d'allongement, de triaxialité, d'asymétrie droite-gauche d'un noyau sont définis par les valeurs moyennes:

$$\begin{aligned}
 q_{20} &= \langle \Psi_{HFB} | \hat{Q}_{20} | \Psi_{HFB} \rangle \\
 q_{22} &= \langle \Psi_{HFB} | \hat{Q}_{22} | \Psi_{HFB} \rangle \\
 q_{30} &= \langle \Psi_{HFB} | \hat{Q}_{30} | \Psi_{HFB} \rangle
 \end{aligned}
 \tag{13}$$

Lorsqu'on étudie les grandes déformations, les formes nucléaires peuvent devenir plus complexes et d'autres types de opérateurs de contrainte peuvent devenir nécessaires, en particulier le moment hexadécapolaire:  $\hat{Q}_{40} = \sqrt{4\pi/9} \sum_{i=1}^A r_i^4 Y_4^0(\theta_i, \varphi_i)$ . Celui-ci permet de faire varier par exemple le degré de "striction", c'est-à-dire le degré de formation d'un "cou" dans un noyau allongé. Une autre façon d'agir sur le degré de striction est d'employer un opérateur du type  $\hat{Q}_N = \sum_{i=1}^A \exp(-z_i^2/a^2)$ , où  $a$  vaut quelques  $fm$ . On voit facilement que la valeur moyenne:  $q_N = \langle \Psi_{HFB} | \hat{Q}_N | \Psi_{HFB} \rangle$  mesure directement le nombre de nucléons dans une région

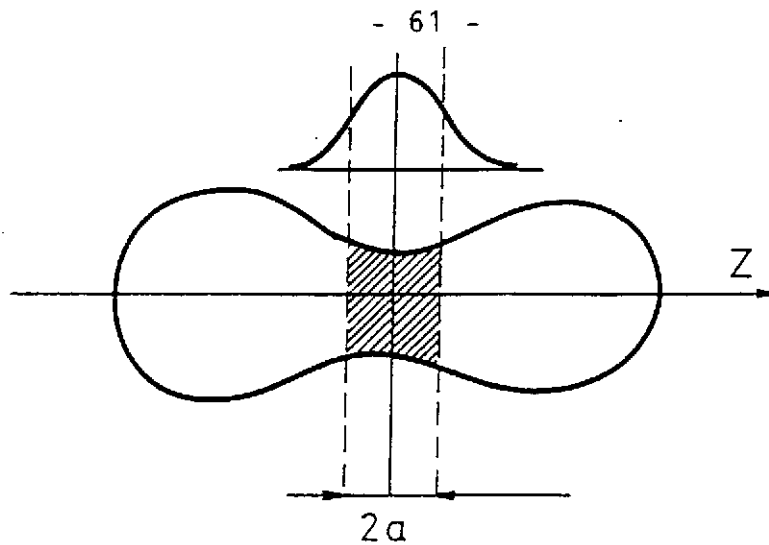


Figure 14: Représentation schématique de la région du noyau où agit l'opérateur de contrainte  $\hat{Q}_N$  défini dans le texte.

d'extension  $a$  entourant le plan  $z = 0$ , la zone centrale du noyau (cf. Fig. 14).

Les Figures 15 à 18 donnent des exemples de surfaces d'énergie potentielle nucléaires à une ou deux dimensions construites avec des contraintes multipolaires. La Figure 15 montre la barrière de fission des isotopes 232 et 230 du thorium. Ces surfaces d'énergie potentielle ont été obtenues en symétrie axiale (le noyau est supposé de révolution autour de l'axe  $Oz$ ) avec une contrainte sur le seul moment quadrupolaire de masse. L'échelle horizontale n'est pas ici  $q_{20}$ , mais la distance  $d$  entre les centres de masse des deux moitiés du noyau définies par le plan  $z = 0$ . La symétrie droite-gauche n'a pas été imposée. En fait, le noyau adopte une forme en poire au niveau de la seconde barrière de fission, c'est-à-dire pour des valeurs de  $d$  supérieures à  $9 fm$ . On observe que ces noyaux ont trois "puits": celui de l'état fondamental, le puits de l'isomère de fission contenant les états de "Classe II" qui apparaissent souvent sous forme de résonances dans les sections efficaces de fission, et un "troisième puits" pouvant contenir des états de vibration. L'existence de ce troisième puits et des états de vibration qui lui sont associés a été démontrée expérimentalement d'une façon particulièrement claire par J. Blons et D. Paya dans les isotopes impairs du Thorium voisins <sup>31</sup>.

La Figure 16 représente des surfaces d'énergie potentielle triaxiales pour le <sup>150</sup>Nd et le <sup>192</sup>Hg. Ces surfaces sont tracées dans la représentation polaire  $(\beta, \gamma)$  des variables  $q_{20}$  et  $q_{22}$ , introduite par A. Bohr <sup>32</sup>. La définition adoptée ici, compte tenu des expressions (13) pour  $\hat{Q}_{20}$  et  $\hat{Q}_{22}$ , est telle que:

$$\begin{aligned} q_{20} &= \sqrt{5/\pi} A \langle r^2 \rangle \beta \cos \gamma \\ q_{22} &= \sqrt{5/(2\pi)} A \langle r^2 \rangle \beta \sin \gamma \end{aligned} \quad (14)$$

où  $A$  est le nombre de masse du noyau et  $\langle r^2 \rangle$  son rayon carré moyen. Ces deux quantités sont introduites dans la définition (14) afin que la variable radiale  $\beta$  mesure la déformation nuclé-



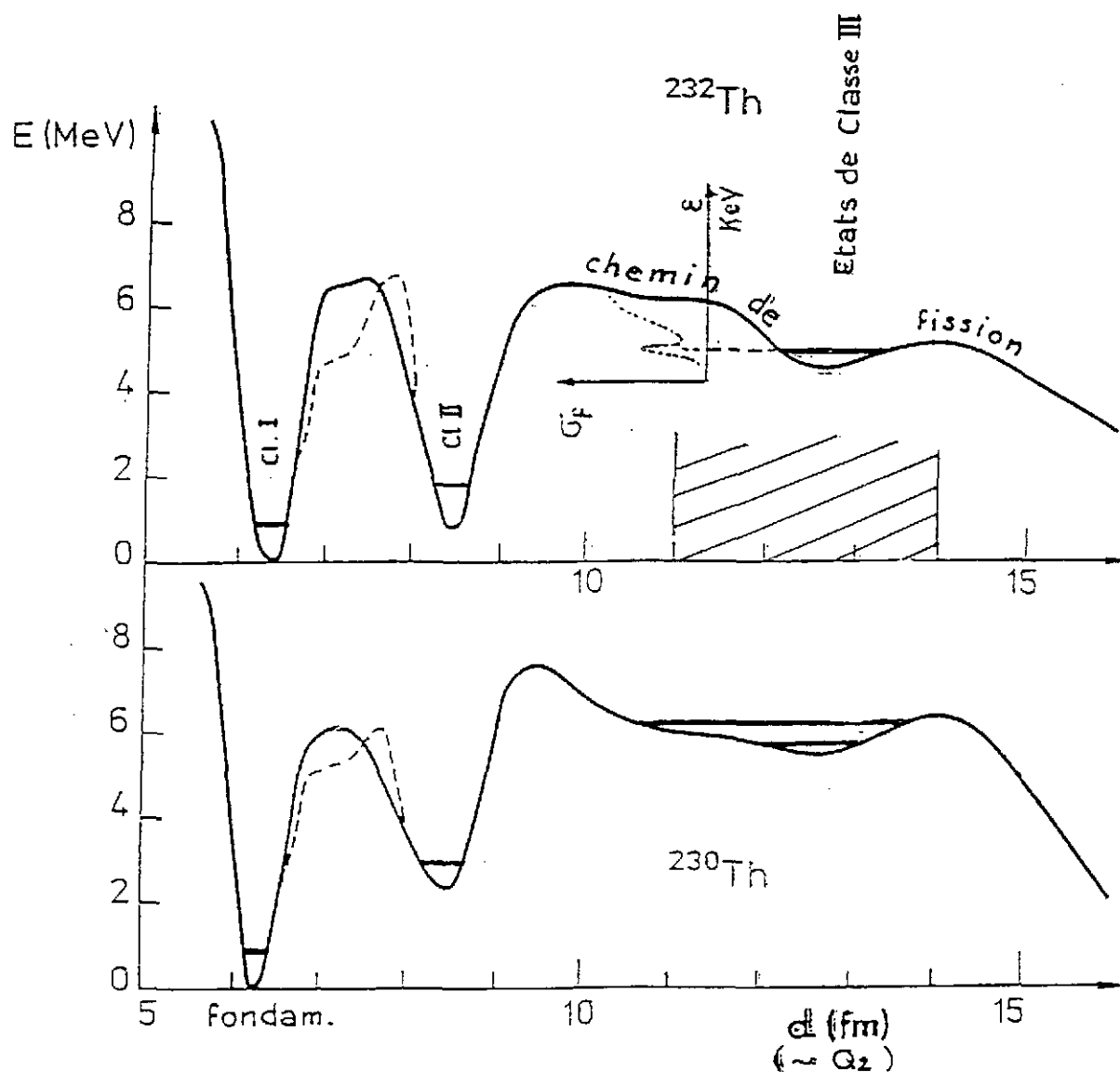


Figure 15: Barrières de fission obtenues avec une contrainte sur le moment quadrupolaire de masse  $\hat{Q}_{20}$  dans les isotopes 230 et 232 du Thorium. L'échelle horizontale,  $d$ , est une fonction de  $q_{20} = \langle \hat{Q}_{20} \rangle$  définie dans le texte. Le noyau est supposé de révolution autour de  $Oz$ . Au-delà de  $d = 9 \text{ fm}$  il adopte une forme "en poire". Ces deux noyaux ont la particularité de présenter un "troisième puits" aux très grandes déformations ( $d \simeq 12.5 \text{ fm}$ ), puits dont l'existence a été prouvé expérimentalement dans les isotopes voisins <sup>31</sup>).

aire globale indépendamment de sa taille. L'angle  $\gamma$  est une mesure de la triaxialité du noyau:  $\gamma = 0 \text{ deg}$  correspond à un noyau axial autour de  $Oz$ ,  $\gamma = 60 \text{ deg}$  à un noyau axial autour de  $Oy$ , et les valeurs  $0 < \gamma < 60 \text{ deg}$  aux formes intermédiaires entre ces deux situations. Les cinq autres sextants que l'on pourrait construire en faisant varier  $\gamma$  au-delà de  $60 \text{ deg}$  ne représentent pas des formes de noyau nouvelles. Ils traduisent simplement la modification des paramètres  $q_{20}$  et  $q_{22}$  obtenue en permutant le nom des axes intrinsèques  $Ox$ ,  $Oy$ ,  $Oz$ . En ce qui concerne les surfaces d'énergie potentielle de la Figure, on remarque en particulier la présence d'un puits isomérique dans le  $^{192}\text{Hg}$  pour une déformation axiale ( $\gamma = 0$ ) élevée  $\beta \simeq .6$ . Aucun minimum

de ce type n'est présent dans le  $^{150}\text{Nd}$ . Nous reviendrons sur les excitations collectives de ces deux noyaux dans le Chapitre VII.

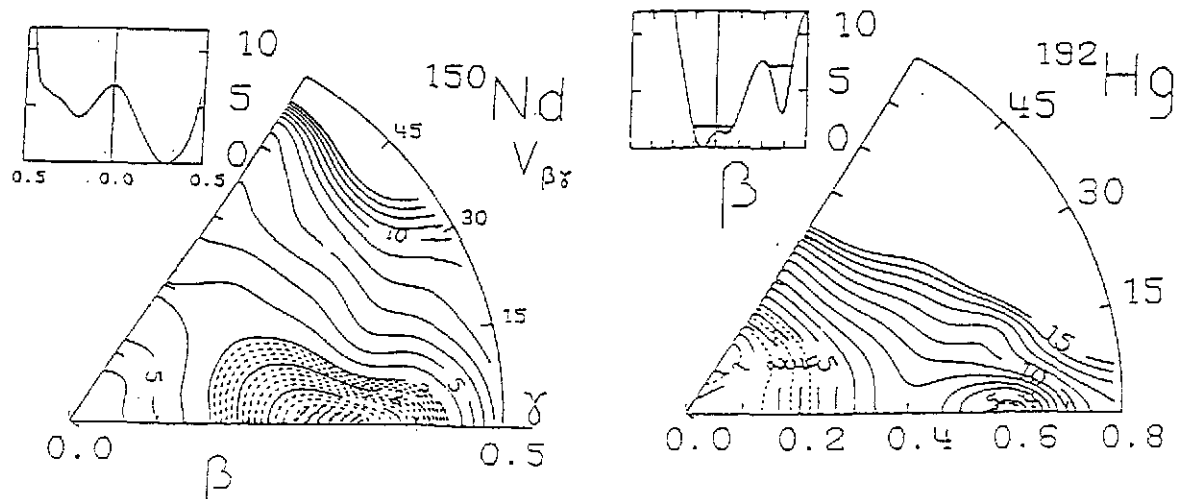


Figure 16: Surfaces d'énergie potentielle triaxiales du  $^{150}\text{Nd}$  et du  $^{192}\text{Hg}$ . Les paramètres  $\beta$  et  $\gamma$  sont définis dans le texte. Les rectangles en haut à gauche de chacune des surfaces d'énergie potentielle donnent la surface d'énergie potentielle monodimensionnelle axiale obtenue en suivant les lignes  $\gamma = 0$  deg et  $\gamma = 60$  deg. Le  $^{150}\text{Nd}$  présente deux minima en symétrie axiale, mais la surface d'énergie potentielle triaxiale montre qu'il n'existe en fait qu'un seul puits. En revanche, la surface d'énergie potentielle du  $^{192}\text{Hg}$  contient deux minima véritables. Celui situé au voisinage de  $\beta = .6$  correspond à un isomère de forme du noyau.

Les Figures 17 et 18 représentent des surfaces d'énergie potentielle bidimensionnelles gouvernant la fission du  $^{232}\text{Th}$  et du  $^{240}\text{Pu}$ . La première, tracée en fonction de l'élongation  $q_{20}$  et de l'asymétrie droite-gauche  $q_{30}$ , est une amplification de la surface d'énergie potentielle de la Figure 15. Cette dernière est en fait obtenue en suivant le chemin monodimensionnel d'énergie potentielle minimum sur la surface de la Figure 17. La Figure 18 est la surface d'énergie potentielle qui gouverne la scission du noyau  $^{240}\text{Pu}$ . Elle représente l'énergie du noyau dans la région des grands allongements ( $200 < q_{20} < 400$  barns). Le paramètre  $q_{40}$  mesure le degré de striction du noyau. Les deux vallées qui apparaissent correspondent respectivement au noyau de  $^{240}\text{Pu}$  avant ("vallée de fission") et après ("vallée de fusion") scission. La scission peut s'effectuer soit à déformation relativement faible en franchissant la barrière qui sépare les deux vallées, soit au voisinage de  $q_{20} = 370$  barns, zone où cette barrière a disparu. Le premier type de scission a pu être interprété comme donnant naissance aux événements de "fission froide" observés expérimentalement <sup>33,34</sup>, où les fragments sont formés avec une énergie d'excitation très petite (moins de quelques MeV) et une grande énergie cinétique. Le second type de scission correspond à la fission "normale", fournissant des fragments de fission ayant une énergie d'excitation combinée de l'ordre de 20 MeV et une énergie cinétique plus faible que dans le premier cas.

Terminons ce paragraphe par quelques remarques. Tout d'abord il convient de préciser que la méthode de contrainte par champs extérieurs ne définit jamais complètement la forme

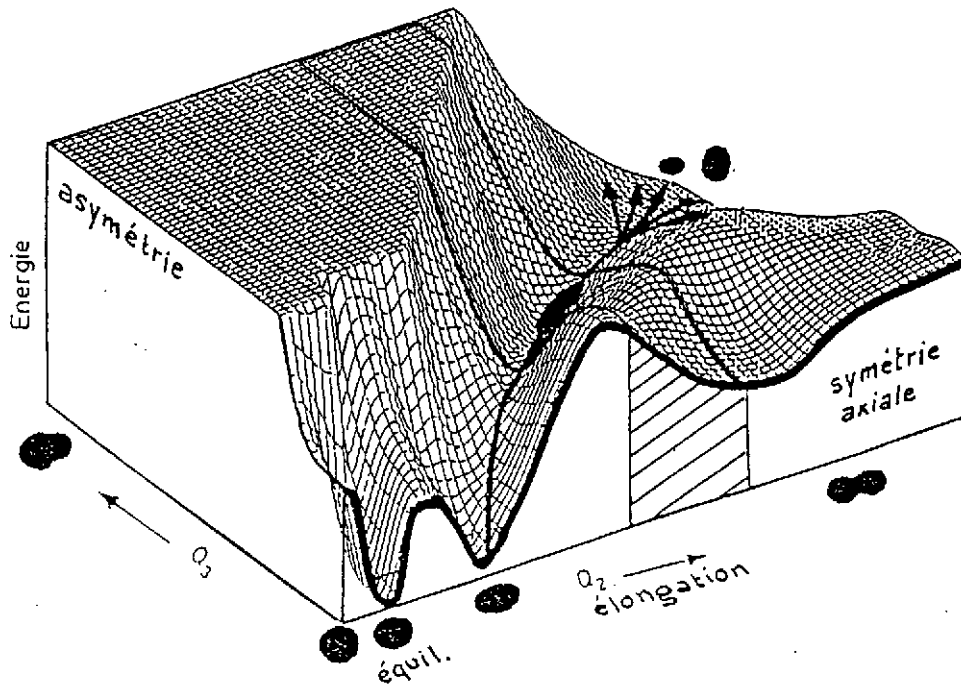
$^{232}\text{Th}$ 

Figure 17: Surface d'énergie potentielle du  $^{232}\text{Th}$  en fonction de  $q_{20}$  et de  $q_{30}$ . La ligne en trait gras à  $q_{30} = 0$  est le chemin de fission symétrique du noyau. L'autre ligne en trait gras correspond au chemin de fission asymétrique énergétiquement le plus favorable. Les variations de l'énergie potentielle le long de ce dernier chemin sont celles représentées sur la Figure 15.

du noyau. Seuls les quelques moments multipolaires soumis aux contraintes ont des valeurs imposées. Tous les autres (une infinité !) sont libres de prendre n'importe quelle valeur. Ils adoptent en fait les valeurs qui minimisent l'énergie totale du noyau compte tenu des contraintes et des symétries imposées. Ceci constitue le grand avantage d'une approche microscopique auto-consistante, fondée sur un principe variationnel (cf. à ce propos les Figures 1, 2 et 3 et leur présentation dans le Chapitre II).

Une seconde remarque concerne le choix du nombre et du type des champs extérieurs que l'on doit employer, en particulier lorsqu'on étudie des situations nucléaires exotiques. En principe, il est nécessaire d'explorer systématiquement les différents modes de déformation afin de voir quels sont ceux qui doivent être introduits explicitement. En fait, il arrive que le calcul auto-consistant donne lui-même des indications sur les modes collectifs qu'il convient d'introduire. Un exemple est donné sur la Figure 19. Deux surfaces d'énergie potentielle distinctes apparaissent dans la région des grands allongements ( $13 < d < 18 \text{ fm}$ ). La première ( $V_1$ ) est obtenue en augmentant continûment l'allongement du noyau en partant des faibles déformations. Elle correspond à un noyau unique. La seconde ( $V_2$ ) est celle qui apparaît lorsqu'on part de deux fragments distincts du  $^{240}\text{Pu}$  et que l'on diminue continûment la distance entre leurs centres de masse. Entre  $d = 13 \text{ fm}$  et  $d = 18 \text{ fm}$ , il existe donc deux solutions distinctes des équations de Hartree-Fock-

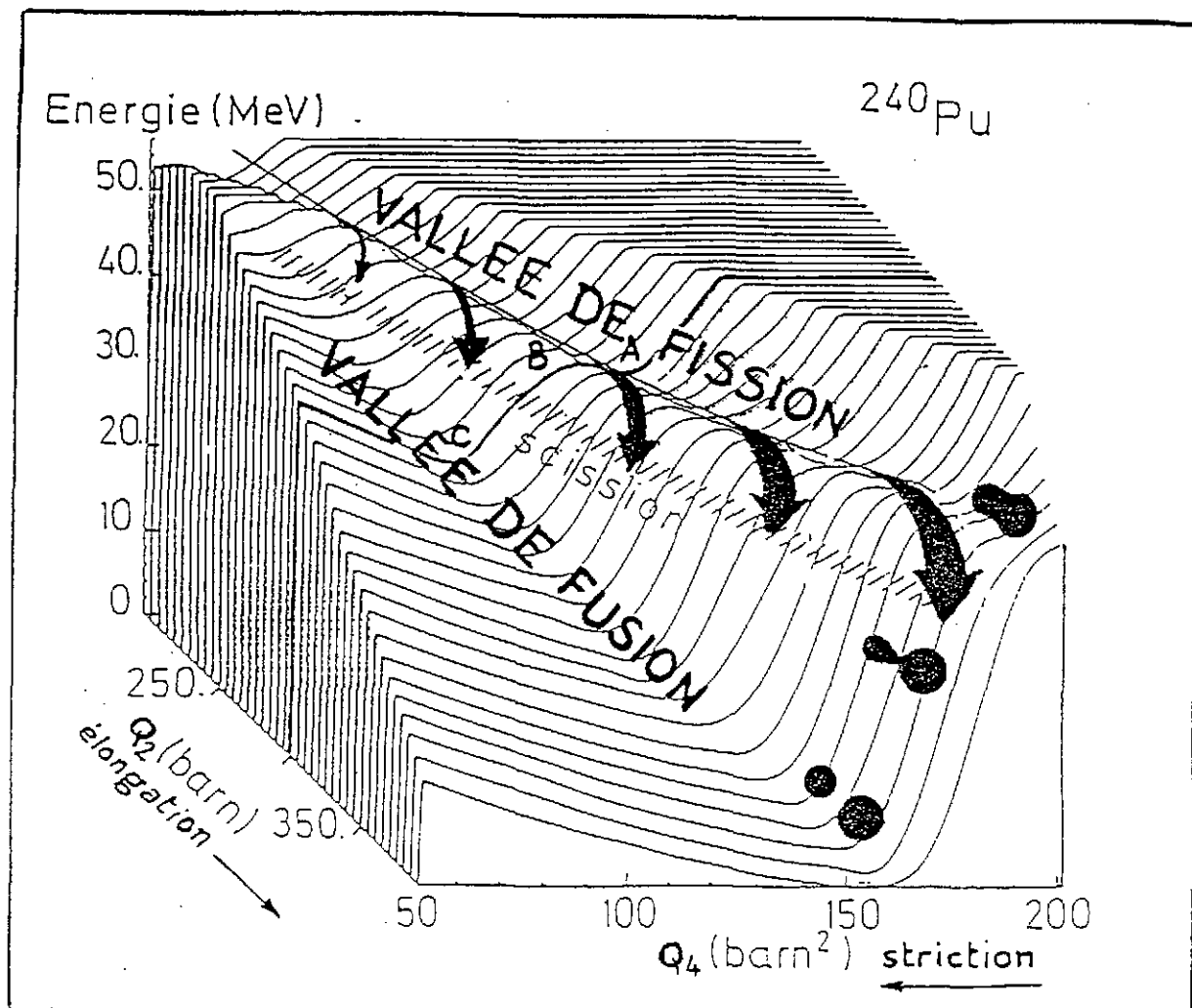


Figure 18: Surface d'énergie potentielle du  $^{240}\text{Pu}$  en fonction de  $q_{20}$  et de  $q_{40}$ . L'analyse de la dynamique du noyau sur cette surface présentant deux vallées séparées par une barrière a permis de donner une interprétation nouvelle de la scission (voir le texte et la Réf <sup>35</sup>). Les distributions spatiales de nucléons obtenues aux trois points A, B et C sont celles représentées sur la Figure 2.

Bogolyubov avec contraintes. Ceci est précisément une indication qu'une variable collective manque dans la description des formes du noyaux dans cette région de déformation. Dans le cas présent, on peut montrer que la variable hexadécapolaire  $q_{40}$  permet de distinguer entre les deux types de configurations nucléaires. En introduisant cette variable à l'aide d'une contrainte additionnelle sur  $\hat{Q}_{40}$ , on obtient effectivement une surface d'énergie potentielle continue unique. Il s'agit de celle représentée sur la Figure 18.

Mentionnons enfin que des méthodes sont explorées visant à déterminer d'une façon systématique le nombre et la nature des modes collectifs qui interviennent dans un système nucléaire donné. Citons notamment les travaux fondés sur la méthode ATDHF (Adiabatic Time-Dependent Hartree-Fock) <sup>36</sup>, ceux partant de l'intégrale fonctionnelle <sup>14</sup>) et les techniques développées par G.Do Dang et A.Klein <sup>37</sup>). L'extension de ces méthodes aux approches auto-consistantes du

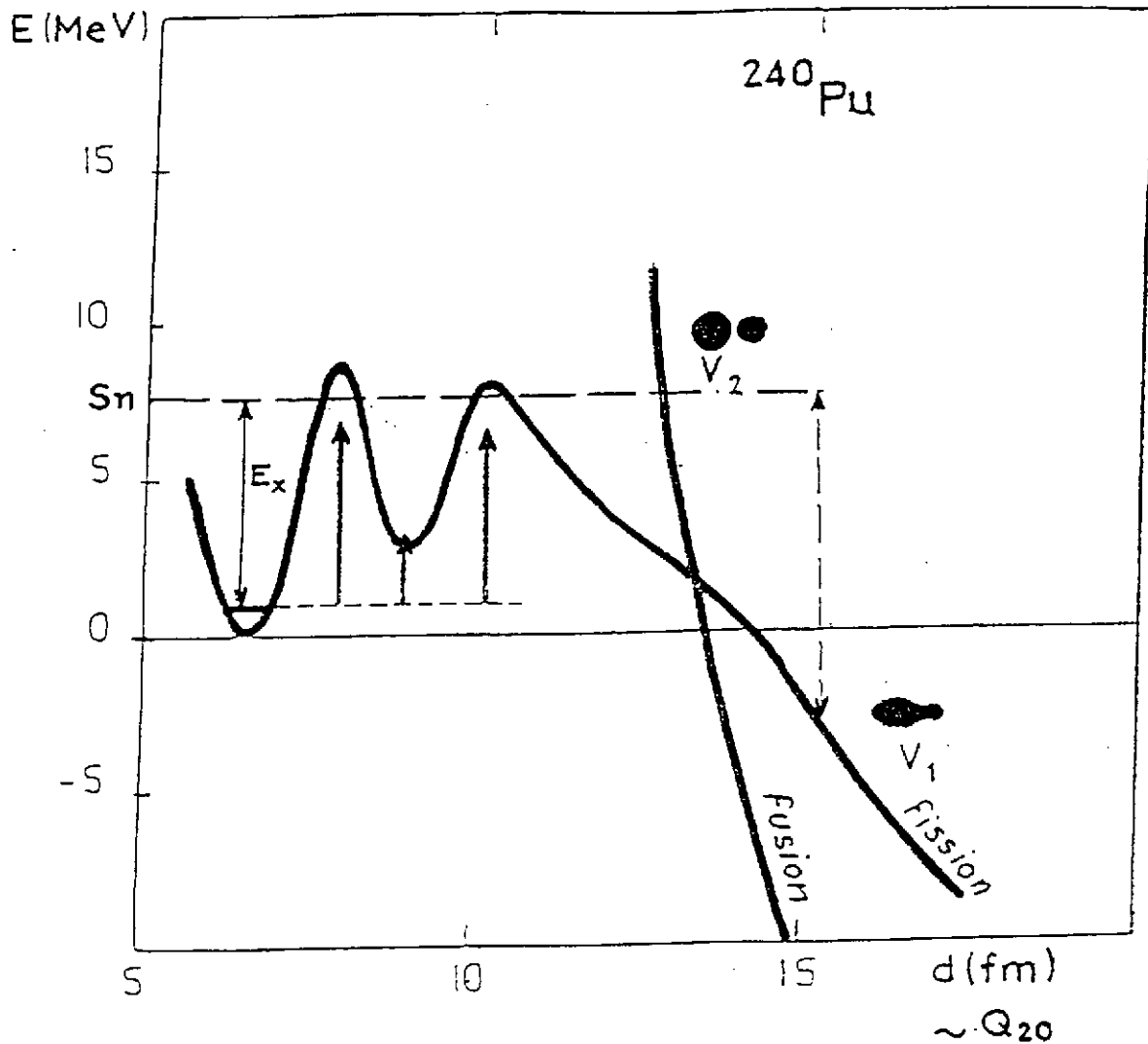


Figure 19: Surface d'énergie potentielle du  $^{240}\text{Pu}$  en fonction de  $q_{20}$ . Cette surface d'énergie potentielle est en fait constituée de deux courbes distinctes. La première ( $V_1$ ) décrit le noyau avant sa cassure en deux fragments. La seconde ( $V_2$ ) correspond à l'énergie potentielle du noyau après sa scission en deux noyaux inégaux. C'est cette structure particulière qui a conduit à introduire une contrainte sur le moment hexadécapolaire dans la région de déformation où les deux courbes coexistent. La surface d'énergie potentielle obtenue avec cette nouvelle contrainte est celle de la Figure 18.

type Hartree-Fock-Bogolyubov avec contraintes reste à réaliser. Il est certain qu'il s'agit d'une voie intéressante qu'il conviendra d'explorer dans le futur.

### 6. Résumé

La Figure 20 résume sous forme de tableau l'ensemble des étapes de la hiérarchie d'approximations permettant de réaliser une approche complètement microscopique de la structure nucléaire fondée sur la théorie du champ moyen. La partie droite de la Figure donne de haut en bas les quantités essentielles obtenues à chaque étape. Les rectangles de gauche représentent les méthodes théoriques et les techniques employées pour les dériver. Ce tableau n'est pas

exhaustif: par exemple, la méthode de la RPA, évoquée à propos des Figure 7 et 8, n'est pas mentionnée. Sa place se situerai après les procédures Hartree-Fock et Hartree-Fock-Bogolyubov, au même niveau que la méthode de la Coordonnée Génératrice. De même, la généralisation de cette dernière incluant le couplage particule-vibration pourrait être ajoutée au bas de la Figure.

Les quantités mentionnées dans les rectangles de droite sont essentiellement de nature théoriques. Pour être complet, il faudrait y joindre les grandeurs comparables à l'expérience que l'on peut en déduire et qui peuvent éventuellement donner lieu à des prédictions. Ce sont essentiellement, les propriétés de l'état fondamental (énergie de liaison, rayons de masse et de charge, déformations, distributions de densité) et les caractéristiques des états excités (énergie, spin, parité, probabilités de transition vers l'état fondamental, temps de vie des états isomériques). Ainsi que le suggèrent les lignes pointillées du tableau, il est bien clair que c'est la confrontation avec l'expérience des résultats de la théorie qui détermine en dernier ressort la validité de l'ensemble de cette construction ...

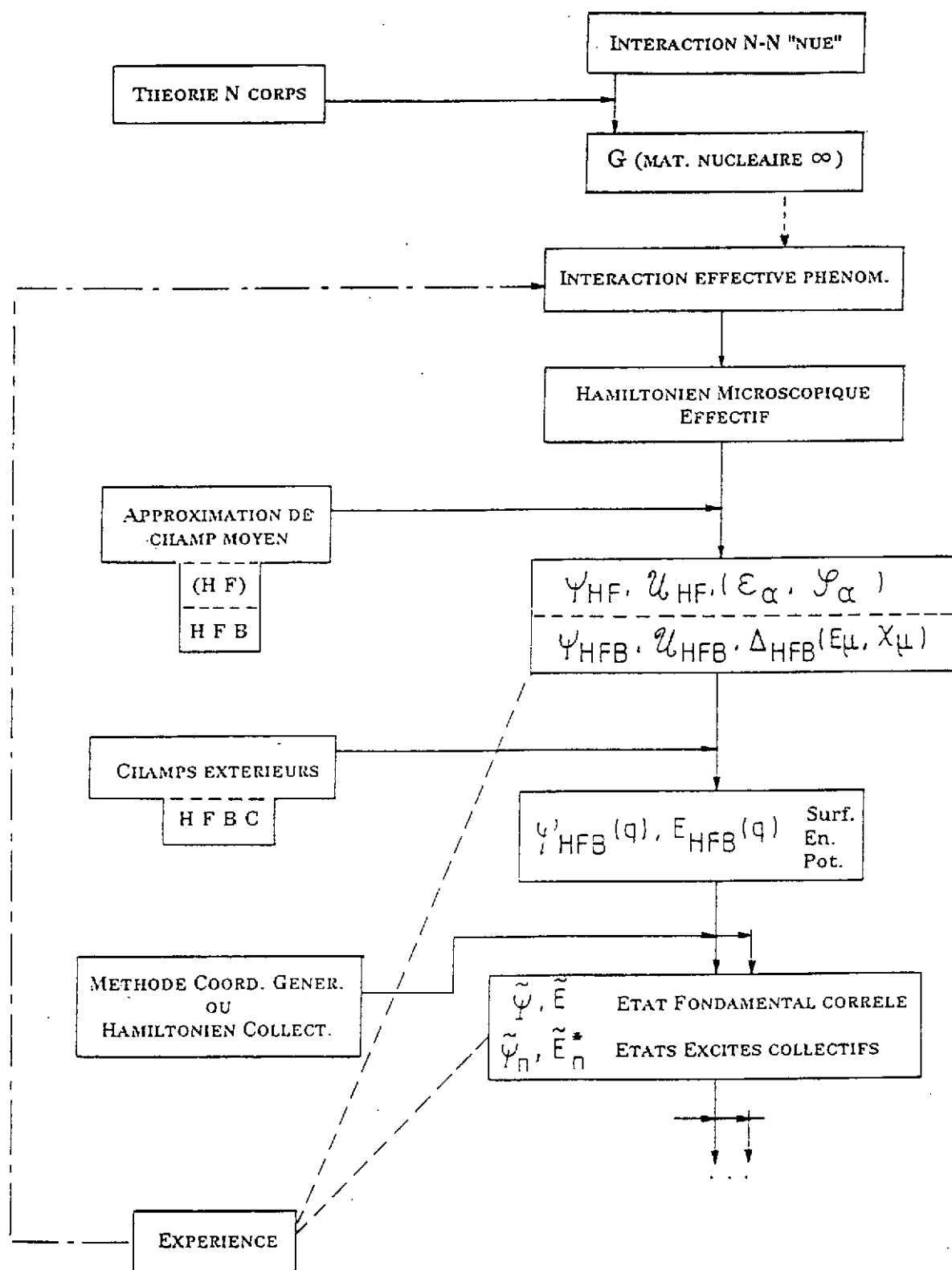


Figure 20: Tableau (non exhaustif) des étapes successives d'une approche microscopique de la structure nucléaire fondée sur la théorie du champ moyen.

## VI. LA METHODE DE HARTREE-FOCK-BOGOLYUBOV

La méthode de Hartree-Fock-Bogolyubov est la technique de base de toute approche microscopique du noyau fondée sur la théorie du champ moyen. En effet, comme on l'a vu dans la Section précédente, la hiérarchie d'approximations successives permettant d'inclure les différentes composantes de l'interaction résiduelle est fondée sur des fonctions d'onde d'essai qui sont toujours des combinaisons linéaires d'états de Hartree-Fock-Bogolyubov. Le but de la méthode est de déterminer, à partir des interactions élémentaires entre les nucléons, la structure interne du noyau, c'est-à-dire, d'une part le champ moyen qu'ils voient, d'autre part le champ d'appariement auquel ils sont soumis. On en déduit ensuite la nature des états individuels ainsi que les autres propriétés du noyau.

L'incorporation des corrélations d'appariement est essentielle si l'on veut obtenir, à l'approximation du champ moyen, un état du noyau défini de façon unique. Dans la méthode de Hartree-Fock simple, par exemple, il arrive souvent que le dernier niveau occupé par les nucléons ne soit pas complètement rempli, et plusieurs états de particules indépendantes sont solutions avec la même énergie totale. Ce sont précisément les corrélations d'appariement qui permettent de lever la dégénérescence entre ces différents états.

Le point de départ de la théorie de Hartree-Fock-Bogolyubov est le hamiltonien non relativiste qui décrit le système des  $A$  nucléons en interaction et que nous rappelons ici:

$$H = \sum_{i=1}^A \frac{\vec{p}_i^2}{2M} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^A v_{ij}^{eff} \quad (15)$$

Nous supposons que le terme d'interaction a été construit avec une interaction effective qui permet de décrire les corrélations d'appariement. Il doit donc s'agir d'une interaction de portée non nulle, comme, par exemple, la force de Gogny.

En principe, la théorie de Hartree-Fock-Bogolyubov est conçue pour décrire l'état fondamental des noyaux pair-pairs. En effet, elle consiste à chercher un état d'énergie minimum du noyau. D'autre part, l'état de Hartree-Fock-Bogolyubov cherché est supposé invariant par renversement du temps, ce qui ne peut arriver dans un système comprenant un nombre impair de fermions.

En fait, la méthode s'étend immédiatement à la description d'un ensemble d'états déformés. Il suffit pour cela d'ajouter au hamiltonien des champs auxiliaires extérieurs:

$$H \longrightarrow H - \lambda_1 \cdot Q_1 - \lambda_2 \cdot Q_2 - \dots$$

comme il a été dit au paragraphe 3. de la Section précédente. Cette procédure constitue la méthode de Hartree-Fock-Bogolyubov avec contraintes. En ce qui concerne les noyaux impairs ou impair-impairs, il est possible de les décrire avec la méthode de Hartree-Fock-Bogolyubov en employant la technique du "blocking". Celle-ci revient à assigner au nucléon célibataire (proton et/ou neutron) l'état individuel (état de quasi-particule) qui minimise l'énergie totale du noyau, et à lui interdire de s'apparier avec un autre nucléon. En principe, il faut plusieurs essais pour



déterminer l'état de quasi-particule que doit occuper le nucléon célibataire. Ces généralisations n'étant pas fondamentales pour l'exposé de la méthode, les expressions développées dans la suite s'appliqueront au cas de la recherche de l'état fondamental des noyaux pair-pairs.

Avant d'aborder la méthode de Hartree-Fock-Bogolyubov, nous décrirons brièvement la méthode de Hartree-Fock. En effet, les deux méthodes ont une structure de base similaire. Par ailleurs, le formalisme de la méthode de Hartree-Fock étant nettement plus simple, un certain nombre de caractéristiques communes aux deux théories apparaissent plus clairement à l'approximation Hartree-Fock.

### 1. La méthode de Hartree-Fock

Les fondements de cette méthode ont déjà été donnés au début de le Chapitre V. L'état fondamental du noyau est approché par un déterminant de Slater  $\Psi_{HF}$ , c'est-à-dire un produit antisymétrisé de  $A$  états à un nucléon  $\phi_\alpha$ :

$$\Psi_{HF}(x_1, x_2, \dots, x_A) = \det [\phi_{\alpha_1}(x_1) \cdot \phi_{\alpha_2}(x_2) \cdot \dots \cdot \phi_{\alpha_A}(x_A)] \quad (16)$$

où  $x_i = (\vec{r}_i, \sigma_i, \tau_i)$  représente l'ensemble des variables d'espace, de spin et d'isospin du nucléon numéro  $i$ . Les  $A$  fonctions d'onde à un nucléon  $\phi_{\alpha_i}$  sont supposées orthonormales:

$$\langle \phi_{\alpha_i} | \phi_{\alpha_j} \rangle = \delta_{ij} \quad i, j = 1, \dots, A \quad (17)$$

Les  $\alpha_i$  représentent l'ensemble des nombres quantiques repérant les orbitales occupées par les nucléons. Ce sont par exemple:

- $\alpha = (n, l, j, m)$  en symétrie sphérique.
- $\alpha = (n, \pi, m)$  en symétrie axiale avec symétrie droite-gauche.
- $\alpha = (n, m)$  en symétrie axiale avec asymétrie droite-gauche.
- $\alpha = (n, r)$  en symétrie triaxiale.

Dans ces expressions,  $n$  est un nombre quantique radial,  $l(l+1)$ ,  $j(j+1)$  et  $m$  sont respectivement les valeurs propres de  $\hat{l}^2$ ,  $\hat{j}^2$  et  $\hat{j}_z$ ,  $\pi$  est la parité et  $r$  la signature. Cette dernière est la phase de l'état  $\phi_\alpha$  dans une rotation de  $\pi$  autour de l'axe Oz. Le moment angulaire individuel est  $\vec{j} = \vec{l} + \vec{s}$ , où  $\vec{s}$  est un spin 1/2. La symétrie axiale est supposée autour de Oz. La symétrie droite-gauche est la symétrie par rapport au plan  $z = 0$ .

L'état  $\Psi_{HF}$  est supposé invariant par renversement du temps, ce qui n'est possible que dans les noyaux pair-pairs. La conséquence est que les orbites à une particule ont une dégénérescence d'ordre deux au moins: les états de nombres quantiques  $m$  et  $-m$  ou  $r$  et  $-r$  ont la même énergie. C'est la dégénérescence de Kramers<sup>38)</sup>.

Les orbitales  $\phi_\alpha$  sont déterminées en minimisant l'énergie totale du noyau

$$E = \frac{\langle \Psi_{HF} | H | \Psi_{HF} \rangle}{\langle \Psi_{HF} | \Psi_{HF} \rangle} \quad (18)$$

calculée avec le hamiltonien effectif (15). En utilisant (15) et (16) on obtient:

$$E = \sum_{i=1}^A \int \phi_{\alpha_i}^*(\vec{r}) \frac{-\hbar^2}{2M} \Delta \phi_{\alpha_i}(\vec{r}) d^3r + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^A \int d^3r \int d^3r' \phi_{\alpha_i}^*(\vec{r}) \phi_{\alpha_j}^*(\vec{r}') v^{eff}(\vec{r} - \vec{r}', \rho) [\phi_{\alpha_i}(\vec{r}) \phi_{\alpha_j}(\vec{r}') - \phi_{\alpha_i}(\vec{r}') \phi_{\alpha_j}(\vec{r})] \quad (19)$$

Les variables de spin et d'isospin ont été omises afin de simplifier l'expression. Il est immédiat de les réintroduire: il suffit de remplacer  $\vec{r}$  par  $x = (\vec{r}, \sigma, \tau)$  dans l'énergie cinétique,  $v^{eff}$  par  $\langle \sigma_1 \tau_1, \sigma_2 \tau_2 | v^{eff} | \sigma'_1 \tau'_1, \sigma'_2 \tau'_2 \rangle$  dans le terme d'interaction, de réintroduire les quatre couples de variables de spin-isospin dans les fonctions d'onde  $\phi_\alpha$  de la seconde ligne, et de sommer sur toutes les variables de spin et d'isospin.

La minimisation de l'énergie consiste à écrire que (19) est stationnaire vis-à-vis des variations des  $A$  fonctions d'onde  $\phi_{\alpha_i}$ , qui conservent les conditions d'orthonormalité (17). Celles-ci s'écrivent aussi:

$$\int \phi_{\alpha_i}^*(\vec{r}) \phi_{\alpha_j}(\vec{r}) d^3r = \delta_{ij} \quad (20)$$

Afin d'en tenir compte, on utilise la méthode de Lagrange: minimiser (19) avec les conditions (20) est équivalent à minimiser:

$$F(\phi_\alpha) = E - \sum_{i,j} \Lambda_{ij} \left( \int \phi_{\alpha_i}^*(\vec{r}) \phi_{\alpha_j}(\vec{r}) d^3r - \delta_{ij} \right), \quad (21)$$

sans restriction sur les  $\phi_{\alpha_i}$ . La matrice  $A \times A$  de paramètres de Lagrange  $\Lambda_{ij}$  doit être hermitienne. Elle est déterminée de façon que les  $A(A+1)/2$  conditions (20) soit vérifiées. On montre qu'il est en fait possible de remplacer  $\Lambda$  par la matrice diagonale de ses valeurs propres et qu'il suffit d'imposer aux états  $\phi_{\alpha_i}$  d'être normalisés. La fonction  $F$  à minimiser s'écrit alors:

$$F(\phi_\alpha) = E - \sum_i \epsilon_i \left( \int \phi_{\alpha_i}^*(\vec{r}) \phi_{\alpha_i}(\vec{r}) d^3r - 1 \right), \quad (22)$$

où les  $\epsilon_i$  sont les valeurs propres (réelles) de la matrice  $\Lambda$ . La condition de minimum de  $F$  s'exprime sous la forme des  $A$  équations:

$$\frac{\partial F}{\partial \phi_{\alpha_i}^*(\vec{r})} = 0 \quad i = 1, \dots, A \quad (23)$$

et des équations obtenues en remplaçant  $\phi_{\alpha_i}^*$  par  $\phi_{\alpha_i}$ . Comme  $F$  est réel, ces dernières sont les complexes conjuguées de (23). La dérivée de  $F$  se calcule très facilement. Il faut simplement prendre garde de ne pas oublier que l'interaction effective apparaissant dans (19) dépend de la densité

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{i=1}^A |\phi_{\alpha_i}(\vec{r})|^2 \quad (24)$$

et donc des  $\phi_{\alpha_i}$ . On obtient ainsi  $A$  équations:

$$\begin{aligned} \frac{-\hbar^2}{2M} \Delta \phi_{\alpha_i}(\vec{r}) + U_{HF}^{DIR}(\vec{r}) \phi_{\alpha_i}(\vec{r}) \\ + \int U_{HF}^{ECH}(\vec{r}, \vec{r}') \phi_{\alpha_i}(\vec{r}') d^3r' \\ + U_{HF}^{REA}(\vec{r}) \phi_{\alpha_i}(\vec{r}) = \epsilon_{\alpha_i} \phi_{\alpha_i}(\vec{r}) \end{aligned} \quad (25)$$

qui sont les equations de Hartree-Fock. Les  $\mathcal{U}$  sont les différentes composantes du champ moyen définies par:

$$\mathcal{U}_{HF}^{DIR}(\vec{r}) = \int v^{eff}(\vec{r} - \vec{r}', \rho) \rho(\vec{r}') d^3 r' \quad (26)$$

$$\mathcal{U}_{HF}^{ECH}(\vec{r}, \vec{r}') = - v^{eff}(\vec{r} - \vec{r}', \rho) \rho(\vec{r}, \vec{r}') \quad (27)$$

$$\mathcal{U}_{HF}^{REA}(\vec{r}) = \frac{1}{2} \int \int \frac{\partial v^{eff}(\vec{r} - \vec{r}'', \rho)}{\partial \rho(\vec{r})} (\rho(\vec{r}') \rho(\vec{r}'') - \rho(\vec{r}', \vec{r}'') \rho(\vec{r}'', \vec{r}')) d^3 r' d^3 r'' \quad (28)$$

$$(29)$$

où

$$\rho(\vec{r}, \vec{r}') = \sum_{i=1}^A \phi_{\alpha_i}(\vec{r}) \phi_{\alpha_i}^*(\vec{r}') \quad (30)$$

est la densité non locale des nucléons. Le champ moyen comporte trois composantes qui sont le champ moyen direct (26), le champ moyen d'échange (27) et le champ moyen de réarrangement (28).

Des trois termes du champ, le premier est celui dont l'interprétation est la plus intuitive: c'est le potentiel créé au point  $\vec{r}$  par les nucléons situés en tous les points  $\vec{r}'$  du noyau. Le champ d'échange est au contraire d'origine spécifiquement quantique. Il provient de l'indiscernabilité des nucléons dont la conséquence est l'antisymétrisation de la fonction d'onde du noyau et l'apparition du second terme du crochet dans l'expression (19) de l'énergie. Le troisième terme du champ traduit la modification de l'interaction effective selon le nombre de nucléons au point  $\vec{r}$ . Notons qu'il comprend lui-même un "terme direct" (fonction des densités locales) et un "terme d'échange" (fonction des densités non locales).

Les equations de Hartree-Fock se présentent comme un système de  $A$  equations de Shrödinger couplées pour les  $A$  états à une particule  $\phi_{\alpha_i}$ . Notons que les paramètres de Lagrange  $\epsilon_{\alpha_i}$  s'interprètent *a posteriori* comme étant les énergies des niveaux à une particule. Ce système d'equations n'est pas réellement un système d'equations aux valeurs propres car le champ moyen dépend lui-même des  $\phi_{\alpha}$  par l'intermédiaire des densités locales et non locales. Ces equations constituent donc en fait un système non linéaire. En général on le résout par itérations: on choisit un jeu de  $\phi_{\alpha}$  initiaux (par exemple des fonctions d'onde de l'oscillateur harmonique ou des fonctions d'onde de Nilsson) qui servent à calculer une première approximation des densités  $\rho$  et des différents termes du champ moyen. La résolution de (25) fournit de nouveaux  $\phi_{\alpha}$  avec lesquelles on calcule une seconde approximation des densités et du champ moyen. On répète cette séquence d'opérations jusqu'à convergence, c'est-à-dire jusqu'à ce que deux itérations successives fournissent des fonctions d'onde individuelles identiques. Cette façon de résoudre les equations de Hartree-Fock est illustrée sur la Figure 21. Il est important de souligner que, grâce à la non linéarité des equations, le champ moyen et les états individuels sont parfaitement cohérents entre eux: le champ moyen est construit avec les  $\phi_{\alpha}$  et ceux-ci sont les états propres de ce champ moyen. Pour cette raison, on donne le nom de méthodes "auto-consistantes" (traduction pas très heureuse du terme anglais "self-consistent") aux approches

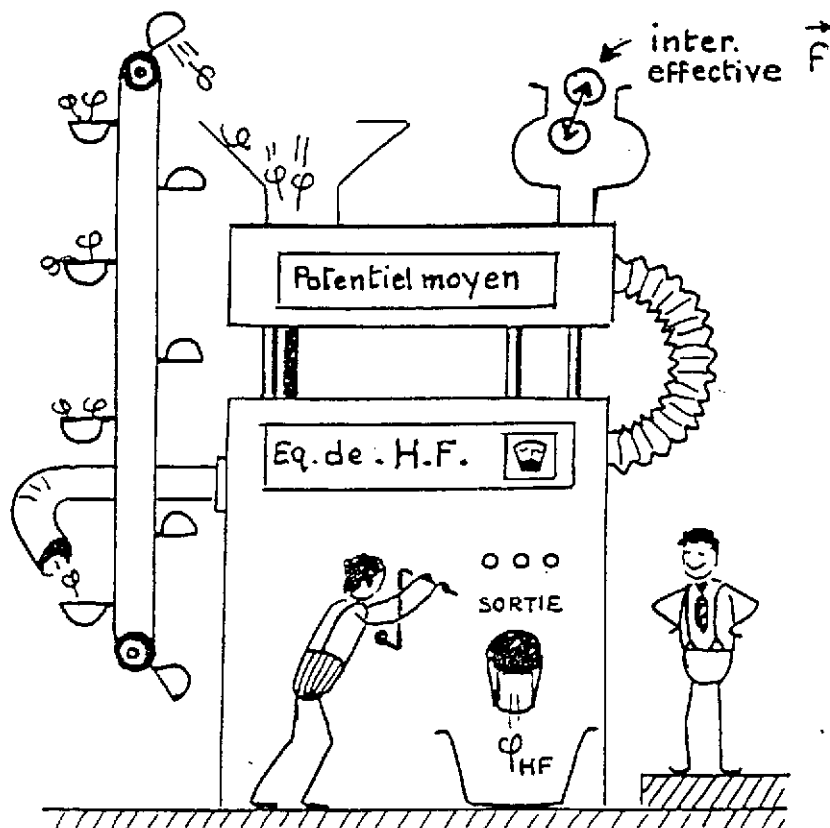


Figure 21: La résolution des équations de Hartree-Fock (J.Dechargé).

de champ moyen non linéaires du type Hartree-Fock. Notons qu'une telle "auto-consistance" a pour conséquence que les états à une particule, de même que les énergies à une particule changent de noyau en noyau. Dans ce type de description, il n'existe donc pas un schéma de niveaux unique pour tous les noyaux, mais un schéma de niveaux à une particule par noyau.

Une fois la convergence atteinte, la méthode de Hartree-Fock fournit les orbitales des nucléons  $\phi_{\alpha_i}$ , les énergies à une particule correspondantes  $\epsilon_{\alpha_i}$ , ainsi que le champ moyen  $U_{HF}$ , somme des trois contributions définies plus haut. On peut également calculer l'énergie totale du système à l'aide de (19), ce qui fournit l'énergie  $E_{HF}$  de l'état fondamental du noyau à l'approximation Hartree-Fock. En reprenant l'expression (19), on a:

$$E_{HF} = \sum_{i=1}^A T_{\alpha_i \alpha_i} + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^A \left( (U_{HF}^{DIR})_{\alpha_i \alpha_i} + (U_{HF}^{ECH})_{\alpha_i \alpha_i} \right) \quad (31)$$

où  $T_{\alpha_i \alpha_i}$  et les  $(U_{HF})_{\alpha_i \alpha_i}$  sont les éléments de matrice de l'énergie cinétique et des champs direct et échange dans les états individuels  $\phi_{\alpha_i}$ . En multipliant les équations de Hartree-Fock (25) par  $\phi_{\alpha_i}^*(\vec{r})$  et en intégrant sur  $\vec{r}$ , on obtient:

$$\epsilon_{\alpha_i} = T_{\alpha_i \alpha_i} + (U_{HF}^{DIR})_{\alpha_i \alpha_i} + (U_{HF}^{ECH})_{\alpha_i \alpha_i} + (U_{HF}^{REA})_{\alpha_i \alpha_i} \quad (32)$$

En éliminant l'énergie cinétique entre les expressions (31) et (32), on arrive à

$$E_{HF} = \sum_{i=1}^A \left[ \epsilon_{\alpha_i} - \frac{1}{2} \left( (U_{HF}^{DIR})_{\alpha_i \alpha_i} + (U_{HF}^{ECH})_{\alpha_i \alpha_i} \right) - (U_{HF}^{REA})_{\alpha_i \alpha_i} \right] \quad (33)$$

Cette relation montre que l'énergie du noyaux n'est pas la somme des énergies à une particule. Bien que la forme adoptée pour l'état fondamental du noyau soit celle d'un état de particules indépendantes, la méthode de Hartree-Fock ne constitue donc pas un modèle de particules indépendantes (il s'en faut en fait de beaucoup, comme le montre les chiffres donnés plus loin). En fait, (33) s'interprète plus facilement si on examine ce qui se passe lorsqu'on retire un nucléon au noyau. En supposant que le nucléon retiré occupait l'orbite  $k$ , et en introduisant l'énergie de liaison  $B_{HF} \equiv -E_{HF}$  du noyau, on peut réécrire (33):

$$B_{HF}(A) = B_{HF}(A-1) - \epsilon_{\alpha_k} + \frac{1}{2} \left( (U_{HF}^{DIR})_{\alpha_k \alpha_k} + (U_{HF}^{ECH})_{\alpha_k \alpha_k} \right) + (U_{HF}^{REA})_{\alpha_k \alpha_k}. \quad (34)$$

$B_{HF}(A-1)$  est la somme (33) changée de signe limitée aux orbitales  $i \neq k$  (ce n'est pas l'énergie de liaison Hartree-Fock du noyau  $A-1$  car les états  $\phi_{\alpha_i}$  avec lesquels cette énergie est calculée sont toujours ceux du noyau  $A$ ). Cette expression montre que la contribution du nucléon  $k$  à  $B_{HF}(A)$  se compose de trois termes:  $-\epsilon_{\alpha_k}$  est l'énergie de liaison de ce nucléon. C'est une quantité positive qui représente aussi son énergie d'ionisation ou de séparation. Le second terme est une contribution négative qui corrige l'énergie potentielle du nucléon  $k$  dans le champ moyen direct et d'échange du noyau. En effet cette énergie potentielle est comptée deux fois dans  $-\epsilon_{\alpha_k}$ . Le troisième terme est la contribution (positive) de ce même nucléon à la partie attractive de l'interaction effective ressentie par les autres nucléons.

	$-\sum_i \epsilon_{\alpha_i}$	$\frac{1}{2} \sum_i (U_{HF}^{DIR})_{\alpha_i \alpha_i}$	$\frac{1}{2} \sum_i (U_{HF}^{ECH})_{\alpha_i \alpha_i}$	$\sum_i (U_{HF}^{REA})_{\alpha_i \alpha_i}$	$B_{HF}$
<i>MeV</i>	3186.9	-991.3	-2557.7	1297.7	935.5
<i>MeV/126</i>	25.3	-7.9	-20.3	10.3	7.4

Tableau II. Contributions à l'énergie de liaison  $B_{HF}$  des différents termes de l'équation (33) pour les neutrons dans le  $^{208}Pb$ . La seconde ligne donne les mêmes chiffres divisés par le nombre de neutrons. La colonne de droite est la somme des quatre précédentes.

Une idée de l'ordre de grandeur de ces différentes contributions est donnée par les chiffres listés dans le Tableau II. Ils concernent les neutrons dans le  $^{208}Pb$ . On constate que le champ d'échange fournit une contribution très importante et que le champ de réarrangement donne en valeur absolue plus d'énergie que le terme direct. Ceci est une indication, d'une part de l'importance des effets quantiques dans la structure du noyau, d'autre part du rôle crucial joué par le terme densité de l'interaction effective. Mentionnons pour compléter ce tableau que l'énergie cinétique totale des neutrons dans le  $^{208}Pb$  est  $2613.5 MeV$ , c'est-à-dire  $20.7 MeV$  en moyenne par neutron.

## 2. Forme de la fonction d'onde de Hartree-Fock-Bogolyubov

Comme on l'a vu au début de le Chapitre V, la méthode de Hartree-Fock est rarement suffisante, et il est nécessaire la plupart du temps de généraliser l'approche de champ moyen qu'elle représente afin d'incorporer les corrélations d'appariement. Pour ce faire, on doit employer une forme plus élaborée qu'un simple déterminant de Slater comme fonction d'onde d'essai pour l'état fondamental. Plus précisément cette forme doit être capable de décrire des paires de nucléons corrélés. Par ailleurs, dans l'esprit de la théorie du champ moyen, cette fonction d'onde plus générale doit correspondre à un état de paires indépendantes. Nous nous proposons dans ce qui suit de montrer comment ces critères d'une part, d'autre part la nécessité d'aboutir à la théorie la plus simple possible, conduisent naturellement au type de fonction d'onde de paires indépendantes qui est employé dans la théorie de Hartree-Fock-Bogolyubov.

Supposons pour commencer un noyau avec un seul type de particules, des neutrons par exemple au nombre de  $N = 2n$ , décrit à l'approximation de Hartree-Fock. La fonction d'onde de Hartree-Fock (16) peut s'écrire en seconde quantification:

$$|\Psi_{HF}\rangle = a_{\alpha_1}^+ a_{\bar{\alpha}_1}^+ a_{\alpha_2}^+ a_{\bar{\alpha}_2}^+ \dots a_{\alpha_n}^+ a_{\bar{\alpha}_n}^+ |0\rangle \quad (35)$$

Dans ce formalisme,  $|0\rangle$  est le vide, c'est-à-dire l'état à zéro nucléons. Les  $a_{\alpha_i}^+$  sont les opérateurs qui créent un nucléon dans l'état  $\phi_{\alpha_i}$ . Les  $a_{\bar{\alpha}_i}^+$  créent un nucléon dans l'état  $\phi_{\bar{\alpha}_i}$ , renversé du temps de  $\phi_{\alpha_i}$ . Les états  $\alpha$  et  $\bar{\alpha}$  ont donc des spins opposés (ce sont des candidats à l'appariement). (35) est donc l'état où, à partir du vide, ont été créés  $2n$  nucléons ayant les nombres quantiques  $\alpha_i$  et  $\bar{\alpha}_i$ . D'où son équivalence avec (16). De plus, (35) est bien un état complètement antisymétrisé car les opérateurs de création de nucléons sont tenus d'anticommuter:

$$a_{\alpha}^+ a_{\alpha'}^+ = -a_{\alpha'}^+ a_{\alpha}^+ \quad (36)$$

Rappelons à ce propos les autres relations fondamentales qui interviennent dans le formalisme de la seconde quantification. A côté des opérateurs de création  $a_{\alpha}^+$ , on définit des opérateurs d'annihilation  $a_{\alpha}$  qui détruisent un nucléon dans l'état  $\phi_{\alpha}$ . Ils anticommulent également:

$$a_{\alpha} a_{\alpha'} = -a_{\alpha'} a_{\alpha} \quad (37)$$

et donnent zéro lorsqu'ils agissent sur le vide:

$$a_{\alpha} |0\rangle = 0 \quad (38)$$

Les relations d'anticommuation entre les opérateurs de création et d'annihilation sont les suivantes:

$$a_{\alpha} a_{\alpha'}^+ = -a_{\alpha'}^+ a_{\alpha} + \delta_{\alpha\alpha'} \quad (39)$$

Ces relations fondamentales permettent de calculer toutes les valeurs moyennes des opérateurs usuels, puisque ces derniers s'expriment comme des combinaisons linéaires de produits de  $a_{\alpha}^+$  et de  $a_{\alpha}$  (voir par exemple Villars <sup>III</sup>).

La forme (35) d'un état de particules indépendantes suggère qu'un état de paires indépendantes doit s'écrire:

$$|\tilde{\Psi}_N\rangle = P_1^+ P_2^+ \dots P_n^+ |0\rangle \quad (40)$$

où les  $P_i^+$  sont des opérateurs de création d'une paire de nucléons. Evidemment, si l'on veut que les nucléons de ces paires soient corrélés, les  $P^+$  ne doivent pas être le simple produit de deux opérateurs de création de nucléons. En effet  $a_\alpha^+ a_\alpha^+$  est bien une paire de nucléons, mais les deux nucléons sont indépendants.

Une forme d'opérateur de paires de nucléons corrélés est la suivante:

$$P^+ = \sum_{\alpha>0} p_\alpha a_\alpha^+ a_\alpha^+$$

où les  $\alpha > 0$  sont les états ayant une projection du spin positive, et les  $p_\alpha$  sont des probabilités d'occupation de niveaux normalisées à 1:

$$\sum_{\alpha>0} |p_\alpha|^2 = 1$$

Avec ces paires, il est possible de construire l'état

$$\begin{aligned} |\tilde{\Psi}_N^{(1)}\rangle &= (P^+)^n |0\rangle \\ &= \left( \sum_{\alpha>0} p_\alpha a_\alpha^+ a_\alpha^+ \right)^{N/2} |0\rangle \end{aligned} \quad (41)$$

qui est bien un état de paires corrélées indépendantes. Cet état contient  $N = 2n$  nucléons.

Cet forme de fonction d'onde est bien connue en théorie des liquides <sup>39)</sup>, et aussi en physique nucléaire où elle a été employée dans la matière nucléaire infinie <sup>40)</sup>. En fait, elle conduit à des calculs extrêmement complexe dans les noyaux finis: par exemple M. Baranger a montré <sup>41)</sup> qu'une théorie de l'appariement fondée sur une fonction d'onde telle que (41) n'est utilisable pratiquement qu'à la limite  $N \rightarrow \infty$ .

Une autre forme de paires de nucléons corrélés conduit à une fonction d'onde beaucoup plus simple. Ce sont les "paires de Cooper" de la théorie de BCS (Bardeen, Cooper, Schrieffer <sup>42)</sup>). Les opérateurs de créations de paires sont:

$$P_\alpha^+ = u_\alpha + v_\alpha a_\alpha^+ a_\alpha^+ \quad (42)$$

avec

$$u_\alpha^2 + v_\alpha^2 = 1 \quad (43)$$

L'état fondamental du noyau construit avec ses paires est supposé de la forme:

$$|\tilde{\Psi}\rangle = P_1^+ P_2^+ \dots P_j^+ \dots |0\rangle \quad (44)$$

Cet état contient un nombre indéfini de nucléons. En effet on peut montrer que (44) est une somme infinie de fonctions d'onde (41):

$$|\tilde{\Psi}\rangle \propto \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} |\tilde{\Psi}_{2n}^{(1)}\rangle \quad (45)$$

En fait, lorsque l'on calcule la valeur moyenne du nombre de particules  $\hat{N} = \sum_{\alpha} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\alpha}$  dans l'état  $|\tilde{\Psi}\rangle$ , on trouve:

$$\frac{\langle \tilde{\Psi} | \hat{N} | \tilde{\Psi} \rangle}{\langle \tilde{\Psi} | \tilde{\Psi} \rangle} = \sum_{\alpha} (v_{\alpha})^2 \quad (46)$$

Par conséquent, si l'on impose aux états de vérifier la condition

$$\sum_{\alpha} (v_{\alpha})^2 = N \quad (47)$$

l'état (44) contiendra en moyenne  $N$  particules. Remarquons qu'il ne sera pas un état propre du nombre de particules. Par conséquent, il existera une fluctuation du nombre de particules dans cet état.

L'intérêt de la fonction d'onde (44) provient de la forme particulière des états de paires (42). Si l'on calcule  $P_{\alpha}^{+}|0\rangle$ , on trouve en utilisant les relations (36), (37), (38) et (39):

$$P_{\alpha}^{+}|0\rangle = \frac{1}{v_{\alpha}} (u_{\alpha} a_{\alpha} - v_{\alpha} a_{\bar{\alpha}}^{\dagger}) (u_{\alpha} a_{\bar{\alpha}} + v_{\alpha} a_{\alpha}^{\dagger}) |0\rangle$$

En définissant des opérateurs:

$$\begin{aligned} \eta_{\alpha} &= u_{\alpha} a_{\alpha} - v_{\alpha} a_{\bar{\alpha}}^{\dagger} \\ \eta_{\bar{\alpha}} &= u_{\alpha} a_{\bar{\alpha}} + v_{\alpha} a_{\alpha}^{\dagger} \end{aligned} \quad (48)$$

on voit que:

$$P_{\alpha}^{+}|0\rangle = \frac{1}{v_{\alpha}} \eta_{\alpha} \eta_{\bar{\alpha}} |0\rangle$$

et par conséquent l'état (44) s'écrit

$$|\tilde{\Psi}\rangle \propto \eta_1 \eta_{\bar{1}} \eta_2 \eta_{\bar{2}} \dots \eta_j \eta_{\bar{j}} \dots |0\rangle \quad (49)$$

On montre facilement que les  $\eta$  se comportent comme des opérateurs de destruction de fermions. En effet, grâce à (43), ils vérifient des relations analogues à (37). De plus, on peut définir les opérateurs de création correspondants en prenant le conjugué des relations (48), ce qui donne:

$$\begin{aligned} \eta_{\alpha}^{\dagger} &= u_{\alpha} a_{\alpha}^{\dagger} - v_{\alpha} a_{\bar{\alpha}} \\ \eta_{\bar{\alpha}}^{\dagger} &= u_{\alpha} a_{\bar{\alpha}}^{\dagger} + v_{\alpha} a_{\alpha} \end{aligned} \quad (50)$$

Ces opérateurs de création vérifient également les relations (36) et (39). Les  $\eta_{\alpha}$  sont donc des opérateurs de Fermions comme les  $a_{\alpha}$ . Des opérateurs de ce type qui combinent des opérateurs de création et d'annihilation de particules sont appelés des opérateurs de quasi-particule. Avec ces quantités, l'état (49) s'interprète facilement: c'est l'état dans lequel toutes les quasi-particules ont été détruites. C'est donc le vide des états de quasi-particule. En effet, pour tout opérateur de fermion (cf. (37))  $(\eta_{\alpha})^2 = 0$ , et par suite:

$$\eta_{\alpha} |\tilde{\Psi}\rangle = 0$$



Ainsi, la forme de l'état fondamental qui apparaît a une structure très simple une fois que sont introduites les quasi-particules. Cette propriété remarquable qu'il est un vide (non de nucléons, mais de quasi-particules!!) simplifie considérablement l'extension de la théorie du champ moyen au traitement des corrélations d'appariement.

### 3. Interprétation des états de quasi-particules

Que deviennent les états de quasi-particules à la limite Hartree-Fock?

A cette limite, les états de quasi-particules  $\eta_\alpha$  doivent être tels que l'état fondamental  $|\Psi_{HF}\rangle$  est leur vide, c'est-à-dire :

$$\eta_\alpha |\Psi_{HF}\rangle = 0 \quad (51)$$

Pour trouver l'expression des  $\eta_\alpha$  dans ce cas, reprenons l'expression (35) de  $|\Psi_{HF}\rangle$  en seconde quantification. Les états à une particule d'indices  $\alpha_i, i = 1, \dots, n$  sont les états occupés par les nucléons. Appelons  $\alpha_p$  les autres états à une particule, c'est-à-dire ceux non occupés dans l'état  $|\Psi_{HF}\rangle$ . Dans le Chapitre précédent, au début du paragraphe 1., nous avons appelé les états  $\alpha_i$  "états de trous" et ceux du type  $\alpha_p$  "états de particule". Il est clair que deux types d'opérateurs  $a_\alpha$  appliqués à  $|\Psi_{HF}\rangle$  donnent zéro: d'une part, il n'est pas possible de détruire un nucléon d'un état inoccupé, d'autre part, il n'est pas possible de créer un nucléon dans un état déjà occupé. Ceci s'écrit:

$$\begin{aligned} a_{\alpha_p} |\Psi_{HF}\rangle &= 0 \\ a_{\alpha_i}^+ |\Psi_{HF}\rangle &= 0 \end{aligned} \quad (52)$$

En revenant maintenant à la définition (48) des états de quasi-particules, on voit que (52) est équivalent à (51) si l'on pose:

$$\begin{aligned} \eta_{\alpha_p} &= a_{\alpha_p}, & u_{\alpha_p} &= 1, & v_{\alpha_p} &= 0 \\ \eta_{\alpha_i} &= a_{\alpha_i}^+, & u_{\alpha_i} &= 0, & v_{\alpha_i} &= 1 \end{aligned} \quad (53)$$

En prenant les relations conjuguées, on a également:

$$\eta_{\alpha_p}^+ = a_{\alpha_p}^+, \quad \eta_{\alpha_i}^+ = a_{\alpha_i} \quad (54)$$

On vérifie immédiatement que ces  $\eta_\alpha$  obéissent aux relations d'anticommutation d'opérateurs de fermions.

Ainsi, créer une quasi-particule consiste soit à mettre un nucléon dans un état inoccupé, soit à ôter un nucléon d'un état occupé. Inversement, détruire une quasi-particule consiste soit à ôter un nucléon mis auparavant dans un état inoccupé, soit à réinstaller un nucléon dans un état de trou préalablement vidé. Lorsque des quasi-particules sont créées l'excitation du système augmente. Lorsqu'elles sont détruites, le système se rapproche de l'état fondamental. En particulier, les excitations particule-trou  $a_{\alpha_p}^+ a_{\alpha_i}$  de la théorie Hartree-Fock sont équivalentes à la création de deux quasi-particules:

$$a_{\alpha_p}^+ a_{\alpha_i} = \eta_{\alpha_p}^+ \eta_{\alpha_i}^+$$

Ceci montre que les états de quasi-particules représentent les excitations élémentaires du système. Dans cette situation, il n'est pas étonnant que l'état fondamental du système soit le vide des états de quasi-particules: l'état fondamental est par définition l'état ne contenant aucune excitation ....

L'interprétation qui vient d'être donnée s'étend aux états plus généraux du type (49). Dans ce cas, les excitations élémentaires du système ne se ramènent pas seulement à des excitations particule-trou. Certaines d'entre elles, comme on le verra, décrivent en fait la brisure d'une paire, c'est-à-dire la destruction de la corrélation existant entre deux nucléons appariés.

#### 4. La théorie de Hartree-Fock-Bogolyubov

La théorie de Hartree-Fock-Bogolyubov est la théorie du champ moyen fondée sur une fonction d'onde du type (49) pour l'état fondamental des noyaux. Celui-ci est donc supposé être un vide de quasi-particules  $|\tilde{\Psi}_{HFB}\rangle$  vérifiant:

$$\eta_{\alpha}|\tilde{\Psi}_{HFB}\rangle = 0 \quad (55)$$

les opérateurs de quasi-particules étant de la forme (cf. (48)):

$$\eta_{\alpha} = u_{\alpha}a_{\alpha} - v_{\alpha}a_{\bar{\alpha}}^{\dagger} \quad (56)$$

avec:

$$u_{\alpha}^2 + v_{\alpha}^2 = 1. \quad (57)$$

Notons que si l'on suppose

$$u_{\alpha} = u_{\bar{\alpha}}, \quad v_{\alpha} = -v_{\bar{\alpha}}, \quad (58)$$

les deux relations (48) se réduisent à la seule expression (56). C'est ce que nous ferons dans la suite.

Les quantités à déterminer pour spécifier l'état fondamental du noyau sont les  $u_{\alpha}$ , les  $v_{\alpha}$  et les états de particules  $a_{\alpha}$ . La méthode de Hartree-Fock-Bogolyubov consiste à trouver des équations pour ces quantités à partir d'un principe variationnel, de la même façon que dans la théorie de Hartree-Fock: on écrit que  $|\tilde{\Psi}_{HFB}\rangle$  est l'état qui minimise la valeur moyenne de l'énergie:

$$E = \frac{\langle \tilde{\Psi}_{HFB} | H | \tilde{\Psi}_{HFB} \rangle}{\langle \tilde{\Psi}_{HFB} | \tilde{\Psi}_{HFB} \rangle} \quad (59)$$

construite avec le hamiltonien microscopique (15). La procédure que l'on suit est la même que celle décrite au paragraphe 1. à propos de la méthode Hartree-Fock: on exprime l'énergie en fonction des paramètres variationnels, on identifie les contraintes auxquelles ils sont soumis, puis on écrit que la dérivée de l'énergie par rapport à ces paramètres variationnels est nulle, en tenant compte des contraintes avec la méthode des multiplicateurs de Lagrange.

### a/ Expression de l'énergie

L'explicitation de (59) n'est pas aussi directe ici que dans le cas Hartree-Fock car la fonction d'onde de Hartree-Fock-Bogolyubov (49) n'est pas écrite dans l'espace des  $\vec{r}$ , mais en seconde quantification. En fait, la dérivation habituelle des équations de Hartree-Fock-Bogolyubov est généralement effectuée directement dans ce formalisme sans revenir à l'espace des  $\vec{r}$  (II-IV). Comme cette façon de faire demande un appareillage théorique assez élaboré tout en restant extrêmement formelle, nous allons tenter de présenter une dérivation assez proche de celle donnée pour la méthode de Hartree-Fock. Là aussi nous omettrons les indices de spin et d'isospin. Leur réintroduction à côté de la variable d'espace ne présente pas de difficultés particulières, simplement des complications d'écriture.

La première étape consiste à trouver l'équivalent des fonctions d'onde à un nucléon  $\phi_\alpha$  pour les états de quasi-particules  $\eta_\alpha$ . Les opérateurs de destruction de quasi-particules (56) comprennent en fait deux parties distinctes: l'une détruisant un nucléon dans l'état  $\alpha$  et l'autre créant un nucléon dans l'état conjugué  $\bar{\alpha}$ . La première composante peut être associée à l'état de nucléon  $\phi_\alpha(\vec{r})$  pondéré par l'amplitude  $u_\alpha$  et la seconde à l'état de nucléon  $\phi_{\bar{\alpha}}^*(\vec{r})$  pondéré par l'amplitude  $-v_\alpha$ . Il résulte de ceci que la "fonction d'onde" que l'on peut associer à un opérateur de destruction quasi-particule est un objet à deux composantes du type:

$$\begin{pmatrix} U_\alpha(\vec{r}) \\ V_\alpha(\vec{r}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_\alpha \phi_\alpha(\vec{r}) \\ -v_\alpha \phi_{\bar{\alpha}}^*(\vec{r}) \end{pmatrix} \quad (60)$$

Cette correspondance peut être rigoureusement justifiée en introduisant les opérateurs du champ de nucléon dans l'espace des  $\vec{r}$  (III). Nous l'admettrons ici sans démonstration.

Les fonctions d'onde (60) doivent obéir à des relations d'orthonormalité et de complétude qui proviennent d'une part de celles des  $\phi_\alpha(\vec{r})$ , d'autre part de (57). En particulier, on aura:

$$\int (|U_\alpha(\vec{r})|^2 + |V_\alpha(\vec{r})|^2) d^3r = 1 \quad (61)$$

Notons qu'à la limite Hartree-Fock, les objets à deux composantes (60) se ramènent aux fonctions d'onde habituelles. Plus précisément, compte tenu de (53), on obtient la correspondance suivante pour les états de particule  $\alpha_p$  et les états de trous  $\alpha_i$ :

$$\begin{pmatrix} U_{\alpha_p}(\vec{r}) \\ V_{\alpha_p}(\vec{r}) \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} \phi_{\alpha_p}(\vec{r}) \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} U_{\alpha_i}(\vec{r}) \\ V_{\alpha_i}(\vec{r}) \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ -\phi_{\bar{\alpha}_i}^*(\vec{r}) \end{pmatrix} \quad (62)$$

Avec les objets (60), l'état de Hartree-Fock-Bogolyubov (49) peut être réécrit dans l'espace des  $\vec{r}$  sous la forme d'un déterminant de Slater généralisé du type

$$\tilde{\Psi}_{HFB}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_\alpha, \dots) = \det \left[ \begin{pmatrix} U_1(\vec{r}_1) \\ V_1(\vec{r}_1) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_2(\vec{r}_2) \\ V_2(\vec{r}_2) \end{pmatrix} \dots \begin{pmatrix} U_\alpha(\vec{r}_\alpha) \\ V_\alpha(\vec{r}_\alpha) \end{pmatrix} \dots \right] \quad (63)$$

Remarquons que les paramètres variationnels initialement introduits (les  $u_\alpha$ ,  $v_\alpha$  et  $\phi_\alpha(\vec{r})$ ) peuvent être remplacés par les fonctions d'onde  $U_\alpha(\vec{r})$  et  $V_\alpha(\vec{r})$ . Il reste maintenant à exprimer l'énergie (59) en fonction de ces quantités. Nous donnons le résultat sans justification (dans le

formalisme spatial, les calculs sont extrêmement lourds; pour exprimer des valeurs moyennes d'opérateurs, telles que celle de  $H$  ici, il est de loin préférable d'employer le formalisme de la seconde quantification). On trouve une expression que l'on peut écrire:

$$\begin{aligned}
 E &= \int \frac{\hbar^2}{2M} \nabla_{\vec{r}} \nabla_{\vec{r}'} \rho(\vec{r}, \vec{r}') |_{\vec{r}=\vec{r}'} d^3 r \\
 &+ \frac{1}{2} \int d^3 r \int d^3 r' v^{eff}(\vec{r} - \vec{r}', \rho) [\rho(\vec{r})\rho(\vec{r}') - \rho(\vec{r}, \vec{r}')\rho(\vec{r}', \vec{r})] \\
 &+ \frac{1}{2} \int d^3 r \int d^3 r' \kappa^*(\vec{r}', \vec{r}) v^{eff}(\vec{r} - \vec{r}', \rho) \kappa(\vec{r}, \vec{r}') \quad (64)
 \end{aligned}$$

où les  $\rho$  sont les densités de nucléons (locales et non locales) définies de la façon suivante:

$$\begin{aligned}
 \rho(\vec{r}, \vec{r}') &= \sum_{\alpha} V_{\alpha}(\vec{r}) V_{\alpha}^*(\vec{r}') \\
 &= \delta(\vec{r} - \vec{r}') - \sum_{\alpha} U_{\alpha}(\vec{r}) U_{\alpha}^*(\vec{r}') \quad (65)
 \end{aligned}$$

$$\rho(\vec{r}) = \rho(\vec{r}, \vec{r}) \quad (66)$$

et  $\kappa$  la quantité:

$$\kappa(\vec{r}, \vec{r}') = \sum_{\alpha} U_{\alpha}^*(\vec{r}) V_{\alpha}(\vec{r}') \quad (67)$$

$$= -\kappa(\vec{r}', \vec{r}) \quad (68)$$

Les deux premières lignes de l'expression de l'énergie sont exactement les mêmes que dans la théorie de Hartree-Fock. Pour s'en convaincre, il suffit de reprendre les expressions (24) et (30) donnant les densités locale et non-locale Hartree-Fock, et de les réintroduire dans (19).

En revanche, la dernière ligne de (64) est nouvelle. Elle représente l'énergie d'appariement du noyau, c'est-à-dire l'énergie contenue dans les paires de nucléons corrélés.  $\kappa$  est l'amplitude de probabilité de trouver une paire de nucléons corrélés dont l'un est en  $\vec{r}$  et l'autre en  $\vec{r}'$ . On l'appelle le "tenseur d'appariement" ou quelquefois encore "la densité anormale" de nucléons. Remarquons que (62) montre qu'à la limite Hartree-Fock  $\kappa$  tend vers zéro, ainsi que l'on doit s'y attendre.

Nous avons fait apparaître en (68) que  $\kappa$  est une quantité antisymétrique en  $\vec{r}$  et  $\vec{r}'$ . Cette propriété provient des relations d'orthogonalité entre les "fonctions d'onde" du type (60). Elle exprime également le fait que les deux nucléons d'une paire sont des fermions et que leur échange introduit toujours une phase  $-1$ . On a, en particulier,  $\kappa(\vec{r}, \vec{r}) \equiv 0$ , ce qui montre que  $\kappa$  est un objet nécessairement non-local. Cette dernière caractéristique explique pourquoi les corrélations d'appariement ne peuvent être décrites qu'à l'aide d'une force de portée non nulle.

#### b/ Les équations de Hartree-Fock-Bogolyubov

Les équations de Hartree-Fock-Bogolyubov s'obtiennent d'une façon analogue à celles de Hartree-Fock. On écrit que l'énergie (64) est stationnaire vis-à-vis des variations des  $U_{\alpha}$  et des  $V_{\alpha}$ . Là aussi, les variations doivent respecter les relations d'orthonormalité des fonctions d'onde, et on utilise pour ce faire la méthode des multiplicateurs de Lagrange. On montre

que, comme dans le cas Hartree-Fock, il suffit de ne tenir compte en fait que de la relation de normalisation (61).

Un second type de contrainte doit également être introduit. C'est celui qui permet d'assurer que le nombre de particules de l'état  $\bar{\Psi}_{HFB}$  est bien égal à  $N$ . En effet, comme on l'a vu au paragraphe 2., la forme de fonction d'onde (49) ne fournit pas automatiquement un nombre de particules déterminé comme dans le cas Hartree-Fock. La contrainte qui en résulte sur les  $U_\alpha$  et  $V_\alpha$  se déduit facilement de (46). On obtient:

$$\int \sum_{\alpha} |V_{\alpha}(\vec{r})|^2 d^3r = N \quad (69)$$

ou encore:

$$\int \rho(\vec{r}) d^3r = N \quad (70)$$

La méthode de Lagrange appliquée aux deux types de contraintes précédents consiste alors à minimiser la fonctionnelle:

$$F(U_{\alpha}, V_{\alpha}) = E - \sum_{\alpha} E_{\alpha} \left[ \int (|U_{\alpha}(\vec{r})|^2 + |V_{\alpha}(\vec{r})|^2) d^3r - 1 \right] - \lambda \left[ \int \rho(\vec{r}) d^3r - N \right] \quad (71)$$

sans restriction sur les  $U_{\alpha}$  et  $V_{\alpha}$ . Les paramètres de Lagrange  $E_{\alpha}$  et  $\lambda$  sont déterminés de façon que les conditions (61) et (70) soient vérifiées.

Les conditions de stationnarité de  $F$  conduisent ici au système infini d'équations:

$$\frac{\partial F}{\partial U_{\alpha}^*(\vec{r})} = 0, \quad \frac{\partial F}{\partial V_{\alpha}^*(\vec{r})} = 0 \quad (72)$$

et aux équations complexes conjuguées. Les dérivées indiquées se calculent très facilement compte tenu des expressions données plus haut pour  $\rho$  et  $\kappa$ . On obtient ainsi le système d'équations:

$$\begin{aligned} \frac{-\hbar^2}{2M} \Delta U_{\alpha}(\vec{r}) + (\mathcal{U}_{HFB} U_{\alpha})(\vec{r}) + \int \Delta^*(\vec{r}, \vec{r}') V_{\alpha}(\vec{r}') d^3r' - \lambda &= E_{\alpha} U_{\alpha}(\vec{r}) \\ \frac{-\hbar^2}{2M} \Delta V_{\alpha}(\vec{r}) + (\mathcal{U}_{HFB} V_{\alpha})(\vec{r}) + \int \Delta(\vec{r}, \vec{r}') U_{\alpha}(\vec{r}') d^3r' - \lambda &= -E_{\alpha} V_{\alpha}(\vec{r}) \end{aligned} \quad (73)$$

On obtient deux séries d'équations couplées pour les  $U_{\alpha}$  et les  $V_{\alpha}$ . Les deux premiers termes de chaque équation sont ceux des équations Hartree-Fock (25) décrites précédemment. En particulier  $\mathcal{U}_{HFB}$  est le champ moyen, somme des trois composantes: champ direct, champ d'échange et champ de réarrangement données en fonction des densités par les expressions (26) à (28). Nous avons appelé ce champ moyen  $\mathcal{U}_{HFB}$  car les densités à utiliser sont celles définies dans la théorie de Hartree-Fock-Bogolyubov. Notons que le champ d'échange agit sur les  $U_{\alpha}$  et les  $V_{\alpha}$  par l'intermédiaire d'une intégrale.

Le troisième terme de chaque équation représente l'action du champ d'appariement:

$$\begin{aligned} \Delta(\vec{r}, \vec{r}') &= \frac{1}{2} v^{eff}(\vec{r} - \vec{r}', \rho) \kappa(\vec{r}, \vec{r}') \\ &= -\Delta(\vec{r}', \vec{r}) \end{aligned} \quad (74)$$

Ce champ est antisymétrique en  $\vec{r}$  et  $\vec{r}'$  car  $\kappa$  a cette propriété et  $v^{eff}$  est symétrique dans ces mêmes variables. Ce champ mesure l'intensité de la corrélation d'appariement ressentie par les nucléons d'une paire dont l'un est en  $\vec{r}$  et l'autre en  $\vec{r}'$ . Le champ d'appariement est non-local comme le champ moyen d'échange. Comme ce dernier, il agit sur les  $U_\alpha$  et les  $V_\alpha$  par l'intermédiaire d'une intégrale.

Les équations (73) sont non linéaires comme les équations de Hartree-Fock, et elles doivent être résolues par itérations. La méthode est très proche de celle décrite sur la Figure 21. A chaque itération, ces équations se présentent comme un système d'équations aux valeurs et aux vecteurs propres. Ce sont les paramètres de Lagrange  $E_\alpha$  introduits pour conserver la norme des états de quasi-particules qui jouent le rôle de valeurs propres, comme déjà dans les équations de Hartree-Fock. Les  $E_\alpha$  sont homogènes à une énergie. Ce sont les "énergies de quasiparticules". On montre que l'on peut toujours choisir les  $E_\alpha$  positifs. En effet, ceux-ci étant précédés du signe moins dans la seconde équation, changer le signe de  $E_\alpha$  revient simplement à échanger les rôles de  $U_\alpha$  et  $V_\alpha$ .

On voit que c'est le terme contenant le champ d'appariement qui couple les équations pour  $U_\alpha$  et  $V_\alpha$ . En fait, à la limite Hartree-Fock,  $\kappa$  et  $\Delta$  s'annulent et les deux équations de découplent. Les correspondances (62) montrent que l'on retrouve alors deux équations du type de Hartree-Fock, la première pour les états de particules, la seconde pour les états de trous. L'identification des équations obtenues avec celles de Hartree-Fock montre ce que les énergies de quasi-particules deviennent à cette limite. On obtient:

$$E_p = \epsilon_p - \lambda \quad (75)$$

$$E_i = -\epsilon_p + \lambda \quad (76)$$

pour les états de particules et de trous respectivement. Par ailleurs, lorsque l'on résoud les équations de Hartree-Fock-Bogolyubov, le paramètre  $\lambda$  qui sert à conserver le nombre de particules s'établit à une valeur proche de l'énergie de Fermi, l'énergie du dernier état occupé (voir plus loin). Ainsi, les énergies de quasi-particules (76) mesurent l'énergie d'excitation des états à une particule par rapport à la surface de Fermi. On constate que ce sont des quantités positives.

Dans le cas général, c'est-à-dire lorsque  $\kappa$  et  $\Delta$  ne sont pas nuls,

$$(v_\alpha)^2 = \int \sum_\alpha |V_\alpha(\vec{r})|^2 d^3r \quad (77)$$

mesure la probabilité d'occupation du niveau  $\alpha$ . Cette définition est cohérente avec la relation (69) donnant le nombre total de particules du noyau. Conformément à (57), la quantité  $(v_\alpha)^2$  est la probabilité de ce niveau d'être non occupé.

Lorsque l'on résoud les équations (73) on trouve un comportement pour les  $(v_\alpha)^2$  semblable à celui de la Figure 22. L'échelle horizontale, dénotée  $\epsilon_\alpha$ , repère la séquence des états  $\alpha$ , ceux-ci étant ordonnés de telle façon que la fonction  $(v_\alpha)^2$  soit continûment décroissante. Pour des raisons de simplicité, on a représenté cette échelle horizontale comme si elle était continue,

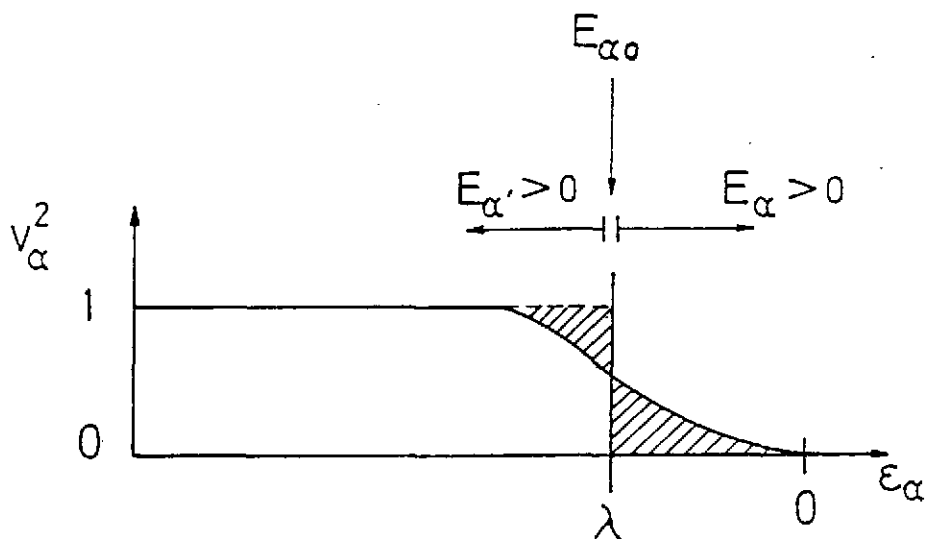


Figure 22: Représentation de l'occupation des états à une particule dans la méthode de Hartree-Fock-Bogolyubov.  $\lambda$  est le paramètre chimique et les  $E_\alpha$  sont les énergies de quasi-particules.

alors que dans les faits  $\alpha$  est un indice discret, tout au moins pour les états de quasi-particules liés. On voit que  $(v_\alpha)^2$  est très proche de 1 pour un certain nombre d'états, décroît de 1 à 0 dans un zone relativement réduite, et devient pratiquement nul ensuite. Un certain nombre d'états sont donc pratiquement complètement occupés, mais la transition entre états occupés et inoccupés n'est pas abrupte comme dans le modèle Hartree-Fock. Il existe une "zone de diffusivité" de l'occupation des niveaux. Autrement dit la surface de Fermi n'est pas définie de façon nette. Elle est "diffuse".

La résolution des équations montre que le paramètre  $\lambda$  se situe approximativement au milieu de cette zone de diffusivité. Notons que d'après la théorie des paramètres de Lagrange  $\lambda$  est la dérivée de l'énergie du noyau par rapport au nombre de particules. C'est donc l'énergie qu'il faut fournir au noyau pour lui enlever une particule, c'est-à-dire l'énergie de séparation d'une particule. Pour cette raison, par analogie avec la thermodynamique statistique, on l'appelle le "paramètre chimique" ou le "potentiel chimique". Dans les noyaux usuels  $\lambda$  vaut entre  $-6$  et  $-8$  MeV.

Nous avons également indiqué schématiquement sur la Figure 22 comment doivent être interprétées les énergies de quasi-particules. Loin de la zone de diffusivité, elles s'identifient aux différences en valeur absolue entre les énergies de liaison du type Hartree-Fock et l'énergie de Fermi  $\lambda$ . Ceci n'est pas le cas dans la zone de diffusivité. En particulier, l'énergie de quasi-particule la plus basse  $E_{\alpha_0}$ , que nous avons située au milieu de la zone de diffusivité, est l'énergie qu'il faut fournir pour briser le lien qui existe entre les deux nucléons d'une paire corrélée.

L'interprétation que nous venons de donner des énergies de quasi-particules situées loin de la surface de Fermi suggère que les états les plus occupés sont aussi les plus liés, et que les états vides sont les moins liés. Cette propriété est sous-jacente dans l'étiquette  $\epsilon_\alpha$  de l'échelle horizontale de la Figure 22. En fait, la théorie de Hartree-Fock-Bogolyubov ne donne

directement aucune quantité que l'on puisse interpréter comme des "énergies à une particule". Les seules quantités qu'elle fournit sont les énergies de quasi-particules. Le lien entre énergies de particules et énergies de quasi-particules n'apparaît que dans l'approximation dite "BCS" de la théorie de Hartree-Fock-Bogolyubov, approximation que nous présenterons dans le paragraphe suivant. Soulignons cependant que, même dans ce cas, les  $(v_\alpha)^2$  ne sont pas nécessairement des fonctions continûment décroissantes de  $\epsilon_\alpha$ . Il arrive souvent qu'il y ait des "inversions" d'occupation: un état à une particule peut avoir une occupation supérieure à celui situé en-dessous.

L'existence d'une diffusivité de l'occupation des niveaux a une conséquence importante en ce qui concerne la répartition de l'énergie totale du noyau entre ses différentes composantes. Si l'on reprend l'expression(64), on peut séparer l'énergie Hartree-Fock-Bogolyubov sous la forme:

$$E_{HFB} = E_{HF}^{(B)} + E_{App} \quad (78)$$

où  $E_{HF}^{(B)}$  est la "composante Hartree-Fock", c'est-à-dire celle ne dépendant que des densités, et  $E_{App}$  l'énergie d'appariement calculée avec le seul  $\kappa$ . Si l'on compare l'énergie  $E_{HFB}$  avec l'énergie  $E_{HF}$  obtenue dans un calcul Hartree-Fock pur, on obtient toujours

$$E_{HFB} < E_{HF}.$$

ce qui est attendu puisque la fonction d'onde Hartree-Fock-Bogolyubov est plus riche que la fonction d'onde Hartree-Fock.

En revanche, dans un noyau où l'appariement existe, on a généralement

$$E_{HF}^{(B)} > E_{HF}.$$

On constate donc une perte d'énergie de liaison dans la composante champ moyen de l'énergie. Cette perte de liaison provient du dépeuplement partiel des orbites les plus liées associé à la diffusivité de la surface de Fermi. En particulier, la somme des énergies à une particule qui intervient dans le calcul de cette composante de l'énergie est diminuée. La perte d'énergie qui en résulte est évidemment largement compensée par l'énergie d'appariement, c'est-à-dire l'énergie contenue dans les paires de nucléons corrélés. A titre d'exemple, un calcul avec les méthodes Hartree-Fock-Bogolyubov et Hartree-Fock du  $^{116}\text{Sn}$  fournit les chiffres suivants:

$$E_{HFB} = -988.94 \text{ MeV}, \quad E_{HF}^{(B)} = -972.01 \text{ MeV}, \quad E_{App} = -16.93 \text{ MeV}$$

$$E_{HF} = -985.70 \text{ MeV}$$

La perte d'énergie du champ moyen est de 13.69 MeV, les corrélations d'appariement apportent 16.93 MeV, de sorte que le gain net en énergie apporté par la méthode de Hartree-Fock-Bogolyubov est de 3.24 MeV.

Notons pour terminer ce paragraphe que la dénomination "énergie d'appariement" adoptée ici en ce qui concerne  $E_{App}$  ne reflète pas la quantité habituellement appelée de la même façon



dans les approches qui ne sont pas auto-consistantes. En effet, dans ces dernières approches, le champ moyen n'est pas modifié lorsque les corrélations d'appariement sont incluses. Il en résulte que les paramètres utilisés pour décrire l'appariement sont ajustés de façon que l'énergie d'appariement soit égale au gain net que l'on attend de leur effet. L'énergie d'appariement obtenue dans ces approches est donc de l'ordre de grandeur de la différence  $E_{HFB} - E_{HF}$ , et non de celui de  $E_{App}$ . Par exemple dans le cas du  $^{116}\text{Sn}$ , l'énergie d'appariement définie dans les méthodes phénoménologiques est de l'ordre de 3 à 4 MeV.

### 5. L'approximation BCS

Lorsque l'on résout les équations de Hartree-Fock-Bogolyubov (73), on trouve des solutions  $U_\alpha(\vec{r})$  et  $V_\alpha(\vec{r})$  qui ne vérifient en général pas les relations (60), c'est-à-dire la forme que l'on avait initialement supposées. Autrement dit:

$$U_\alpha(\vec{r}) \neq u_\alpha \phi_\alpha(\vec{r}), \quad V_\alpha(\vec{r}) \neq -v_\alpha \phi_\alpha^*(\vec{r}) \quad (79)$$

Ceci montre que les équations de Hartree-Fock-Bogolyubov admettent en fait des solutions plus générales que (60). On peut le vérifier directement. Pour cela réécrivons les équations de Hartree-Fock-Bogolyubov sous la forme matricielle:

$$\begin{pmatrix} h - \lambda & \Delta^* \\ -\Delta & -(h - \lambda) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_\alpha \\ V_\alpha \end{pmatrix} = E_\alpha \begin{pmatrix} U_\alpha \\ V_\alpha \end{pmatrix} \quad (80)$$

où  $h$  est le hamiltonien Hartree-Fock, opérateur somme de l'énergie cinétique et du champ moyen (les deux premiers termes des équations (73)). Son action sur  $U_\alpha$  est définie de la façon suivante:

$$(hU_\alpha)(\vec{r}) = \frac{-\hbar^2}{2M} \Delta U_\alpha(\vec{r}) + (\mathcal{U}_{HFB} U_\alpha)(\vec{r}) \quad (81)$$

ce qui montre que  $h$ , de même que  $\Delta$  doivent être considérés comme des opérateurs intégraux, agissant sur les  $U_\alpha(\vec{r})$  et  $V_\alpha(\vec{r})$  par l'intermédiaire d'intégrales.

Si l'on remplace maintenant  $U_\alpha(\vec{r})$  et  $V_\alpha(\vec{r})$  par les formes particulières apparaissant dans (79), que l'on intègre la première ligne avec  $\phi_\alpha^*(\vec{r})$  et la seconde avec  $\phi_\alpha(\vec{r})$ , on obtient:

$$\begin{pmatrix} h_{\beta\alpha} - \lambda\delta_{\beta\alpha} & \Delta_{\beta\bar{\alpha}}^* \\ \Delta_{\beta\alpha} & -(h_{\bar{\beta}\alpha}^* - \lambda\delta_{\beta\alpha}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_\alpha \\ v_\alpha \end{pmatrix} = \delta_{\beta\alpha} E_\alpha \begin{pmatrix} u_\alpha \\ v_\alpha \end{pmatrix} \quad (82)$$

avec

$$h_{\beta\alpha} = \int \int \phi_\beta^*(\vec{r}) h(\vec{r}, \vec{r}') \phi_\alpha(\vec{r}') d^3r d^3r' \quad (83)$$

et une expression analogue pour  $\Delta_{\beta\alpha}$ .

On voit que, à cause de la présence de  $\delta_{\beta\alpha}$  au second membre, l'équation (82) ne peut avoir de solution que si les matrices  $h$  et  $\Delta$  sont diagonales. Plus précisément, il faut que ces matrices soient de la forme:

$$h_{\beta\alpha} = \epsilon_\alpha \delta_{\beta\alpha} \quad (84)$$

$$\Delta_{\alpha\bar{\beta}} = \Delta_\alpha \delta_{\beta\alpha} \quad (85)$$

La relation (84) exprime simplement que les  $\phi_\alpha$  sont les vecteurs propres de  $h$  avec les valeurs propres  $\epsilon_\alpha$ , c'est-à-dire que ce sont les solutions des équations Hartree-Fock construites avec  $h$ . Cependant, une fois les  $\phi_\alpha$  déterminés de cette façon, l'égalité (85) n'a pas lieu en général. Ceci signifie que le champ d'appariement ne couple pas seulement les états conjugués  $\phi_\alpha$  et  $\phi_{\bar{\alpha}}$ . Il a des éléments de matrice non nuls entre des états  $\phi_\alpha$  et des états  $\phi_{\bar{\beta}}$  avec  $\beta \neq \alpha$ .

L'approximation BCS consiste précisément à négliger ces éléments de matrice "non diagonaux" de  $\Delta$ . Dans le cadre de la méthode de Hartree-Fock-Bogolyubov complètement microscopique, c'est-à-dire lorsque  $\Delta$  est calculé à partir de l'interaction effective entre les nucléons, cette approximation a l'avantage de simplifier quelque peu la résolution des équations (73). En effet, résoudre exactement ces équations consiste à diagonaliser par itération la super-matrice (80). Avec l'approximation BCS, on se contente de diagonaliser la seule matrice  $h$ . Puis, on exprime  $\Delta$  dans la représentation des  $\phi_\alpha$  et on ne garde que les éléments de matrice "diagonaux". Ensuite, il suffit de résoudre le système (82) réécrit avec les relations (84) et (85), ce qui se fait instantanément. En effet, (82) devient:

$$\begin{pmatrix} \epsilon_\alpha - \lambda & \Delta_\alpha^* \\ \Delta_\alpha & -(\epsilon_\alpha - \lambda) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_\alpha \\ v_\alpha \end{pmatrix} = E_\alpha \begin{pmatrix} u_\alpha \\ v_\alpha \end{pmatrix} \quad (86)$$

Les solutions sont:

$$E_\alpha = \sqrt{(\epsilon_\alpha - \lambda)^2 + \Delta_\alpha^2} \quad (87)$$

$$\begin{aligned} u_\alpha^2 &= \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{\epsilon_\alpha - \lambda}{E_\alpha} \right) \\ v_\alpha^2 &= \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{\epsilon_\alpha - \lambda}{E_\alpha} \right) \end{aligned} \quad (88)$$

Des expressions données plus haut on déduit également l'expression de  $\Delta_\alpha$  en fonction des  $u_\alpha$  et  $v_\alpha$ :

$$\Delta_\alpha = \frac{1}{2} \sum_\gamma \langle \alpha \bar{\alpha} | v^{eff} | \gamma \bar{\gamma} \rangle u_\gamma v_\gamma \quad (89)$$

d'où on déduit l'équation dite "du gap":

$$\Delta_\alpha = -\frac{1}{4} \sum_\gamma \langle \alpha \bar{\alpha} | v^{eff} | \gamma \bar{\gamma} \rangle \frac{\Delta_\gamma}{E_\gamma} \quad (90)$$

L'expression (87) des énergies de quasi-particules illustre ce que nous avons dit au paragraphe précédent. Pour  $\epsilon_\alpha \gg \lambda$  ou  $\epsilon_\alpha \ll \lambda$ ,  $\Delta_\alpha$  est négligeable et l'on retrouve les limites Hartree-Fock (76). Au contraire, lorsque  $\epsilon_\alpha \simeq \lambda$ , on obtient  $E_\alpha \simeq \Delta_\alpha$ . Cette dernière énergie est celle qui est nécessaire pour briser la paire de nucléons ( $\alpha, \bar{\alpha}$ ).

Notons que contrairement au cas Hartree-Fock où les excitations du système peuvent avoir une énergie nulle (cas où le niveau de Fermi n'est pas entièrement occupé), les excitations à deux quasi-particules d'un noyau décrit à l'approximation de Hartree-Fock-Bogolyubov ne sont jamais nulles. Ceci est manifeste à l'approximation BCS (cf. (87)). On dit que la méthode

de Hartree-Fock-Bogolyubov garantit la présence d'un "gap" dans le spectre d'excitation des noyaux. Ce "gap" vaut au moins  $2 \Delta_0$  à l'approximation BCS. Il est responsable de la superfluidité du noyau. On entend par là que, le système étant soumis à une influence extérieure, en particulier au couplage dynamique provoqué par une vitesse de déformation collective, il aura tendance à rester dans son état d'énergie minimale. Ceci aura lieu tant que le couplage extérieur ne sera pas suffisamment fort pour lui communiquer une énergie au moins égale au "gap". La conséquence est qu'un noyau apparié en mouvement collectif pas trop rapide peut être décrit à l'approximation adiabatique, c'est-à-dire en supposant qu'il reste dans son état le plus bas à chaque déformation. Cette remarque n'est pas sans importance en ce qui concerne la description de la dynamique des mouvements collectifs de grande amplitude comme la fission.

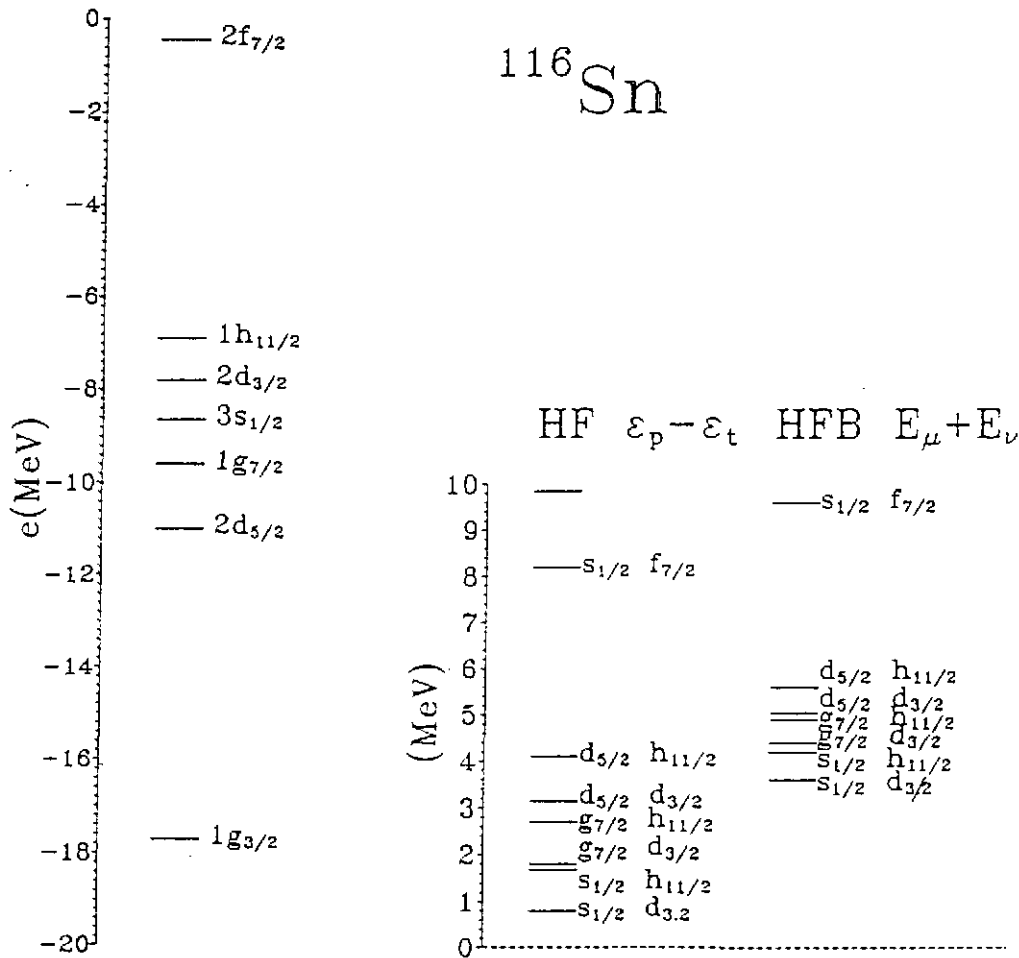


Figure 23: Resultats obtenus avec les méthodes de Hartree-Fock et de Hartree-Fock-Bogolyubov dans le  $^{116}\text{Sn}$  pour les neutrons. L'interaction effective utilisée est celle de Gogny. Le spectre des états HF est donné à gauche. A droite sont représentés le spectre des excitations particule-trou HF et le spectre des états à deux quasi-particules déduit de la méthode de Hartree-Fock-Bogolyubov.

Les différentes quantités que l'on peut extraire de la résolution des équations de Hartree-Fock-Bogolyubov, avec ou sans l'approximation BCS sont illustrées sur les Figures 23 et 24 dans le cas du  $^{116}\text{Sn}$ . La Figure 23 montre à gauche le spectre des états individuels de

neutrons obtenu avec la méthode de Hartree-Fock. Dans la partie droite de la Figure sont représentés, d'une part le spectre des excitations particule-trou que l'on déduit du spectre de gauche, d'autre part le spectre des états à deux quasi-particules dérivé d'un calcul de Hartree-Fock-Bogolyubov complet. On voit sur cette Figure comment la méthode de Hartree-Fock-Bogolyubov reconstruit un "gap" de l'ordre de 3.5 MeV dans le spectre des excitations de ce noyau, alors que, avec la méthode Hartree-Fock l'énergie particule-trou la plus basse est de l'ordre de 800 keV (rappelons que le nombre de protons du  $^{116}\text{Sn}$  est magique et que, par conséquent, l'appariement ne concerne que les neutrons). Cette figure illustre bien le rôle de l'interaction résiduelle responsable des corrélations d'appariement dans la différence d'énergie entre l'état fondamental et le premier état excité (cf. Chapitre V, paragraphe 2).

Sur la Figure 24 ont été représentées des quantités tirées d'un calcul du même noyau à l'approximation de BCS qui vient d'être décrite. Les quatre diagrammes montrent respectivement les énergies à une particule, les  $\Delta_\alpha$  (intensité de la corrélation d'appariement sur le niveau  $\alpha$ ), les  $\kappa_\alpha = u_\alpha v_\alpha$  (amplitude de probabilité d'appariement de la paire  $(\alpha\bar{\alpha})$ ), et le produit divisé par deux de  $\kappa_\alpha$  par  $\Delta_\alpha$  qui est la contribution à l'énergie d'appariement du niveau  $\alpha$ . On voit sur cette figure que l'appariement ne "s'enclenche" qu'au voisinage du niveau de Fermi, ceci bien que l'intensité de l'appariement soit maximale pour les niveaux profonds. En fait, les niveaux profonds ont une potentialité élevée de s'apparier, mais ne peuvent la réaliser car, étant trop éloignés de la surface de Fermi, ils ne peuvent se dépeupler. Remarquons que la somme  $\sum_\alpha (\kappa_\alpha)^2$  représente le nombre total de paires corrélées. On trouve ici que ce noyau comporte environ de 2 paires corrélées. Ce nombre ne dépasse jamais 3 ou 4 dans les noyaux courants, contrairement à une croyance très répandue !

Il est intéressant de remarquer que la méthode de Hartree-Fock-Bogolyubov complète se ramène automatiquement à la forme de BCS si, au lieu de calculer les corrélations d'appariement avec l'interaction effective, on les évalue avec une interaction résiduelle simplifiée du type de BCS:

$$-\frac{1}{2} \sum_{\alpha} G_{\alpha} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\bar{\alpha}}^{\dagger} a_{\bar{\alpha}} a_{\alpha} \quad (91)$$

C'est ce type d'interaction résiduelle qui est employé dans les calculs microscopiques réalisés avec la force de Skyrme. Lorsque l'on calcule le champ  $\Delta$  avec (91), on obtient:

$$\Delta_{\alpha\bar{\beta}} = -\frac{1}{2} \delta_{\alpha\bar{\beta}} G_{\alpha} u_{\alpha} v_{\alpha}$$

c'est-à-dire un champ d'appariement "diagonal". Dans ce cas, la méthode de Hartree-Fock-Bogolyubov et la forme de BCS sont identiques.

Il existe cependant un cas où l'approximation BCS, et partant, l'emploi d'une interaction résiduelle du type (91), n'est pas possible. C'est celui où l'on ne sait pas identifier quels sont les états  $\alpha$  et  $\bar{\alpha}$  qui doivent être appariés. Cette situation se produit dans l'étude des noyaux en mouvement lorsque l'on abandonne l'invariance par renversement du temps. La dégénérescence de Kramers est alors perdue, si bien que, quand on diagonalise le hamiltonien de Hartree-Fock

$^{116}\text{Sn}$

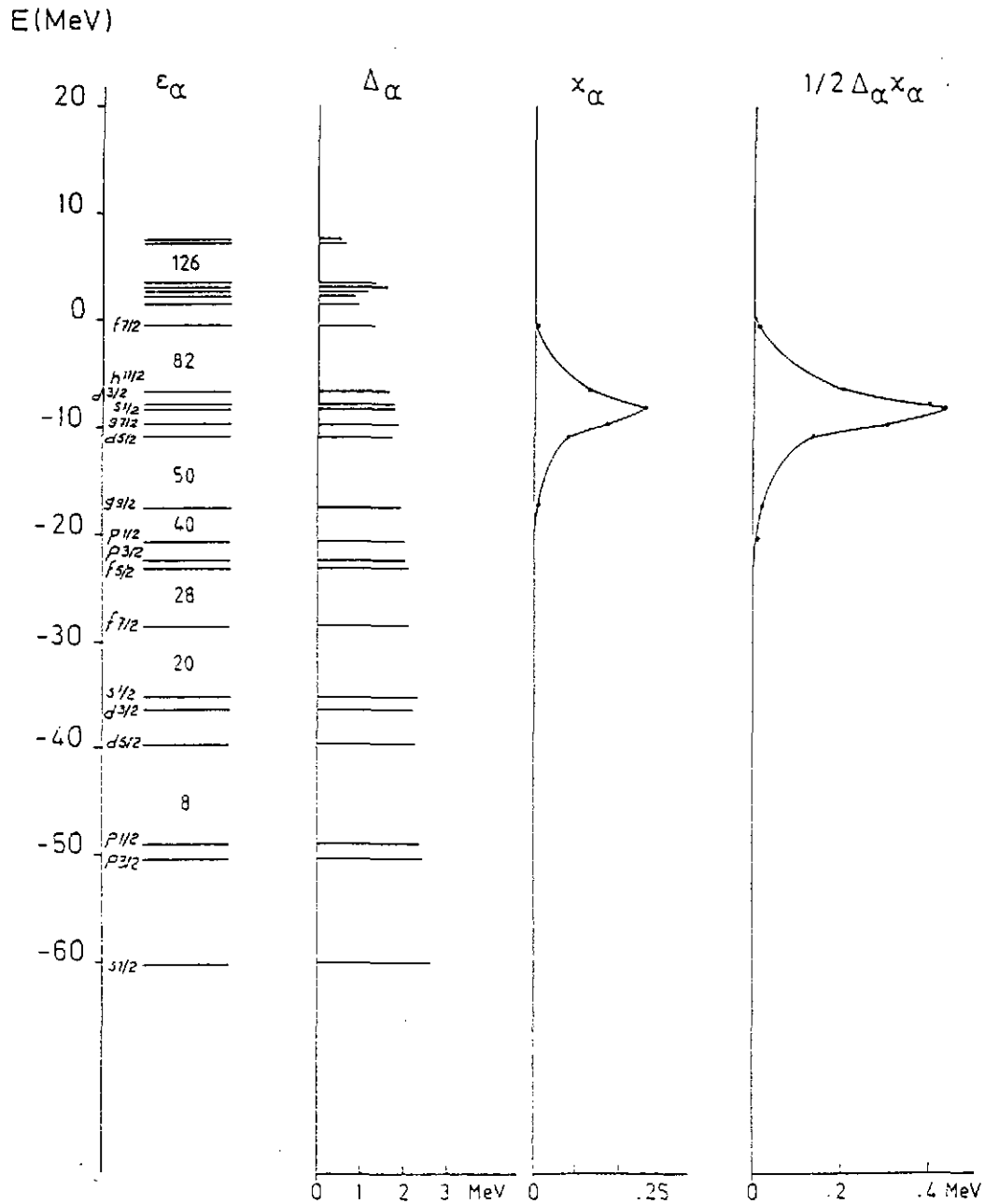


Figure 24: Résultats obtenus avec l'approximation "BCS" de la méthode de Hartree-Fock-Bogolyubov dans le  $^{116}\text{Sn}$  pour les neutrons. L'interaction effective utilisée est celle de Gogny. Les quatre colonnes représentent de gauche à droite le spectre des états HF  $\epsilon_\alpha$ , les  $\Delta_\alpha$ , les  $\kappa_\alpha$  et la contribution  $1/2 \Delta_\alpha \kappa_\alpha$  de chaque niveau à l'énergie d'appariement.

$h$ , les états  $\alpha$  que l'on trouve n'ont plus de partenaire désigné  $\bar{\alpha}$ . La seule façon de traiter les corrélations d'appariement dans ce cas est d'employer la méthode de Hartree-Fock-Bogolyubov complète avec une interaction à deux corps qui le permet, c'est-à-dire de portée finie. La méthode complète n'a pas besoin en effet de connaître *a priori* la nature des états à appariés. En fait, elle les détermine elle-même, ainsi que le montre le théorème de Bloch et Messiah <sup>43)</sup>.

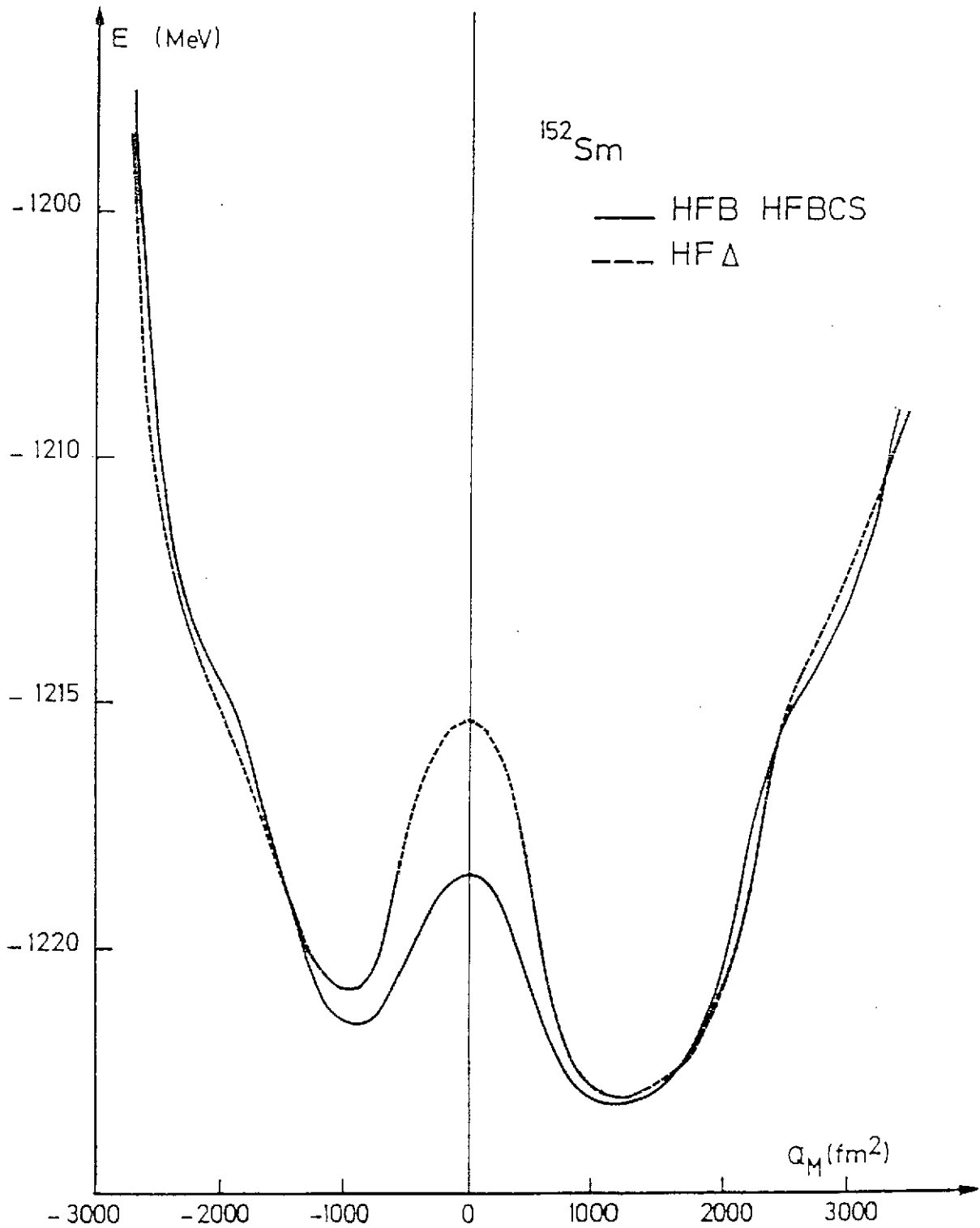


Figure 25: La surface d'énergie potentielle en fonction du moment quadrupolaire de masse obtenue dans le  $^{152}\text{Sm}$  avec trois méthodes de calcul de l'appariement: 1/ la méthode de Hartree-Fock-Bogolyubov complète avec l'interaction de Gogny (HFB), 2/ l'approximation BCS de cette méthode (HFBCS) et 3/ avec une forme d'interaction résiduelle monopolaire du type de BCS (HF $\Delta$ ).

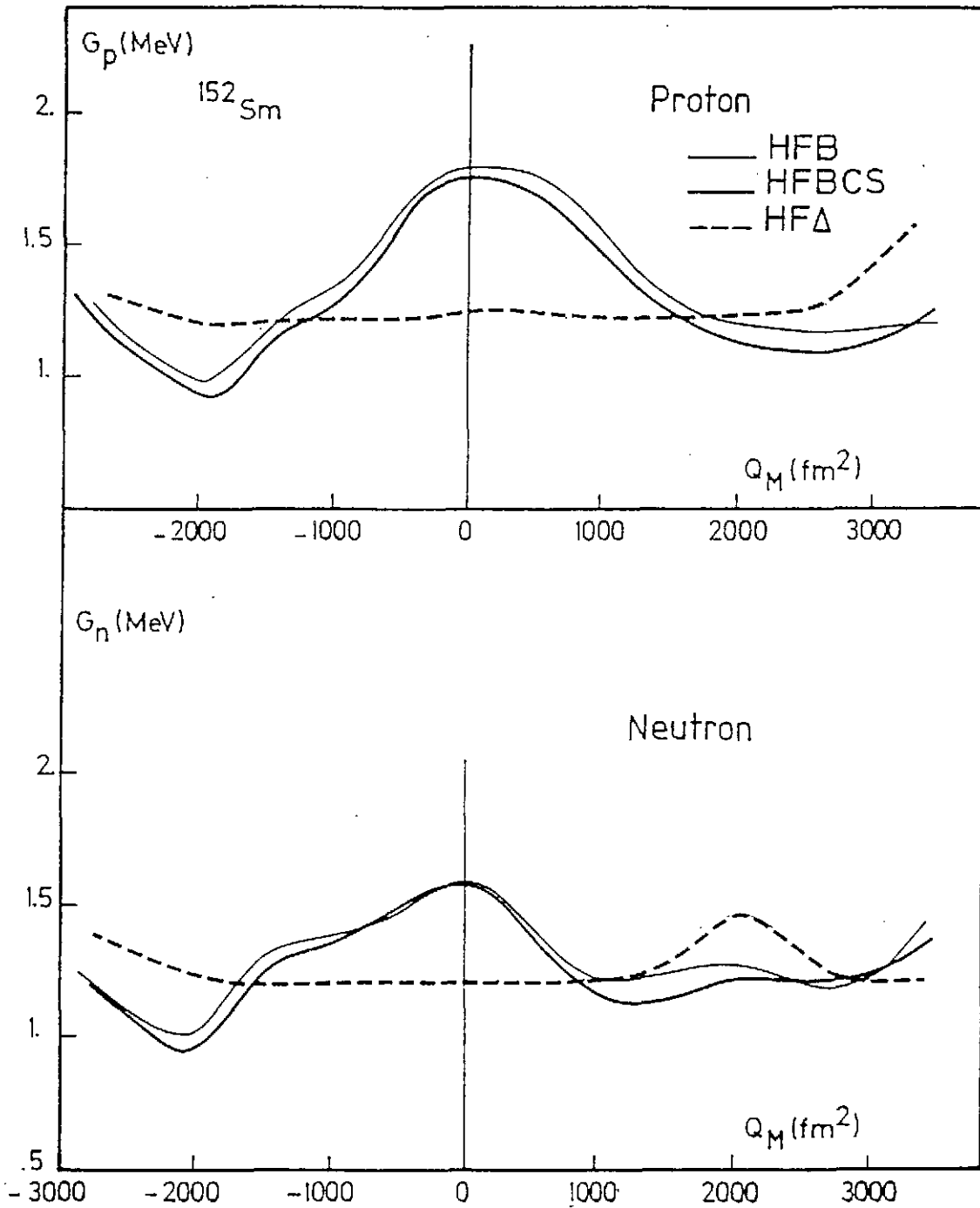


Figure 26: Le "gap" d'appariement en fonction de la déformation quadrupolaire axiale obtenu dans le  $^{152}\text{Sm}$  avec trois méthodes de calcul de l'appariement: 1/ la méthode de Hartree-Fock-Bogolyubov complète avec l'interaction de Gogny (HFB), 2/ l'approximation BCS de cette méthode (HFBCS) et 3/ avec une forme d'interaction résiduelle monopolaire du type de BCS (HF $\Delta$ ).

Mentionnons que, même lorsque l'on utilise la forme complète de l'interaction effective, il est souvent justifié (et commode) d'employer l'approximation de BCS. On trouve fréquemment par exemple que les éléments de matrice "non diagonaux" de  $\Delta$  sont moins de 20 pour cents de ceux diagonaux. Dans ce cas, négliger les premiers ne change pas de façon dramatique la

qualité des résultats concernant la structure des noyaux. Il convient de préciser que les éléments de matrice diagonaux sont calculés à partir de l'interaction effective. Ils ne contiennent par conséquent que des ingrédients microscopiques.

L'approximation qui est faite n'a en particulier rien de commun avec celle qui consiste à adopter une interaction résiduelle paramétrisée de la forme (91). Ces remarques sont illustrées sur les Figures 25 et 26. La Figure 25 représente la surface d'énergie potentielle du  $^{152}\text{Sm}$  en fonction du moment quadrupolaire de masse, calculée avec trois méthodes pour l'appariement: 1/ la méthode de Hartree-Fock-Bogolyubov complète 2/ l'approximation de BCS de cette méthode et 3/ la méthode de BCS avec une interaction résiduelle du type (91). Dans ce dernier cas, les paramètres phénoménologiques sont choisis de façon à reproduire le "gap" expérimental du noyau (à la déformation de l'état fondamental). On constate que les courbes correspondant à 1/ et à 2/ sont indiscernables, alors que celle calculée avec 3/ présente des différences importantes avec les deux autres. Ceci est encore plus net sur la Figure 26 où sont tracées les variations du "gap" en fonction de la déformation. Les méthodes 1/ et 2/ donnent des courbes distinctes mais très proches. En revanche, avec la méthode 3/ le comportement du "gap" est très différent. En fait, il se rapproche d'une constante, ce qui n'est pas étonnant puisque le paramètre  $G$ , en l'absence de prescription disponible, a été pris le même à toutes les déformations. Les courbes obtenues avec 1/ et 2/ contiennent au contraire toute la dépendance de la force d'appariement qui provient de la variation des éléments de matrice de l'interaction effective avec la déformation.

L'exemple de la Figure 25 n'est pas forcément très représentatif de l'influence de la méthode de calcul des corrélations d'appariement sur les surfaces d'énergie potentielle. Il est fréquent que celles-ci soient relativement insensibles à l'intensité de ce type de corrélations. En revanche, toutes les quantités qui dépendent de "l'excitabilité" du noyau, c'est-à-dire du spectre de quasi-particules dépendent très fortement du degré de superfluidité du noyau. Un exemple de ceci est bien connu: c'est l'influence de l'appariement sur le moment d'inertie des noyaux déformés. On sait que les effets de superfluidité sont capables de réduire le moment d'inertie d'un facteur allant de deux à cinq par rapport au moment d'inertie rigide dans la région des terres rares. Il est par conséquent clair qu'une description relativement fine de l'appariement est nécessaire si l'on veut rendre compte avec une précision raisonnable de cette quantité. Un autre exemple est celui des paramètres d'inertie relatifs aux modes collectifs de déformation. Ces paramètres d'inertie ou "masses collectives" interviennent dans la dynamique collective du noyau, ou encore dans la description des spectres collectifs lorsqu'on réduit les équations de la Coordonnée Génératrice à une équation du type de Schrödinger gouvernée par un hamiltonien collectif (cf. Partie VII). On s'aperçoit que, si l'on augmente artificiellement l'appariement de 10 %, la valeur de ces paramètres est divisée environ par deux. Inversement une diminution de l'appariement du même ordre multiplie les inerties collectives par deux <sup>44</sup>). Une description correcte de l'appariement semble donc particulièrement nécessaire dans l'étude des excitations nucléaires collectives.



## VII. DERIVATION DU HAMILTONIEN COLLECTIF MICROSCOPIQUE ET APPLICATIONS

Comme nous l'avons vu dans le paragraphe 3 du Chapitre V, il arrive fréquemment qu'un certain nombre d'états de Hartree-Fock-Bogolyubov  $\Psi_{HFB}(q)$  ayant des déformations différentes ont des énergies proches vis-à-vis de l'intensité de l'interaction résiduelle entre les quasi-particules. Cette situation caractérise les noyaux mous. Aucun des états de Hartree-Fock-Bogolyubov n'est alors une bonne approximation de l'état fondamental du noyau, et il est nécessaire de tenir compte de l'interaction résiduelle. Ainsi que nous l'avons précisé, ceci peut être réalisé en adoptant pour l'état fondamental un mélange de configuration constitué des états de Hartree-Fock-Bogolyubov pris à toutes les déformations possibles:

$$\tilde{\Psi}(x_1, x_2, \dots, x_A) = \int f(q) \Psi_{HFB}(q)(x_1, x_2, \dots, x_A) dq \quad (92)$$

Les  $f(q)$  sont des fonctions inconnues que l'on détermine comme toujours en minimisant l'énergie du noyau:

$$E = \frac{\langle \tilde{\Psi} | H | \tilde{\Psi} \rangle}{\langle \tilde{\Psi} | \tilde{\Psi} \rangle} \quad (93)$$

construite avec le hamiltonien microscopique  $H$  (le même hamiltonien effectif que celui employé dans la méthode de Hartree-Fock-Bogolyubov). Les équations que l'on obtient de cette façon sont les équations de Hill et Wheeler <sup>29</sup>):

$$\int [\langle \Psi(q) | H | \Psi(q') \rangle - E \langle \Psi(q) | \Psi(q') \rangle] f(q') dq' = 0 \quad (94)$$

(nous laissons de côté à partir de maintenant le suffixe "HFB" des fonctions d'onde de Hartree-Fock-Bogolyubov). La dérivation de cette équation est décrite en détail dans le Cours de P.H.Heenen. Ce même Cours montre également comment l'équation (94) peut être résolue numériquement.

Nous nous intéresserons ici à une méthode qui permet en fait d'éviter la résolution des équations de Hill-Wheeler exactes. Plus précisément, nous nous proposons de montrer que, sous certaines conditions, cette équation intégrale peut se ramener à une équation différentielle du type de Schrödinger, beaucoup plus facile à aborder sur le plan numérique. Bien que de grands progrès aient été réalisés dans les techniques de résolution de l'équation (94) <sup>45,46</sup>), une méthode approchée présente de l'intérêt notamment lorsque la variable  $q$  des équations précédentes est multidimensionnelle:  $q = (q_1, q_2, \dots)$ . Dans ce cas l'intégrale contenue dans (94) est un intégrale multiple et les méthodes de discrétisation habituellement employées pour l'exprimer numériquement conduisent à des matrices de taille considérable. Dans l'étude des modes couplés de rotation et de vibration par exemple, le nombre de dimensions à traiter est de cinq. Il est bien évident qu'une méthode de résolution simplifiée est la bienvenue dans ce cas.

Ajoutons que la méthode que nous allons décrire donne une vision intuitive particulièrement claire de la physique des excitations collectives dont l'équation (94) rend compte. Elle

fournit notamment le moyen de définir, dans un contexte complètement microscopique et quantique, un hamiltonien collectif de structure identique à ceux employés dans les approches phénoménologiques. En ce sens, cette méthode permet de faire le lien entre les deux types d'approche.

### 1. Les hypothèses de base

Afin de transformer l'équation intégrale (94) en une équation différentielle, deux approximations sont nécessaires: la première consiste à supposer que le recouvrement  $\langle \Psi(q) | \Psi(q') \rangle$  des fonctions d'onde de Hartree-Fock-Bogolyubov à des déformations différentes peut être approché par une forme gaussienne:

$$\langle \Psi(q) | \Psi(q') \rangle \simeq \exp\left(-\frac{G}{2}(q - q')^2\right) \quad (95)$$

avec un paramètre de largeur  $G$  variant lentement avec  $(q + q')/2$ . C'est l'approximation du recouvrement gaussien ou, en anglais, Gaussian Overlap Approximation (GOA). Dans le cas où  $q$  est multidimensionnel, on suppose que l'exposant de la gaussienne est une forme quadratique dans les différences  $q_i - q'_i$ . Comme la généralisation de une à plusieurs dimensions est immédiate, nous supposons dans ce qui suit que la variable  $q$  est monodimensionnelle.

La seconde approximation suppose qu'il est possible de développer les noyaux intégraux  $\langle \Psi(q) | H | \Psi(q') \rangle$  sur la non-localité  $|q - q'|$  en ne gardant que les termes d'ordre deux au plus. Une illustration de ces deux approximations est donnée sur la Figure 27.

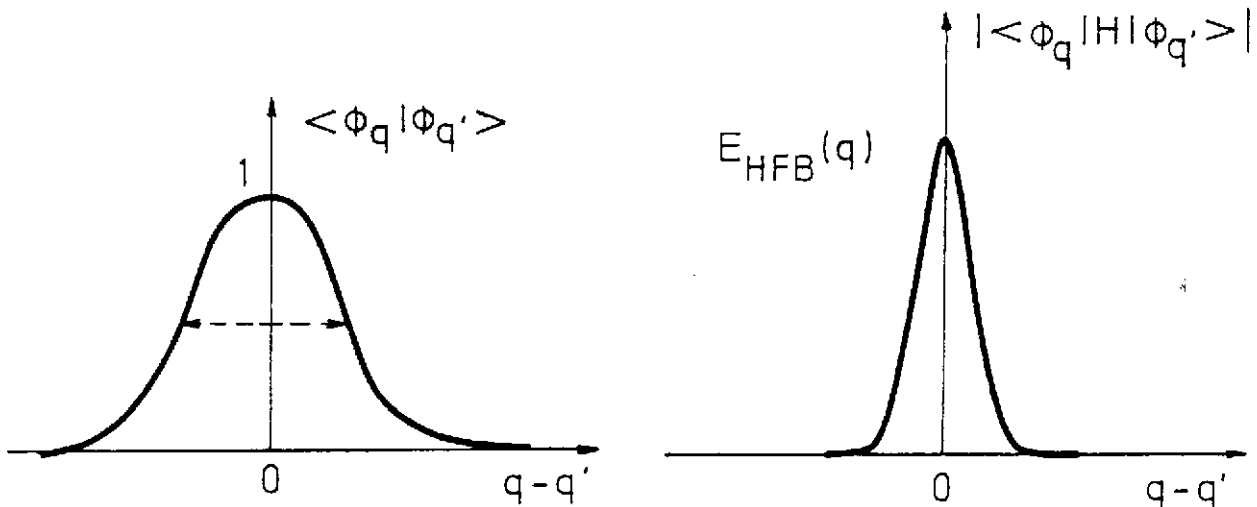


Figure 27: L'approximation du recouvrement gaussien (à gauche) et celle du noyau hamiltonien quasi-local (à droite).

Ces approximations sont-elles justifiées ? En ce qui concerne le recouvrement des fonctions d'onde, le calcul exact des recouvrements montre que leur comportement est effectivement

proche de celui d'une gaussienne. Le paramètre de largeur  $G$  varie généralement lentement avec  $(q + q')/2$  dans le cas des noyaux lourds. Un exemple illustrant ce comportement est donné sur la Figure 28, sous forme de courbes de niveaux dans le plan  $(q, q')$ . Dans le cas des noyaux légers, les variations de  $G$  sont plus rapides. Il est alors conseillé de faire un changement de variables du type:

$$q \longrightarrow \eta(q) = \int^q \sqrt{G(q')/G_0} dq' \quad (96)$$

où  $G_0$  est un paramètre de largeur constant que l'on peut prendre par exemple égal à 1. Avec ce changement de variables, l'exposant de la gaussienne (95) se transforme, à des termes du second ordre près, en  $-1/2 G_0(\eta - \eta')^2$ .

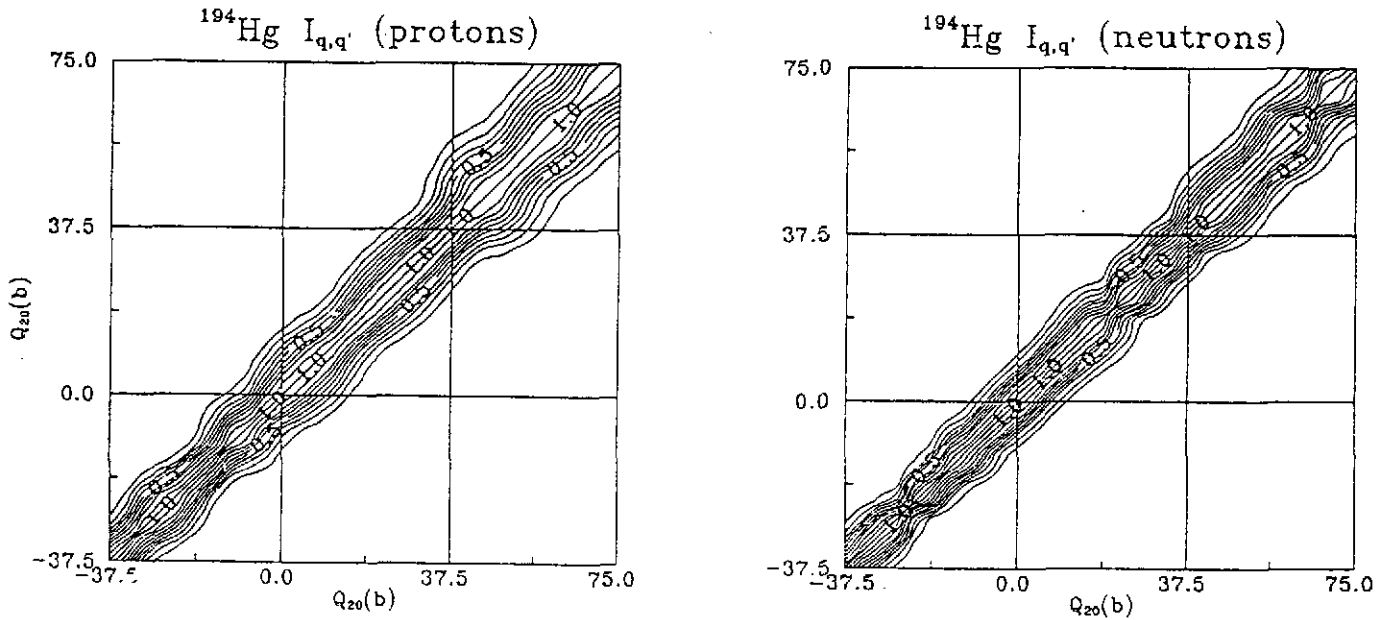


Figure 28: Courbes de niveaux du recouvrement des fonctions d'onde de Hartree-Fock-Bogolyubov pour les protons et les neutrons dans le  $^{194}\text{Hg}$ .

La justification de la seconde approximation nécessite de calculer les noyaux intégraux  $\langle \Psi(q) | H | \Psi(q') \rangle$ . C'est ce qui a été fait par Bonche et coll. <sup>46)</sup> afin de réaliser un calcul de Coordonnée Génératrice complet dans le  $^{194}\text{Hg}$ . La variable de déformation  $q$  qui a été analysée est le moment quadrupolaire axial du noyau et l'interaction employée est celle de Skyrme. Ces auteurs ont étudié le comportement des coefficients du développement du rapport:

$$h(q, q') = \frac{\langle \Psi(q) | H | \Psi(q') \rangle}{\langle \Psi(q) | \Psi(q') \rangle} \quad (97)$$

en fonction de  $q - q'$ , c'est-à-dire l'ordre de grandeur des coefficients  $h_2$  et  $h_4$  tels que

$$h(q, q') = h_0(\bar{q}) + \frac{1}{2}(q - q')^2 h_2(\bar{q}) + \frac{1}{24}(q - q')^4 h_4(\bar{q}) + \dots \quad (98)$$

avec  $\bar{q} = (q + q')/2$ . Le résultat obtenu est le suivant: alors que  $|h_0(\bar{q})|$  vaut de l'ordre de 1500 MeV (c'est le terme diagonal de (97), c'est-à-dire la surface d'énergie potentielle du noyau),

$|h_2(\bar{q})|$  vaut 3.4 MeV et  $|h_4(\bar{q})|$  .130 MeV. Ceci montre que, au moins dans le cas du noyau étudié et de la variable de déformation considérée, une approximation du second ordre sur la non-localité du noyau hamiltonien est très bien justifiée.

## 2. Réduction de l'équation de Hill-Wheeler

Si l'on admet les deux approximations précédentes, les expressions du numérateur et du dénominateur de l'énergie (93):

$$I(q, q') \equiv \langle \tilde{\Psi} | H | \tilde{\Psi} \rangle = \int dq \int dq' f^*(q) \langle \Psi(q) | \Psi(q') \rangle f(q') \quad (99)$$

$$H(q, q') \equiv \langle \tilde{\Psi} | H | \tilde{\Psi} \rangle = \int dq \int dq' f^*(q) \langle \Psi(q) | H | \Psi(q') \rangle f(q') \quad (100)$$

se simplifient notablement.

Tout d'abord,  $I(q, q')$  étant la gaussienne (95), on peut encore l'écrire:

$$I(q, q') = \int d\bar{q} N(q, \bar{q}) N(q', \bar{q}) \quad (101)$$

avec

$$N(q, \bar{q}) = \left( \frac{2G}{\pi} \right)^{1/4} e^{-G(q-\bar{q})^2} \quad (102)$$

Par conséquent (99) peut se mettre sous la forme:

$$I(q, q') \equiv \langle \tilde{\Psi} | \tilde{\Psi} \rangle = \int g^*(\bar{q}) g(\bar{q}) d\bar{q} \quad (103)$$

où l'on a posé

$$g(\bar{q}) = \int N(q, \bar{q}) f(q) dq \quad (104)$$

Cette dernière quantité se comporte comme une fonction d'onde dans l'espace des  $q$ . En effet si l'on convient que  $\tilde{\Psi}$  est normée, alors (103) montre que la fonction  $g(q)$  l'est également au sens habituel de l'intégrale du carré du module. On est donc en droit de l'interpréter comme une amplitude de probabilité dans l'espace des  $q$ . Pour cette raison, on appelle souvent cette fonction "la fonction d'onde collective" du noyau.

En ce qui concerne  $\langle \tilde{\Psi} | H | \tilde{\Psi} \rangle$ , il est commode d'introduire la quantité  $h(q, q')$  définie en (97), et d'exprimer son dénominateur à l'aide de (101). Ceci donne après avoir permuté les intégrales en  $\bar{q}$  et en  $q$  et  $q'$ :

$$\langle \tilde{\Psi} | H | \tilde{\Psi} \rangle = \int d\bar{q} \left[ \int dq \int dq' f^*(q) N(q, \bar{q}) h(q, q') N(q', \bar{q}) f(q') \right] \quad (105)$$

La méthode que l'on emploie ensuite est décrite en détail dans le livre de Ring et Schuck <sup>11)</sup>. Nous nous contentons ici de l'esquisser. Elle consiste tout d'abord à développer  $h(q, q')$  au second ordre autour de  $q = \bar{q}$  et  $q' = \bar{q}$ :

$$\begin{aligned} h(q, q') &= h_0(\bar{q}) + (q - \bar{q}) h_x(\bar{q}) + (q' - \bar{q}) h_y(\bar{q}) \\ &+ \frac{1}{2}(q - \bar{q})^2 h_{xx}(\bar{q}) + \frac{1}{2}(q' - \bar{q})^2 h_{yy}(\bar{q}) + (q - \bar{q})(q' - \bar{q}) h_{xy}(\bar{q}) \end{aligned} \quad (106)$$

où l'on a posé

$$h_0(\bar{q}) = h(\bar{q}, \bar{q}), \quad h_x(\bar{q}) = \frac{\partial h(q, q')}{\partial q} \Big|_{q=q'=\bar{q}}, \quad h_{xx}(\bar{q}) = \frac{\partial^2 h(q, q')}{\partial q^2} \Big|_{q=q'=\bar{q}} \quad (107)$$

et des relations analogues pour les autres coefficients  $h$ .

En introduisant ce développement dans (105), l'intégrand de l'intégrale sur  $q$ , par exemple, se ramène alors à un produit de  $N(q, \bar{q}) f(q)$  par des monômes du type  $(q - \bar{q})^n$ , avec  $n = 0, 1, 2$ . Or, étant donnée la forme gaussienne (102) de  $N(q, \bar{q})$  et l'expression (104) de  $g(q)$ , ces intégrales sont proportionnelles à  $g(q)$  et à ses dérivées première et seconde. Par exemple pour  $n = 1$ ,

$$\int dq (q - \bar{q}) N(q, \bar{q}) f(q) = \frac{1}{2G} \frac{\partial g(\bar{q})}{\partial \bar{q}} \quad (108)$$

et, pour  $n = 2$ ,

$$\int dq (q - \bar{q})^2 N(q, \bar{q}) f(q) = \frac{1}{2G} g(\bar{q}) + \frac{1}{(2G)^2} \frac{\partial^2 g(\bar{q})}{\partial \bar{q}^2} \quad (109)$$

L'expression (105) se réduit donc à une intégrale sur  $\bar{q}$  d'une somme de termes qui sont des produits de coefficients  $h_0, h_x, \dots$  par  $g$  et ses dérivées des deux premiers ordres. Le terme d'ordre zéro est simplement

$$\int d\bar{q} g^*(\bar{q}) h_0(\bar{q}) g(\bar{q}).$$

Les termes d'ordre un sont

$$\frac{1}{2G} \int d\bar{q} \frac{\partial g^*(\bar{q})}{\partial \bar{q}} h_x(\bar{q}) g(\bar{q}),$$

et un terme similaire avec  $h_y$  au lieu de  $h_x$  et la dérivée partielle appliquée à la fonction  $g(\bar{q})$  de droite. L'un des termes d'ordre deux est par exemple:

$$\int d\bar{q} \left[ \frac{1}{2G} g^*(\bar{q}) + \frac{1}{(2G)^2} \frac{\partial^2 g^*(\bar{q})}{\partial \bar{q}^2} \right] h_{xx}(\bar{q}) g(\bar{q}),$$

L'étape suivante est d'effectuer des intégrations par partie pour isoler un terme  $g^*(\bar{q})$  à gauche sous toutes les intégrales. On suppose dans cette opération que  $g(q)$  tend vers zéro aux limites du domaine de la variable  $q$ . Cette hypothèse revient à dire que les états Hartree-Fock-Bogolyubov de déformation très importante n'interviennent pas dans la description des états collectifs que l'on cherche. Il est clair que cette condition est vérifiée lorsque les états collectifs sont des états liés discrets du noyau. Nous supposons que nous sommes toujours dans ce cas.

Le résultat est que l'expression (105) se met finalement sous la forme:

$$\langle \tilde{\Psi} | H | \tilde{\Psi} \rangle = \int d\bar{q} g^*(\bar{q}) \left[ \mathcal{H}(\bar{q}, \frac{\partial}{\partial \bar{q}}) g(\bar{q}) \right] \quad (110)$$

où  $\mathcal{H}(\bar{q}, \frac{\partial}{\partial \bar{q}})$  est un opérateur différentiel qui s'écrit



$$\mathcal{H}(\bar{q}, \frac{\partial}{\partial \bar{q}}) = h_0(\bar{q}) - \epsilon_0(\bar{q}) - \frac{\partial}{\partial \bar{q}} \frac{1}{2\mathcal{M}(\bar{q})} \frac{\partial}{\partial \bar{q}} \quad (111)$$

avec les définitions suivantes:

$$\epsilon_q(q) = \frac{h_{xy}(q)}{2G} - \frac{1}{16G^2} \frac{\partial^2}{\partial q^2} (h_{xx} + h_{yy}) \quad (112)$$

$$\mathcal{M}(q) = \frac{4 \hbar^2 G^2}{2h_{xy}(q) - h_{xx}(q) - h_{yy}(q)} \quad (113)$$

On voit que  $\mathcal{H}$  a la forme d'un hamiltonien dans la variable  $q$ . Le terme potentiel est

$$\mathcal{V}(q) = E_{HFB}(q) - \epsilon_0(q) \quad (114)$$

où  $E_{HFB}(q) \equiv h_0(q)$  est la surface d'énergie potentielle du noyau. Le dernier terme peut être identifié à un opérateur énergie cinétique dans l'espace des  $q$ , l'inertie étant la quantité  $\mathcal{M}$ , une fonction de  $q$ . Cette interprétation de  $\mathcal{H}$  comme un hamiltonien est cohérente avec la forme de l'équation (110): l'énergie dans l'état  $\tilde{\Psi}$  est la valeur moyenne de  $\mathcal{H}$  calculée avec la fonction d'onde collective correspondante  $g(q)$ .

L'équation que l'on obtient en écrivant que l'énergie (93) est stationnaire vis-à-vis des variations de  $f(q)$  montre de façon encore plus évidente que  $\mathcal{H}$  se comporte comme un hamiltonien. En effet, si l'on suppose que la relation (104) donnant  $g$  en fonction de  $f$  est inversible, (93) est aussi stationnaire vis-à-vis des variations de  $g$ . L'équation cherchée peut donc être obtenue en égalant à zéro la dérivée de (93) par rapport à  $g^*(q)$ . En reprenant les expressions (96) et (110) ceci conduit à:

$$\mathcal{H}(q, \frac{\partial}{\partial q}) g(q) = E g(q) \quad (115)$$

Ainsi, la fonction d'onde collective  $g(q)$  est la solution d'une équation de Schrödinger ayant  $\mathcal{H}$  comme hamiltonien. Pour toutes ces raisons, on appelle  $\mathcal{H}$  le "hamiltonien collectif" du noyau.

L'équation (115) est beaucoup plus facile à résoudre que l'équation de Hill-Wheeler initiale. Par exemple, dans le cas d'une variable de déformation  $q$  monodimensionnelle, on peut facilement trouver les solutions de cette équation différentielle sur un ordinateur de bureau. C'est le grand avantage de la méthode approchée que nous venons de décrire. La résolution de l'équation fournit un ensemble de solutions  $(g_0(q), E_0), (g_1(q), E_1), (g_2(q), E_2), \dots$  qui décrivent respectivement l'état fondamental du noyau incluant les corrélations de longue portée, et les états excités de nature collective correspondant au mode  $q$  choisi. Pour définir complètement ces états, il faut inverser la relation (104), ce qui donne les  $f_0(q), f_1(q), f_2(q), \dots$  correspondants. Ce sont en effet les expressions des états sous la forme (92) qui interviennent lorsque l'on calcule des valeurs moyennes ou des éléments de matrice de transition.

Il est important de noter que, parmi l'ensemble des solutions de (115), seules celles d'énergie relativement basse ( $E < 10 \text{ MeV}$  environ) doivent être considérées comme valables en ce qui concerne la description des états collectifs du noyau. Ceci n'est pas lié à la méthode approchée développée ici, mais à la forme même de la fonction d'onde (92) adoptée pour ces états. En

effet, comme nous l'avons signalé dans le Chapitre V, à plus haute énergie, les modes collectifs sont susceptibles d'être couplés à d'autres types d'excitations du noyau. Il est alors nécessaire de prendre une fonction d'onde d'essai plus riche, par exemple une superposition d'états de Hartree-Fock-Bogolyubov incluant des excitations de quasi-particules.

Remarquons pour terminer ce paragraphe qu'une forme de recouvrement gaussienne est essentielle pour transformer l'équation intégrale de Hill-Wheeler en une équation différentielle. Ce sont en effet les propriétés (108) et (109) des fonctions gaussiennes  $N(q, \bar{q})$  qui permettent d'introduire des dérivées à partir d'un développement sur la non-localité de  $h(q, q')$ . En fait, les tentatives effectuées pour arriver au même résultat à partir de recouvrements quelconques doivent recourir à d'autres types d'approximations. Par exemple, il est nécessaire de supposer que le noyau  $N(q, \bar{q})$  - la "racine carrée du recouvrement" - est, comme  $h(q, q')$ , développable au second ordre sur la non-localité  $q - \bar{q}$ <sup>47)</sup>. Ces autres approximations sont généralement moins bien justifiées que l'approximation du recouvrement gaussien.

### 3. Le hamiltonien collectif

La méthode précédente fournit le moyen de déterminer un hamiltonien collectif  $\mathcal{H}$  qui apparaît automatiquement sous forme quantifiée. Ceci est évident sur la forme de l'énergie cinétique. La présence d'un terme additionnel  $\epsilon_0(q)$  dans le terme potentiel l'indique également.

Cette quantité, souvent appelée "énergie de point zéro", provient de l'existence d'une largeur dans le recouvrement des fonctions d'onde de Hartree-Fock-Bogolyubov. En effet, l'expression (112) montre que, à la limite d'un recouvrement de largeur nulle,  $\epsilon_0(q)$  s'annule. L'existence d'une largeur de recouvrement non nulle s'explique facilement si l'on se souvient que les fonctions d'onde de Hartree-Fock-Bogolyubov ne sont pas définies comme étant états propres des opérateurs  $\hat{Q}$  qui mesurent la déformation du noyau. La méthode de Hartree-Fock-Bogolyubov avec contraintes impose seulement la condition  $\langle \hat{Q} \rangle = q$ . Il en résulte que la fluctuation  $\langle \hat{Q}^2 \rangle - q^2$  a une valeur finie. Autrement dit, les états de Hartree-Fock-Bogolyubov comportent une "largeur" en déformation. L'énergie de point zéro  $\epsilon_0(q)$  est précisément la correction à apporter à l'énergie de ces états pour tenir compte de cette "largeur". Il s'agit donc bien d'une quantité d'origine spécifiquement quantique.

Notons que les approches phénoménologiques ou semi-classiques du mouvement collectif ne sont pas en mesure de tenir compte correctement de tels effets quantiques. Ces approches déterminent d'abord un hamiltonien collectif classique à partir de la surface d'énergie potentielle du noyau et d'une inertie collective. Ce hamiltonien classique doit ensuite être requantifié en remplaçant l'impulsion classique  $p$  (le moment conjugué de  $q$ ) par l'opérateur différentiel  $i\hbar\partial/\partial q$ . Ceci pose des problèmes car l'inertie étant une fonction de  $q$ , l'ordre des opérateurs dans l'énergie cinétique n'est pas défini de façon unique. Plusieurs choix sont possibles fournissant des hamiltoniens quantiques qui diffèrent par une fonction de  $q$  qui s'ajoute au terme potentiel. Le terme correctif au potentiel n'est donc pas univoquement déterminé. Par ailleurs, le modèle collectif initial étant classique, il n'est pas possible de justifier ce terme additionnel comme

provenant de fluctuations quantiques.

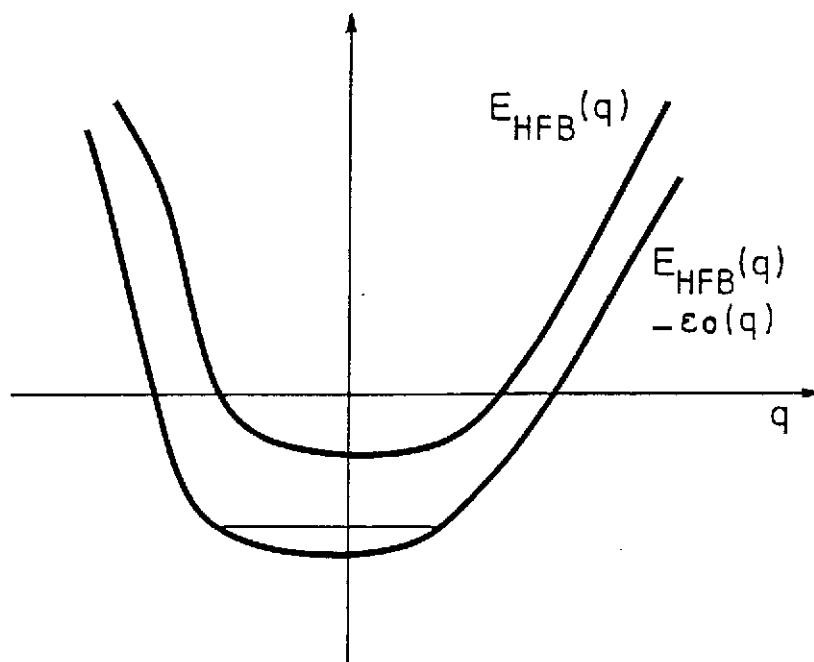


Figure 29: Représentation schématique d'une surface d'énergie potentielle et du potentiel collectif  $\mathcal{V}$  obtenu après correction de "l'énergie de point zéro"  $\epsilon_0$ .

Il est important de signaler que les énergies de point zéro ne sont pas des quantités négligeables. Elles valent souvent plusieurs MeV et, surtout, sont variables avec la déformation. Elles peuvent donc modifier notablement la forme des surfaces d'énergie potentielle. Dans tous les cas que l'on rencontre on trouve que  $\epsilon_0(q)$  est une quantité positive. Le potentiel (114) du hamiltonien collectif est donc plus négatif que l'énergie de déformation  $E_{HFB}(q)$  et le niveau fondamental du noyau se situe souvent en-dessous de la courbe de déformation du noyau. Cette situation est schématisée sur la Figure 29. Le potentiel collectif total  $\mathcal{V}$  fournit donc une indication plus précise que  $E_{HFB}(q)$  sur la position des niveaux collectifs. Pour cette raison, la plupart des surfaces d'énergie potentielle que nous donnons dans les Figures incluent l'énergie de point zéro  $\epsilon_0(q)$ .

Dans la pratique, l'énergie de point zéro  $\epsilon_0(q)$  et l'inertie collective  $\mathcal{M}(q)$  sont calculées directement à partir des états de quasi-particules fournis par la méthode de Hartree-Fock-Bogolyubov avec contraintes. Elles font intervenir les quantités  $h_{xx}(q)$ ,  $h_{xy}(q)$  et  $h_{yy}(q)$  qui sont des dérivées de  $h(q, q')$  prises à  $q = q'$ . Celles-ci s'expriment en fonction des éléments de matrice de  $H$  entre des états qui sont soit la fonction d'onde de Hartree-Fock-Bogolyubov  $\Psi(q)$  soit ses dérivées première et seconde par rapport à  $q$ . On montre que ces dérivées de  $\Psi(q)$  sont des superpositions d'états à deux et quatre quasi-particules. Par exemple:

$$\left| \frac{\partial \Psi(q)}{\partial q} \right\rangle = \sum_{\alpha\beta} C_{\alpha\beta} \eta_{\alpha}^{\dagger} \eta_{\beta}^{\dagger} |\Psi(q)\rangle \quad (116)$$



où les  $\eta_{\alpha}^{+}$  sont les opérateurs de quasi-particules définis à la déformation  $q$ , et les  $C_{\alpha\beta}$  des coefficients que l'on sait calculer moyennant une approximation souvent dénommée (par analogie avec une technique du même type employée dans le calcul du moment d'inertie d'un noyau) "approximation du cranking". Elle revient à négliger dans l'expression de  $H$  l'interaction résiduelle entre les quasi-particules.

En ce qui concerne la largeur de recouvrement  $G$ , la façon la plus correcte de la déterminer consiste à calculer les recouvrements  $I(q, q')$ , puis à ajuster une gaussienne du type (95) pour chaque valeur de  $(q+q')/2$ . Ceci permet d'apprécier en particulier la validité de l'approximation du recouvrement gaussien et la constance de la largeur. Une méthode approchée peut être également employée, fondée sur une expression de  $G$  en fonction du recouvrement d'états du type (116) (il suffit de dériver (95) par rapport à  $q$  et  $q'$ , puis de poser  $q = q'$  pour l'obtenir).  $G$  s'exprime alors en fonction des  $C_{\alpha\beta}$  apparaissant dans (116). Ces deux techniques de calcul donnent des résultats assez proches. Elles fournissent en fait un coefficient  $G$  qui dépend de  $q$  et que l'on peut introduire, avec sa dépendance en  $q$ , dans les expressions de l'inertie et de l'énergie de point zéro. Ceci permet de tenir compte de certains des effets liés à la non-constance de  $G$ .

Ainsi les ingrédients du hamiltonien collectif sont tous évaluables à partir des résultats du calcul de Hartree-Fock-Bogolyubov avec contraintes, c'est-à-dire en fin de compte à partir de la seule interaction effective entre les nucléons. La méthode développée dans ce Chapitre est donc entièrement microscopique. Comme nous l'avons souligné, elle est également complètement quantique. Il est clair que ces caractéristiques ne sont pas sans intérêt lorsqu'il s'agit de décrire des situations nucléaires exotiques (noyaux exotiques, très grandes déformations, ...). Par ailleurs, ainsi que de nombreux exemples le montrent, ce type d'approche est capable de fournir des résultats en accord quantitatif remarquable avec les résultats expérimentaux.

#### 4. Description des modes de rotation-vibration

Les expressions données jusqu'ici ont été écrites dans le cas d'une variable de déformation monodimensionnelle. En fait, dans la plupart des noyaux, la description des états collectifs exige de prendre en compte simultanément plusieurs modes de déformation. Il est rare en effet qu'un noyau soit mou vis-à-vis d'un seul type de déformation. Par ailleurs, lorsque plusieurs modes doivent être inclus, il n'est pas indiqué de les traiter séparément car ils sont en général couplés entre eux. Le couplage provient d'une part du potentiel collectif  $\mathcal{V}(q_1, q_2, \dots)$  qui est rarement une somme de potentiels  $\mathcal{V}_i(q_i)$ , d'autre part de l'inertie qui, à plusieurs dimensions, est une matrice non diagonale. Plus précisément, la dérivation du paragraphe 2 étendue au cas multidimensionnel montre que le hamiltonien collectif se met sous la forme générale:

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_{ij} \frac{\partial}{\partial q_i} (\mathcal{M}^{-1})_{ij} \frac{\partial}{\partial q_j} + \mathcal{V}(q_1, q_2, \dots) \quad (117)$$

où  $\mathcal{M}$  est une matrice symétrique qui contient les inerties collectives et  $\mathcal{M}^{-1}$  son inverse. La matrice  $\mathcal{M}$  n'est pas diagonale en général, ce qui introduit un couplage entre les différents

modes  $q_i$ . Le terme potentiel est

$$V(q_1, q_2, \dots) = E_{HFB}(q_1, q_2, \dots) - \epsilon_0(q_1, q_2, \dots)$$

c'est-à-dire la surface d'énergie potentielle corrigée des énergies de point zéro relatives à toutes les variables  $q_i$ .

Les modes collectifs que l'on envisage habituellement ont déjà été mentionnés dans le paragraphe 5 du Chapitre V. Les plus fréquemment étudiés sont ceux générés par les déformations quadrupolaires axiales et triaxiales, c'est-à-dire les modes de déformation  $\beta$  et  $\gamma$  du noyau (cf. éq.(13) du Chapitre V). En effet, ces modes sont responsables de la plupart des états collectifs de basse énergie ayant une parité positive. Les modes de déformation octupolaires sont souvent examinés dans les noyaux lourds, avec ou sans leur couplage aux déformations quadrupolaires axiales. Ils fournissent des états du noyau de parité négative. Il est plus rare d'avoir à considérer les déformations hexadécapolaires ou modes de striction. Ceux-ci jouent cependant un rôle très important dans le processus de fission et aussi du phénomène inverse, la fusion de deux noyaux dans les collisions à très basse énergie. Ce dernier type de mode collectif est fortement couplé aux modes quadrupolaires.

Les modes collectifs précédents correspondent à des vibrations du noyau autour d'une forme sphérique ou déformée. Dans le cas d'un noyau déformé, il existe une autre catégorie de mode collectif particulièrement importante: les rotations collectives. Elles sont générées par un type de "déformation" nucléaire très particulière, celle qui consiste à réorienter le noyau dans l'espace. La surface d'énergie potentielle correspondante est évidemment rigoureusement "plate" puisque un état déformé du noyau a la même énergie que tous ceux obtenus en lui appliquant une rotation autour d'un axe quelconque. En reprenant les arguments développés dans le Chapitre V, il est clair que ces différents états sont susceptibles d'être fortement couplés par l'interaction résiduelle. Pour tenir compte des corrélations qui peuvent en résulter, il est alors nécessaire, comme nous l'avons vu, d'adopter une forme de fonction d'onde nucléaire qui inclut une superposition de tous les états "tournés". Autrement dit, on est conduit à une fonction d'onde du type de la Coordonnée Génératrice où les variables d'intégrations sont les angles d'Euler qui définissent l'orientation du noyau dans l'espace, c'est-à-dire :

$$|\tilde{\Psi}\rangle = \int \int \int d\Omega f(\Omega) \hat{R}(\Omega) |\Psi_{HFB}\rangle \quad (118)$$

où  $|\Psi_{HFB}\rangle$  est une fonction d'onde de Hartree-Fock-Bogolyubov correspondant à un état déformé quelconque. La variable  $\Omega$  représente les trois angles d'Euler  $(\psi, \theta, \varphi)$  où  $\psi$  et  $\varphi$  varient entre 0 et  $2\pi$  et  $\theta$  entre 0 et  $\pi$ . La mesure d'intégration est  $d\Omega = \sin\theta d\psi d\theta d\varphi$ .  $\hat{R}(\Omega)$  est l'opérateur de rotation

$$\hat{R}(\Omega) = e^{-i\psi J_x} e^{-i\theta J_y} e^{-i\varphi J_x}$$

qui génère les fonctions d'onde de Hartree-Fock-Bogolyubov tournées.

Dans les cas tels que celui de la fonction d'onde (118), où les états qui sont mélangés sont obtenus en appliquant un opérateur qui correspond à une invariance du système (ici l'invariance

par rotation), on détermine la fonction poids  $f$  de telle façon que  $|\tilde{\Psi}\rangle$  ait les bonnes symétries vis-à-vis de l'invariance en question. La méthode de la Coordonnée Génératrice sert alors à restaurer les symétries du système (cf. le Cours de P.H.Heenen pour plus de détail sur les restaurations de symétries). En ce qui concerne (118), on prend ainsi pour  $f(\Omega)$  une forme telle que  $|\tilde{\Psi}\rangle$  soit un état propre  $|\tilde{\Psi}^{IM}\rangle$  de  $\hat{J}^2$  et de  $\hat{J}_z$  avec les valeurs propres  $I(I+1)$  et  $M$ . En faisant apparaître les nombres quantiques conservés, l'expression (118) devient

$$|\tilde{\Psi}^{IM}\rangle = \int \int \int d\Omega f^{IM}(\Omega) \hat{R}(\Omega) |\Psi_{HFB}\rangle \quad (119)$$

On montre que la fonction  $f^{IM}(\Omega)$  doit alors être une combinaison linéaire des matrices de rotation:

$$D_{MK}^I(\Omega) = \langle I M | \hat{R}(\Omega) | I K \rangle$$

La forme générale de  $f^{IM}$  est:

$$f^{IM}(\Omega) = \sum_K A^{IK} D_{MK}^{I*}(\Omega)$$

Lorsque  $|\Psi_{HFB}\rangle$  a des symétries qui sont des rotations particulières,  $f^{IM}$  doit être modifiée <sup>48)</sup>. Par exemple, en symétrie axiale:

$$f^{IM}(\Omega) = D_{M0}^{I*}(\Omega) \quad (120)$$

et en symétrie triaxiale:

$$f^{IM}(\Omega) = \sum_K A^{IK} \left( D_{MK}^{I*}(\Omega) + (-)^{I-K} D_{M-K}^{I*}(\Omega) \right) \quad (121)$$

La fonction  $f^{IM}$  est donc complètement déterminée en symétrie axiale. En symétrie triaxiale, elle contient les paramètres inconnus  $A^{IK}$ . On peut les déterminer à l'aide d'un principe variationnel appliqué à la valeur moyenne du hamiltonien effectif microscopique  $H$ .

Dans le cas où l'état nucléaire  $|\Psi_{HFB}\rangle$  est très déformé et rigide par rapport aux modes de déformation, il est possible de remplacer la fonction d'onde (119) par une forme produit:

$$|\tilde{\Psi}^{IM}\rangle \simeq f^{IM}(\Omega) |\Psi_{HFB}\rangle \quad (122)$$

C'est l'approximation du modèle du rotor de Bohr et Mottelson <sup>48)</sup>. Il suppose que les rotations se découplent complètement des autres modes d'excitations (collectifs ou intrinsèques). En symétrie axiale, les énergies des états  $|\tilde{\Psi}^{IM}\rangle$  constituent alors la bande de rotation

$$E^I = E^0 + \frac{\hbar^2 I(I+1)}{2\mathcal{I}}$$

où  $\mathcal{I}$  est le moment d'inertie du noyau dans l'état  $|\Psi_{HFB}\rangle$ , par rapport à un axe perpendiculaire à l'axe de symétrie. L'expression (122) s'étend aux états nucléaires plus généraux que  $|\Psi_{HFB}\rangle$ , par exemple aux états bien déformés que l'on obtient avec la méthode de la Coordonnée Génératrice appliquée aux déformations quadrupolaires et octupolaires axiales.

Lorsque l'état nucléaire  $|\Psi_{HFB}\rangle$  n'est pas très déformé, ou s'il n'est pas rigide vis-à-vis des déformations, alors le mode de rotation est couplé aux modes de vibrations. Ceci se comprend car la rotation du noyau génère une force de Coriolis qui déforme le noyau s'il est mou. Dans le cas où le noyau n'est pas très déformé, rotations et vibrations sont toujours couplées car les axes principaux que l'on doit introduire pour définir l'orientation du noyau dans l'espace ne sont pas déterminés avec précision: les relations d'incertitude quantiques font que leur propre orientation par rapport au noyau fluctue. De ce fait, il n'est pas possible de réaliser une séparation claire entre modes de rotation purs et modes de vibration. Dans ces deux situations, il est alors nécessaire d'adopter une forme de fonction d'onde nucléaire qui est une superposition d'états de Hartree-Fock-Bogolyubov à la fois "tournés" et ayant des déformations différentes. Lorsque les déformations sont quadrupolaires triaxiales (modes  $\beta$  et  $\gamma$ ), ceci conduit à un état  $|\tilde{\Psi}^{IM}\rangle$  qui généralise (119) en incluant, en plus de la partie rotationnelle contenue dans (121), une intégrale sur les variables  $\beta$  et  $\gamma$ :

$$|\tilde{\Psi}^{IM}\rangle = \sum_K \int d\beta \int d\gamma A^{IK}(\beta, \gamma) \int d\Omega \left( D_{MK}^{I*}(\Omega) + (-)^{I-K} D_{M-K}^{I*}(\Omega) \right) \hat{R}(\Omega) |\Psi_{HFB}(\beta, \gamma)\rangle \quad (123)$$

Cette forme peut être retrouvée en partant d'une fonction d'onde de la Coordonnée Génératrice relative aux cinq modes quadrupolaires  $q_{2\mu}$  définis par rapport aux axes principaux du noyau, et en faisant le changement de variables (cf éq.(14) du Chapitre V):

$$(q_{20}, q_{22}) \longrightarrow (\beta, \gamma)$$

$$(q_{21}, q_{2-1}, q_{2-2}) \longrightarrow (\psi, \theta, \varphi)$$

Lorsque l'on applique la réduction des équations de la Coordonnée Génératrice du paragraphe 2 (ou plutôt sa généralisation multidimensionnelle) à ces cinq modes quadrupolaires et que l'on réalise le changement de variables ci-dessus le hamiltonien collectif  $\mathcal{H}$  (117) s'écrit:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \sum_{k=1}^3 \frac{\hbar^2 \hat{J}_k^2}{2\mathcal{I}_k(\beta, \gamma)} \\ & - \frac{\hbar^2}{2} \sum_{ij=1}^2 \frac{\partial}{\partial \beta_i} \left( \mathcal{M}^{-1} \right)_{ij} \frac{\partial}{\partial \beta_j} + E_{HFB}(\beta, \gamma) - \epsilon_0(\beta, \gamma) \end{aligned} \quad (124)$$

Le premier terme est la partie rotationnelle du hamiltonien, et les autres termes décrivent les vibrations  $\beta$  et  $\gamma$  (on a posé  $\beta_1 = \beta$  et  $\beta_2 = \gamma$ ). Le couplage entre les rotations et les vibrations se manifeste dans la dépendance en  $\beta$  et  $\gamma$  des moments d'inertie  $\mathcal{I}_k(\beta, \gamma)$  par rapport aux trois axes principaux du noyau.

Dans chaque sous-espace  $IM$ , ce hamiltonien est un opérateur  $\mathcal{H}^I$  différentiel dans les variables  $\beta$  et  $\gamma$  et matriciel dans la variable  $K$ . Sa diagonalisation fournit des fonctions  $\bar{A}_n^{IK}(\beta, \gamma)$  et des énergies  $E_n^I$  correspondant aux modes collectifs de rotation-vibration. Les  $\bar{A}_n^{IK}(\beta, \gamma)$  sont reliés aux  $A^{IK}(\beta, \gamma)$  de l'équation (123) par une transformation gaussienne dans

les variables  $q_{20}$  et  $q_{22}$  que l'on peut exprimer en fonction des variables  $\beta$  et  $\gamma$ . Autrement dit, les  $A$  et les  $\bar{A}$  sont l'équivalent des fonctions  $f$  et  $g$  introduites au paragraphe 2.

La recherche des états propres et des valeurs propres du hamiltonien (124) est un problème complexe (mais cependant abordable, contrairement à un calcul de Coordonnée Génératrice à cinq dimensions ...). Les méthodes employées pour le résoudre consistent soit à approximer les dérivées par des différences finies sur un maillage en  $\beta$  et  $\gamma$  (méthode de K.Kumar <sup>49</sup>), soit à développer les  $\bar{A}_n^{IK}(\beta, \gamma)$  sur des bases de fonctions judicieusement choisies (méthode de J.Libert <sup>50</sup>). Cette dernière méthode est actuellement la plus performante car elle permet de décrire des modes collectifs incluant des déformations  $\beta$  très différentes avec une excellente précision. Dans les deux cas, l'analyse des composantes en  $K$  des solutions permet d'organiser les états collectifs trouvés en "bandes". Parmi elles, la "bande du fondamental" est une séquence de spins pairs  $0^+, 2^+, 4^+, \dots$  avec  $K \simeq 0$ . Elle correspond simplement aux différents états de rotation du noyau, celui-ci étant dans son état intrinsèque de plus basse énergie. Les "bandes  $\beta$ " sont également des séquences de spins pairs avec  $K \simeq 0$ . Elles s'interprètent comme les différents états de rotation du noyau, celui-ci étant dans un état de vibration de type  $\beta$ . Les "bandes  $\gamma$ " sont des états de spins pairs ou impairs avec  $K \simeq 2$ . Ce sont les états de rotation du noyau, celui-ci étant en train de vibrer dans un mode de type  $\gamma$ .

Une fois obtenus les  $\bar{A}_n^{IK}(\beta, \gamma)$ , il est possible de calculer les caractéristiques des états excités (déformation moyenne en particulier) et les probabilités de transition entre états excités et état fondamental, ou bien entre deux états excités, pour l'émission de rayonnement  $\gamma$  ou pour d'autres types de désexcitations. Par exemple pour les transitions électromagnétiques électriques de multipolarité  $\lambda$ , les éléments de matrice à calculer sont du type:

$$\langle \tilde{\Psi}_{n'}^{I'M'} | \hat{Q}_\lambda | \tilde{\Psi}_n^{IM} \rangle \quad (125)$$

où

$$\hat{Q}_\lambda = \sum_{i=1}^Z e(r_i)^\lambda Y_\lambda^0(\hat{r}_i)$$

est l'opérateur de transition quadrupolaire électrique. Il est habituel d'exprimer cet élément de matrice en fonction des densités de transition définies par:

$$\rho_\lambda^{nI \rightarrow n'I'}(r) = r^\lambda \int d^2\hat{r} Y_\lambda^0(\hat{r}) \langle \tilde{\Psi}_{n'}^{I'M'} | \sum_{i=1}^Z \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) | \tilde{\Psi}_n^{IM} \rangle \quad (126)$$

Ces quantités ont une interprétation physique simple: elles mesurent le nombre de nucléons qui participent à la transition en fonction de leur distance au centre du noyau. Leur calcul numérique exige en principe d'évaluer une intégrale multiple d'ordre 7. Dans la pratique, des approximations sont faites sur les noyaux des intégrales angulaires afin de réduire cet ordre de 3 unités. Malgré cela, l'effort numérique à réaliser reste considérable !

Une fois obtenues ces densités de transition, l'élément de matrice (125) s'obtient à l'aide d'une intégrale unique:

$$\int_0^\infty r^2 dr \rho_\lambda^{nI \rightarrow n'I'}(r)$$

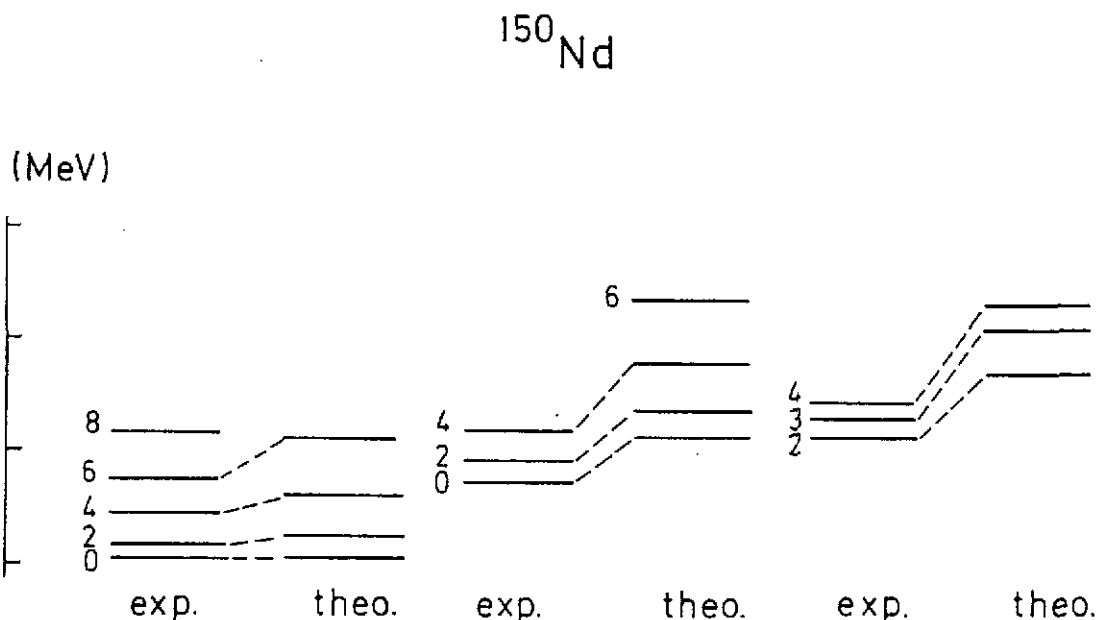


Figure 30: Niveaux collectifs de basse énergie dans le  $^{150}\text{Nd}$ . Les résultats expérimentaux sont ceux de la Réf. <sup>51</sup>). Les niveaux théoriques ont été calculés avec un hamiltonien collectif à cinq dimensions. La bande la plus à droite est une bande  $\gamma$ . Les graduations de l'échelle verticale sont séparées de 1 MeV.

On en déduit ensuite facilement les probabilités de transition réduites  $B^{nI \rightarrow n'I'}(E\lambda)$  en prenant le carré de (125) et en sommant sur les  $M'$ . Ces quantités sont directement comparables à l'expérience.

A titre d'exemple nous décrivons les résultats obtenus en appliquant le formalisme précédent au  $^{150}\text{Nd}$ . La surface d'énergie potentielle de ce noyau calculée dans les variables  $\beta$  et  $\gamma$  a déjà été présentée (Chapitre V, paragraphe 5, Figure 16). La Figure 30 donne le spectre collectif obtenu à très basse énergie en diagonalisant le hamiltonien collectif à cinq dimensions avec la méthode de K.Kumar <sup>49</sup>). Les résultats expérimentaux sont ceux d'une expérience récente de diffusion d'électrons <sup>51</sup>). Les niveaux ont été séparés en trois bandes. Celle de gauche est la bande de l'état fondamental. Celle du milieu est une bande  $\beta$  construite sur le premier état  $0^+$  excité. Celle de droite est une bande  $\gamma$ . La comparaison entre expérience et théorie montre que le spectre théorique est un peu trop dilaté. Ceci semble provenir des approximations introduites dans le calcul des inerties collectives et moments d'inertie. Remarquons cependant que tous ces niveaux sont contenus dans un intervalle en énergie de 2.5 MeV et que la seule donnée dans le calcul théorique est l'interaction nucléaire effective (celle de Gogny en l'occurrence).

Sur la Figure 31 sont représentées les densités de transition entre l'état fondamental et quelques uns des niveaux représentés sur la Figure 30. Les trois diagrammes de gauche décrivent les transitions vers les trois premiers états excités de la bande de l'état fondamental (bande de gauche sur la Figure 30). Les deux diagrammes de droite sont les transitions vers les deux premiers états de la bande  $\gamma$  (bande de droite sur la Figure 30). Les résultats expérimentaux

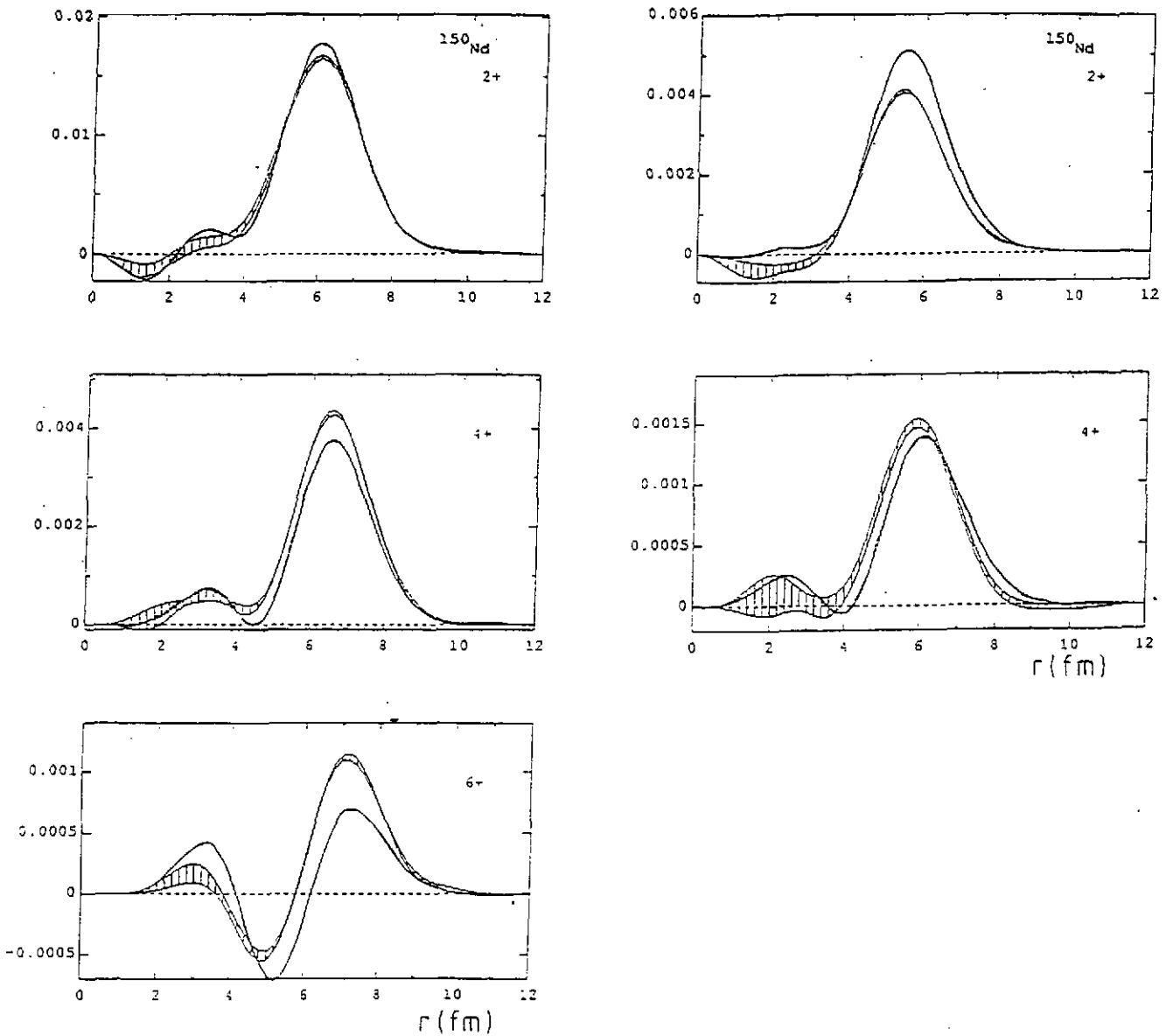


Figure 31: Densités de transition entre l'état fondamental et les premiers niveaux, d'une part de la bande du fondamental (à gauche), d'autre part de la bande  $\gamma$  (à droite) dans le  $^{150}\text{Nd}$ . Ces niveaux sont représentés sur la Figure 30. Les zones hachurées sont déduites de l'expérience <sup>51)</sup>. Les lignes continues sont obtenues à partir des fonctions d'onde collectives calculées avec un hamiltonien collectif à cinq dimensions.

de la Réf. <sup>51)</sup> correspondent aux zones hachurées. On voit que l'allure des courbes est très bien reproduite par le calcul théorique, ceci même dans le cas de la bande  $\gamma$ , généralement considérée comme beaucoup plus difficile à reproduire. Ceci montre que les  $A_n^{IK}(\beta, \gamma)$  solutions du hamiltonien collectif sont certainement très réalistes.

Le type d'accord entre expérience et théorie que montre cet exemple du  $^{150}\text{Nd}$  est représentatif des résultats que l'on obtient dans la plupart des noyaux: le spectre des états collectifs est généralement un peu trop dilaté, mais les densités de transition et les quantités qui s'en déduisent (probabilités de transition et  $B(E\lambda)$ ) sont en excellent accord avec les résultats ex-

périmentaux. Il est intéressant de constater que la situation est inverse dans les méthodes phénoménologiques: en ajustant des paramètres, elles reproduisent bien les spectre nucléaires, mais, ne disposant pas de fonctions d'onde adéquates, elle rencontrent des difficultés lorsqu'il s'agit de décrire des éléments de matrice de transition.

### 5. Isomères et bandes super-déformées dans les isotopes du Mercure

La Figure 32 montre les surfaces d'énergie potentielle en  $\beta$  et  $\gamma$  des trois isotopes  $^{190}\text{Hg}$ ,  $^{192}\text{Hg}$ ,  $^{194}\text{Hg}$  du Mercure. L'une de ces surfaces a déjà été représentée sur la Figure 16. Ces trois noyaux ont la particularité de posséder un puits secondaire bien développé aux environs de ( $\beta = .55$ ,  $\gamma = 0 \text{ deg}$ ), ce qui correspond à une déformation quadrupolaire axiale  $q_{20} \simeq 45 \text{ barns}$ . D'une part, ces puits secondaires sont relativement profonds (3 à 5 MeV), d'autre part, leur énergie au-dessus du fond du puits principal est inférieure à l'énergie de séparation d'un neutron. On s'attend donc à ce qu'il puissent "héberger" un état isomérique de forme du type de ceux que l'on rencontre dans les actinides (cf. le cours de D.Paya sur les isomères de fission). De plus, la barrière de fission étant beaucoup plus haute dans les Mercure que dans les actinides, des états isomériques de ce type ne peuvent décroître que par désexcitation  $\gamma$  vers les états de déformation "normale". Ainsi, il semble que ces états isomériques de forme doivent avoir une durée de vie assez longue. D'où leur intérêt, aussi bien en ce qui concerne la possibilité d'étudier par des moyens expérimentaux la physique d'états très déformés, que les applications technologiques potentielles (cf. à ce propos le Cours de D.Gogny). Mentionnons que l'existence de puits secondaires du type précité n'est pas un phénomène rare. Des recherches systématiques réalisées à Bruyères-le-Châtel et ailleurs ont trouvé de l'ordre de 70 noyaux possédant cette propriété dans la région  $64 < A < 208$  <sup>45,52</sup>.

Il se trouve que les mesures de spectre  $\gamma$  de très haute résolution réalisées dans les isotopes du Mercure (et beaucoup d'autres noyaux, voir à cet égard les Cours de B. Haas et de R.Jansen) n'ont pas mis en évidence jusqu'ici l'existence d'isomères de forme. Une expérience spécifiquement dédiée à cette recherche est en cours de montage à Saclay <sup>53</sup>). En fait, les mesures ont permis de trouver des bandes d'états qui peuvent être interprétées comme les niveaux de rotation d'états nucléaires ayant une déformation très importante (un rapport des axes principaux de l'ordre de 2 à 1). Ce sont les bandes super-déformées.

De nombreux travaux théoriques ont été entrepris pour décrire ces bandes super-déformées, et comprendre leur modes d'alimentation et de décroissance. Dans ce qui suit nous présentons les études réalisées récemment dans ce domaine avec le hamiltonien collectif à cinq dimensions du paragraphe 4 et l'interaction de Gogny. La méthode de diagonalisation de ce hamiltonien est celle de J.Libert <sup>50</sup>). Plus de détails sont donnés dans la Ref <sup>54</sup>).

La résolution du hamiltonien à cinq dimensions pour les états  $0^+$  des trois noyaux permet d'obtenir les états représentés par des barres horizontales dans les rectangles de la Figure 32. Les états représentés sont l'état fondamental de chaque noyau ainsi que l'état localisé dans le puits isomérique. Les énergies d'excitation des trois états isomériques sont respectivement



4.4, 5.4 et 6.9 MeV pour le  $^{190}\text{Hg}$ , le  $^{192}\text{Hg}$  et le  $^{194}\text{Hg}$ . Dans chaque noyau, les états isomériques sont le huitième état  $0^+$ . Les états de même spin situés en-dessous ont tous des fonctions d'onde collectives situées à déformation normale.

La Figure 33 représente le carré de la fonction d'onde collective  $\bar{A}_n^{00}(\beta, \gamma)$  pour l'état fondamental ( $n = 0$ ) et l'état isomérique ( $n = 8$ ) de chacun des noyaux. On constate sur cette figure que les deux types d'états sont fortement piqués dans leurs puits respectifs (les pics sont légèrement écartés de l'axe  $\gamma = 0 \text{ deg}$  car, pour des raisons de symétries, les  $\bar{A}$  contiennent une métrique proportionnelle à  $\sin 3\gamma$ ). Le fait que les pics ont un recouvrement très faible autorise à penser que les états isomériques prédits par le calcul ont un temps de vie relativement long. Quand on regarde de près les résultats, on s'aperçoit que le  $^{190}\text{Hg}$ , celui des trois noyaux ayant l'état isomérique le plus bas en énergie, est aussi celui pour lequel la composante de la fonction d'onde collective de l'isomère dans le premier puits est la plus forte. Le  $^{194}\text{Hg}$  est le noyau où la fonction d'onde de l'isomère est la mieux localisée dans la région super-déformée. En revanche, l'énergie de l'état isomérique est relativement élevée. Pour ces raisons, il semble que ce soit le  $^{192}\text{Hg}$  qui réalise le meilleur compromis en faveur d'un état à durée de vie relativement longue: la fonction d'onde de l'isomère est bien localisée, et son énergie d'excitation n'est pas trop élevée (5.4 MeV).

Pour cette raison, le calcul des états collectifs de spin  $I > 0$  ont été réalisés en priorité pour le  $^{192}\text{Hg}$ . Une (petite) partie des niveaux obtenus sont représentés sur la Figure 34. Les trois séries de niveaux de gauche sont les bandes collectives à déformation normale. De gauche à droite ce

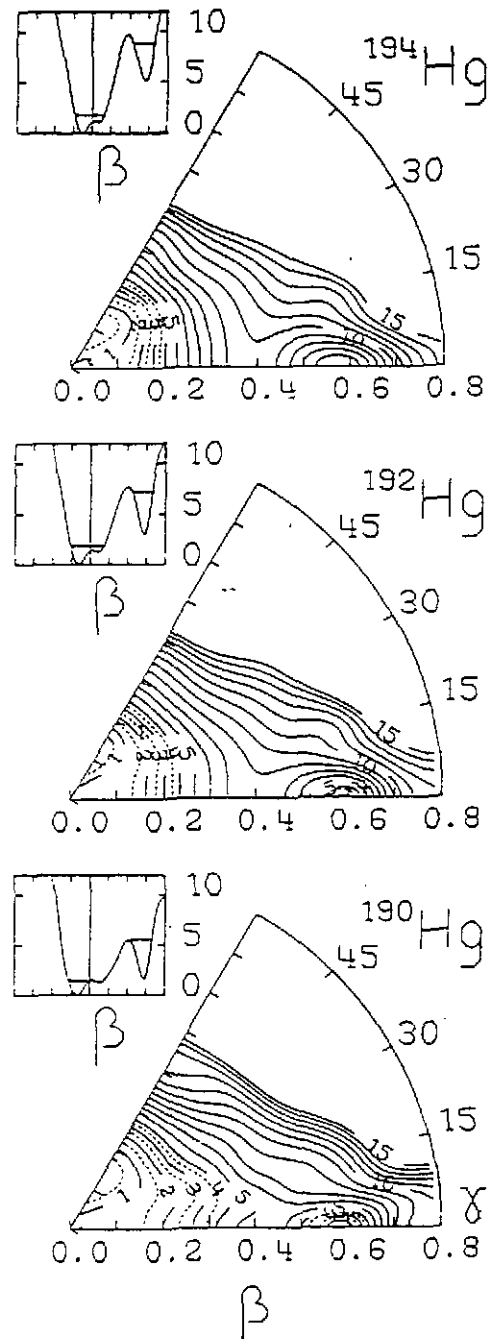


Figure 32: Surfaces d'énergie potentielle  $(\beta, \gamma)$  des  $^{190}\text{Hg}$ ,  $^{192}\text{Hg}$  et du  $^{194}\text{Hg}$ . Les rectangles donnent la surface d'énergie potentielle le long des lignes axiales  $\gamma = 0 \text{ deg}$  et  $\gamma = 60 \text{ deg}$ . Ces trois noyaux possèdent un puits isomérique aux environs de  $\beta = .55$ .

sont: la bande du fondamental, une bande  $\gamma$  et la première bande  $\beta$ . Leur comparaison avec les niveaux expérimentaux (non dessinés sur la Figure) montre que le spectre théorique est légèrement dilaté, comme dans le  $^{150}\text{Nd}$ . En revanche les probabilités de transition réduites que l'on tire des fonctions d'onde collectives se comparent très bien avec l'expérience.

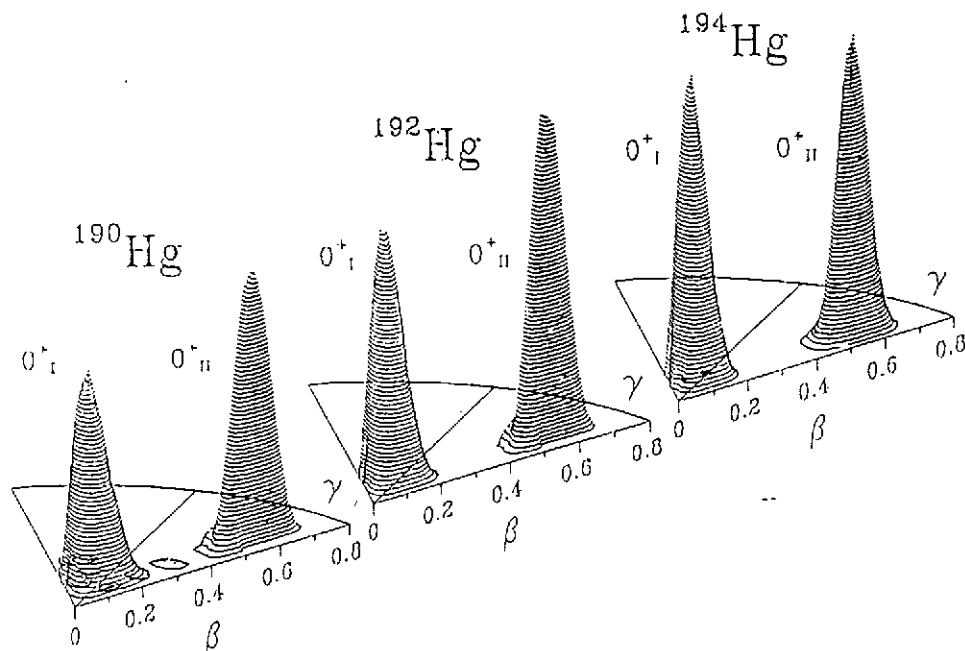


Figure 33: Carré de l'amplitude des fonctions d'onde collectives en  $\beta$  et  $\gamma$  de l'état fondamental et de l'état isomérique dans les trois isotopes du Mercure dont les surfaces d'énergie potentielle sont représentées sur la Fig.32.

Les trois bandes de droite de la Figure 34 sont des bandes super-déformées, en ce sens que les fonctions d'onde collectives des niveaux représentés sont localisées au moins à 90 % dans le puits isomérique. Ainsi, le calcul avec le hamiltonien à cinq dimensions prédit trois bandes super-déformées dans le  $^{192}\text{Hg}$ . Il est intéressant de noter que les expériences n'ont mis en évidence qu'une seule bande super-déformée dans ce noyau, alors que trois bandes de ce type ont été trouvées par exemple dans le  $^{194}\text{Hg}$  <sup>55</sup>).

L'état le plus bas de la bande super-déformée la plus à gauche sur la Figure 34 (la quatrième bande en partant de la gauche) a un spin 0. C'est l'état isomérique dont la fonction d'onde est représentée sur la Figure 33. Les états situés au-dessus sont simplement les états de rotation de cet état isomérique. Le spin le plus bas des deux autres bandes super-déformées n'est pas nul. Ceci montre que ces deux bandes ne deviennent super-déformées qu'à partir d'un certain spin, c'est-à-dire à partir d'une certaine vitesse de rotation. Pour des spins plus bas, les états de ces bandes contiennent une composante à déformation normale trop importante pour être qualifiés de super-déformés. La seconde bande super-déformée, celle commençant avec un état  $8^+$ , peut être interprétée comme une bande  $\beta$ , alors que la troisième est plutôt une bande  $\gamma$ . Ce

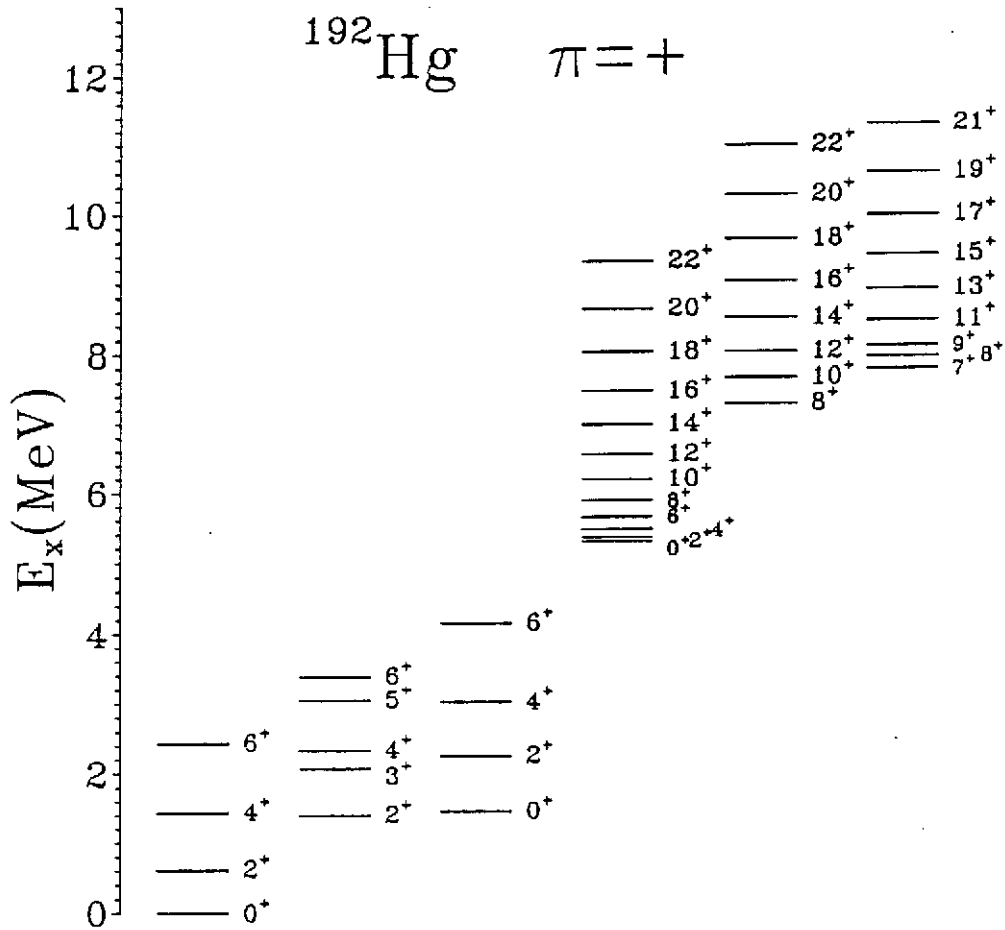


Figure 34: Spectre collectif obtenu dans le  $^{192}\text{Hg}$  avec un hamiltonien à cinq dimensions. Les trois bandes de gauche sont à déformation "normale". Les trois bandes de droites sont super-déformées.

sont donc des états de rotation construits sur des vibrations collectives de la forme isomérique. Cette interprétation est loin d'être conventionnelle: les bandes additionnelles trouvées dans les noyaux voisins sont décrites dans les approches phénoménologiques comme des états de rotation construits sur des excitations de quasi-particules de l'isomère, c'est-à-dire non collectives. Les résultats trouvés dans le présent contexte jettent donc un doute sur la vision proposée par les modèles phénoménologiques.

Pour terminer cette brève description de ce que peut réaliser une approche complètement microscopique dans le domaine des super-déformations, mentionnons que le calcul des  $B(E2)$  correspondant aux transitions électromagnétiques intra- ou inter- bandes dans la région super-déformée donne des valeurs en excellent accord avec les mesures. Une fois de plus, il semble bien que le calcul microscopique fournit des fonctions d'onde collectives qui décrivent convenablement la réalité physique.

## VIII. CONCLUSIONS

Les pages qui précèdent ont été consacrées aux principaux aspects de l'approche complètement microscopique de la structure nucléaire fondée sur la théorie du champ moyen. Nous avons tenté de montrer comment, en partant de la seule donnée de l'interaction entre les nucléons, il est possible de parvenir à une description quantitative à peu près complète du noyau, en définissant un cadre théorique unique qui couvre pratiquement l'ensemble des domaines traditionnellement abordés avec des méthodes phénoménologiques. Après s'être donné le hamiltonien effectif des  $A$  nucléons en interaction, la méthode de base consiste à choisir une forme de fonction d'onde nucléaire, puis à appliquer un principe variationnel afin de déterminer les états du noyau.

Cette façon de procéder, où les hypothèses initiales concernent seulement l'interaction nucléaire et la nature de la fonction d'onde du noyau présente de grands avantages lorsqu'il s'agit d'étendre la description théorique loin du domaine connu. A cet égard, il est certain que les approches microscopiques du noyau sont particulièrement bien armées pour aborder la physique nucléaire du futur qui, semble-t-il, s'oriente délibérément vers l'exploration des systèmes loin de la stabilité ou dans des états très éloignés de l'état fondamental. La seule application de ce genre que, pour des raisons de temps, nous ayons présentée dans cet exposé, les états isomériques et les bandes super-déformées, montre bien les potentialités d'une approche de ce type. Nous aurions pu y ajouter l'analyse du processus de scission dans la fission des actinides <sup>35)</sup>, ou la description de l'interaction entre deux noyaux d'Uranium dans des collisions sous-coulombiennes <sup>56)</sup>. Dans les deux cas, la méthode microscopique fournit une description indépendante de modèle qui permet de dégager le mécanisme des phénomènes et de proposer une interprétation nouvelle. L'étude des noyaux exotiques, avec la quantité de données expérimentales nouvelles qui sont ou vont devenir disponibles, est également un domaine où les approches microscopiques vont certainement être amenées à jouer un rôle très important.

En terminant ce texte, j'aimerais remercier les organisateurs de l'Ecole Joliot-Curie, en particulier Y. Abgrall, d'avoir bien voulu m'inviter à présenter ce Cours et participer à ces journées très sympathiques et particulièrement enrichissantes sur le plan scientifique. Mes collègues de Bruyères-le-Châtel, J. Dechargé, J.-P. Delaroche et M. Girod, ainsi que D. Gogny ont été d'une aide considérable, tant dans les discussions que nous avons eu lorsqu'il s'est agi de mettre au point le contenu de ce Cours, que dans le rassemblement des matériaux qui lui ont servi de base. Les nombreux échanges avec P. Bonche, notamment ses conseils (que j'ai suivis), m'ont été également très utiles. J'ai aussi bénéficié de l'assistance particulièrement efficace de Annette Lodewick dans la confection des Figures et leur mise en place dans le texte. Je les remercie tous très chaleureusement.

## BIBLIOGRAPHIE GENERALE

- I) sur la théorie à N corps: J.P.Blaizot et G.Ripka, *Quantum Theory of Finite System* (The MIT Press, Cambridge, Massachussets, 1986); A.L.Fetter and J.D.Walecka, *Quantum Theory of Many-particle Systems* (McGraw-Hill, New-York, 1971).
- II) sur les approches microscopiques: P.Ring, P.Schuck, *The Nuclear Many-Body Problem*, Springer-Verlag, 1980.
- III) sur la méthode de Hartree-Fock: F.Villars, *The Hartree-Fock Approximation in Nuclear Physics*, Proceedings of the International School of Physics "Enrico Fermi", Course XXIII, 1963.
- IV) sur la Méthode de Hartree-Fock-Bogolyubov: K.Dietrich, Ecole Joliot-Curie de Physique Nucléaire, 1987.
- V) sur les approches microscopiques appliquées aux noyaux exotiques: M.Meyer, Ecole Joliot-Curie de Physique Nucléaire, 1983, Chapitre I, Paragraphe III, p 255 et Chapitre II, p263.

## REFERENCES

- 1) Proceedings of the Conference *Nuclear Structure in the Nineties*, edited by N.R.Johnson, Oak Ridge, Tennessee, USA, April 23-27, 1990 (North-Holland, 1990).
- 2) H.A.Bethe écrivait en 1953: " In the past quarter century physicists have devoted a huge amount of experimentation and mental labour to this problem - probably more man hours than have been given to any other scientific question in the history of mankind" (*Scientific American*, 189 (1953) 58).
- 3) R.V.Reid, *Ann. Phys. (N. Y.)*, 50 (1968) 411.
- 4) T.Hamada and I.D.Johnston, *Nucl. Phys.*, 34 (1962) 382.
- 5) R.Vinh Mau, in *Mesons in Nuclei*, edited by M.Rho and D.H.Wilkinson, North-Holland, Amsterdam, 1979.
- 6) K.Holinde and R.Machleidt, *Nucl. Phys. A*, 247 (1975) 495; R.Machleidt, K.Holinde, and Ch.Elster, *Phys. Rep.*, 149 (1987) 1.
- 7) K.A.Brueckner, *Phys. Rev.*, 97 (1955) 1353.
- 8) B.D.Day, *Rev. Mod. Phys.*, 39 (1967) 719; *Rev. Mod. Phys.*, 50 (1978) 495.
- 9) voir par exemple A.Messiah, *Mécanique Quantique*, Tome II, Chapitre XIX, page 716 et page 741.
- 10) K.A.Brueckner and D.T.Goldman, *Phys. Rev.*, 117 (1960) 207; K.A.Brueckner, J.L.Gammel, and J.T.Kubis, *Phys. Rev.*, 118 (1960) 1438.
- 11) H.A.Bethe, *Ann. Rev. Nucl. Sci.*, 21 (1971) 93.
- 12) H.Kümmel, K.Lührmann, and J.Zabolitzky, *Phys. Rep. C*, 36 (1978) 1; J.G.Zabolitzky, *Nucl. Phys. A*, 228 (1978) 272, 285.
- 13) B.D.Day, Proceedings of the International School of Physics "Enrico Fermi", edited by A.Molinari, Varenna, Course LXXIX, (North-Holland, 1981).
- 14) J.W.Negele, *Rev. Mod. Phys.*, 54,4 (1982) 913.

- 15) *Few-Body problems in Particle, Nuclear, Atomic, and Molecular Physics*, Proceedings of the XIth Conf. on Few-Body Physics, Fontevraud, 1987, edited by J.L.Ballot and M.Fabre de la Ripelle (Springer-Verlag, Wien, New-York, 1987).
- 16) B.H.Wildenthal and W.Chung, *Mesons in Nuclei*, edited by M.Rho and D.H.Wilkinson, North-Holland, Amsterdam, 1979.
- 17) B.A.Brown, Proceedings of the International Nuclear Physics Conference, Harrogate (UK), 1986, edited by J.L.Durell, J.M.Irvine and G.G.Morrison (Institute of Physics Conference Series No 86, Bristol).
- 18) A.W.Thomas, *Advances in Nuclear Physics*, Vol 13, Eds. J.Negele, E.Vogt (Plenum, New-York, 1983).
- 19) B.ter Haar and R.Malfliet, *Phys. Rep.*, **149**, 4 (1987) 1.
- 20) K.A.Brueckner, A.M.Lockett and M.Rotenberg, *Phys. Rev.*, **121** (1961) 255.
- 21) J.W.Negele and D.Vautherin, *Phys. Rev. C*, **5** (1972) 1472.
- 22) J.W.Negele, *Phys. Rev. C*, **1** (1970) 1260; X.Campi and D.W.L.Sprung, *Nucl. Phys. A*, **194** (1972) 401.
- 23) T.H.R.Skyrme, *Nucl. Phys.*, **9** (1959) 615; D.Vautherin and D.M.Brink, *Phys. Lett. B*, **32** (1970) 149; *Phys. Rev. C*, **5** (1972) 626.
- 24) J.Dechargé and D.Gogny, *Phys. Rev. C*, **21**, (1980) 1568.
- 25) J.Heisenberg, J.Lichtenstadt, C.N.Papanicolas, and J.S.McCarthy, *Phys. Rev. C*, **25**, (1982) 2292; B.Frois and C.N.Papanicolas, *Ann. Rev. Nucl. Part. Sci.* **37** (1987) 133.
- 26) B.D.Serot and J.D.Walecka, *Adv. Nucl. Phys.*, **16** (1986) 1.
- 27) J.Boguta and A.R.Romer, *Nucl. Phys. A*, **292** (1977) 413; C.J.Horowitz and D.D.Serot, *Nucl. Phys. A*, **368** (1981) 503; P.G.Reinhard et al., *Z. Phys. A*, **323** (1986) 13; W.Pannert, P.Ring, and J.Boguta, *Phys. Rev. Lett.*, **59** (1987) 2420; C.E.Price and G.E.Walker, *Phys. Rev. C*, **36** (1987) 354; W.Koepf and P.Ring, *Phys. Lett. B*, **212** (1988) 397.
- 28) G.Bertsch, *Z. Phys. A*, **289** (1978) 103.
- 29) D.L.Hill and J.A.Wheeler, *Phys. Rev.*, **89** (1953) 1102; J.J.Griffin and J.A.Wheeler, *Phys. Rev.*, **108** (1957) 311.
- 30) D.E.Medjadi, P.Quentin, M.Meyer, and J.Libert, *Phys. Lett. B*, **181** (1986) 185.
- 31) J.Blons, B.Fabbro, C.Mazur, D.Paya, M.Ribrag and Y.Patin, *Nucl. Phys. A*, **477** (1988) 231, et les références incluses.
- 32) A.Bohr, *Kgl. Danske Videnskab. Selskab Mat. Fys. Medd.* **26**, 14 (1952); *Rotational States in Atomic Nuclei* (Thesis, Copenhagen, 1954).
- 33) J.Trochon, G.Simon, J.W.Behrens, F.Brisard and C.Signarbieux, Proc. Int. Conf. on Nuclear Data for Basic and Applied Science, Santa Fe, NM, 13-17 May 1985, P.G.Young et al., eds (Gordon and Breach, London, 1986), et références incluses.
- 34) G.Gönnenwein, *Nucl. Phys.*, A **502** (1989) 159c.
- 35) J.F.Berger, M.Girod, and D.Gogny, *Nucl. Phys. A*, **502** (1989) 85c; J.F.Berger, M.Girod, and D.Gogny, *Comp. Phys. Comm.*, **63** (1991) 365.

- 36) M.Baranger and M.Vénéroni, *Ann. of Phys.*, **114** (1978) 123; D.M.Brink, M.J.Giannoni and M.Vénéroni, *Nucl. Phys. A*, **258** (1976) 237; D.J.Rowe and R.Basserman, *Can. Journ. of Phys.*, **54** (1976) 1941; F.Villars, *Nucl. Phys. A*, **285** (1977) 269; T.Marumori, *Progr. Theor. Phys.*, **57** (1977) 112; K.Goeke and P.G.Reinhard, *Ann. of Phys.*, **112** (1981) 408.
- 37) G.Do Dang, A.Bulgac and A.Klein, *Phys. Rev. C*, **36** (1987) 2661.
- 38) voir par exemple A.Messiah, *Mécanique Quantique*, Tome II, Chapitre XV, page 576-577.
- 39) W.E.Parry, *The Many-Body Problem*, Clarendon Press (Oxford, 1973).
- 40) R.Jastrow, *Phys. Rev.*, **98** (1955) 1479.
- 41) M.Baranger, *Phys. Rev.*, **130** (1980) 1568.
- 42) J.Bardeen, L.N.Cooper and J.R.Schrieffer, *Phys. Rev.*, **108** (1957) 1175.
- 43) C.Bloch and A.Messiah, *Nucl. Phys.*, **39** (1962) 95.
- 44) M.Girod, and B.Grammaticos, *Nucl. Phys. A*, **330** (1979) 40.
- 45) P.Bonche, J.Dobaczewski, H.Flocard, P.H.Heenen, S.J.Krieger, J.Meyer, and M.S.Weiss, *Nucl. Phys. A*, **519** (1990) 509; P.Bonche, S.J.Krieger, M.S.Weiss, J.Dobaczewski, H.Flocard, and P.H.Heenen, *Phys. Rev. Lett.*, **66** (1991) 876; *ibid*, *Nucl. Phys. A*, **500** (1989) 308.
- 46) P.Bonche, J.Dobaczewski, H.Flocard, P.H.Heenen and J.Meyer, *Nucl. Phys. A*, **510** (1990) 466.
- 47) B.Giraud and B.Grammaticos, *Nucl. Phys. A*, **233** (1974) 373; *Nucl. Phys. A*, **255** (1975) 141.
- 48) A.Bohr and B.R.Mottelson, *Nuclear Structure*, Vol I, (Benjamin, 1975).
- 49) K.Kumar, in *The Electromagnetic Interaction in Nuclear Physics*, edited by W.D.Hamilton (North Holland, Amsterdam, 1975).
- 50) J.Libert and P.Quentin, *Z. Phys. A*, **306** (1982) 315.
- 51) R.K.J.Sandor et al., *Phys. Rev. C*, **43** (1991) 2040.
- 52) M.Girod, J.P.Delaroche, D.Gogny, and J.F.Berger, *Phys.Rev.Lett.* **62**, 2452 (1989).
- 53) D.Goutte et al., *Future Directions in Nuclear Physics with 4 $\pi$  Gamma Detection Systems of the New Generation*, Workshop - Symposium, Strasbourg (4-16 Mars, 1991).
- 54) J.P.Delaroche, M.Girod, J.Libert and I.Deloncle, *Phys. Lett.* **B232**, (1989) 145; J.F.Berger et al., *Future Directions in Nuclear Physics with 4 $\pi$  Gamma Detection Systems of the New Generation*, Workshop - Symposium, Strasbourg (4-16 Mars, 1991).
- 55) J.A.Becker et al., *Phys. Rev. C*, **41** (1990) 9; D.Ye et al., *Phys. Rev. C*, **41** (1990) 13.
- 56) J.F.Berger, J.D.Anderson, P.Bonche, and M.S.Weiss, *Phys.Rev. C*, **41** (1990) R2483.

## Au delà de la méthode du champ moyen par la méthode de la coordonnée génératrice

P.-H. Heenen

*Physique Nucléaire Théorique, U.L.B.,  
CP229, 1050 Bruxelles, Belgique*

### Résumé

La méthode de la coordonnée génératrice permet d'étudier l'importance de plusieurs des approximations introduites dans les méthodes de champ moyen et d'aller au delà de ces méthodes à l'aide d'un formalisme purement quantique et variationnel. Cette méthode est expliquée en détail. Son intérêt est montré sur des applications aux déformations octupolaires et à l'étude de la superdéformation dans la région des Hg. Les restaurations de symétrie qui sont un cas particulier de la méthode sont étudiées en détail dans le cas des restaurations de la parité et du bon nombre de particules.

### Abstract

The principle of the generator coordinate method is presented in these lectures. It is shown that this method permit to study the errors due to some of the approximations of mean field methods and to correct them with the help of a purely quantal and variational formalism. The interest of the generator coordinate method is demonstrated on applications to octupole deformed nuclei and to superdeformed states in the Hg region. Restoration of symmetries which are a particular case of the method are studied in details in the cases of parity and particle number.

### 1. Introduction

Le modèle collectif est à la base de notre compréhension de la spectroscopie nucléaire <sup>1,2</sup>). Il permet de classer les différents types de spectre que l'on rencontre, principalement par la connaissance de l'énergie de déformation du noyau en fonction de quelques degrés de liberté astucieusement choisis. Ces surfaces d'énergie peuvent être obtenues de différentes façons: semi microscopiquement par la méthode de Strutinsky ou de façon plus fondamentale au moyen d'une interaction nucléaire effective à deux corps et des méthodes de Hartree Fock+BCS (HFBCS) ou de Hartree Fock Bogolioubov (HFB). Ces méthodes, basées sur l'introduction d'un champ nucléaire moyen, ont été testées dans de nombreuses régions de la table de masse et leurs prédictions sont généralement en bon accord avec les données expérimentales.



Sur la figure 1 est représentée, pour le  $^{194}\text{Hg}$ , la variation de l'énergie totale en fonction du moment quadrupolaire axial, obtenue par la méthode HFBCS avec une interaction de Skyrme  $\text{Skm}^*$  <sup>8)</sup>. Le dessin s'étend jusqu'aux déformations correspondant à des états superdéformés (SD). Des résultats très semblables à celui-ci ont été obtenus par la méthode HFB avec une interaction de Gogny <sup>4)</sup> et par la méthode de Strutinsky <sup>5)</sup>. L'énergie de déformation présente un minimum absolu pour un moment quadrupolaire aplati d'environ -10b. L'état HFBCS correspondant à ce minimum est assimilé à l'état fondamental du noyau. Deux minima relatifs apparaissent également dans cette courbe. Ils sont généralement interprétés comme approchant des états excités du noyau, l'état à 42b étant un état superdéformé.

Une certaine prudence s'impose cependant dans l'interprétation des résultats "champ moyen". Les surfaces d'énergie sont en général déterminées en fonction d'un petit nombre de degrés de liberté. Les degrés de liberté non traités explicitement sont soit complètement relâchés, soit inaccessibles parce que des symétries sont imposées à la fonction d'onde totale. Rien n'assure que les minima trouvés ne sont en fait des points selles en fonction de ces degrés de liberté non traités. Le minimum trouvé dans le  $^{194}\text{Hg}$  à 20b est par exemple un point selle en fonction de  $\gamma$  lorsque l'on impose pas à la fonction d'onde totale d'être symétrie axiale. De la même façon, la figure 19 montre un exemple de minimum absolu obtenu en fonction de Q qui devient un point selle lorsque l'on permet à la densité nucléaire de présenter des déformations octupolaires. Il est donc crucial de déterminer dans chaque cas les degrés de liberté relevant.

Les résultats présentés sur la figure 1 présentent d'autres défauts, dont la correction necessitent d'aller au delà d'une approximation de la fonction d'onde totale du système par une fonction d'onde à particules (ou à quasi particules) indépendantes.

Le hamiltonien HFBCS brise plusieurs symétries du hamiltonien nucléaire. L'invariance par translation, les symétries correspondant au nombre de particules, au moment angulaire total et à la parité sont les plus fréquemment brisées. En conséquence, la fonction d'onde correspondant au minimum obtenu par une méthode de champ moyen ne possède pas les propriétés d'un fondamental. Ce défaut entraîne une erreur sur l'énergie du noyau. Deux types d'approche permettent de corriger ce problème. La plus simple consiste à calculer la dispersion de l'opérateur correspondant à la symétrie brisée ( $\Delta J^2$  dans le cas de la symétrie par rotation par exemple), et à estimer le moment d'inertie correspondant à ce mode (par la méthode du cranking, ou d'après les données expérimentales pour la rotation). L'énergie corrigée est alors donnée par:

$$E_{cor} = E - \frac{\langle \Delta J^2 \rangle}{I} \quad (1.1)$$

où E est l'énergie champ moyen et I un moment d'inertie.

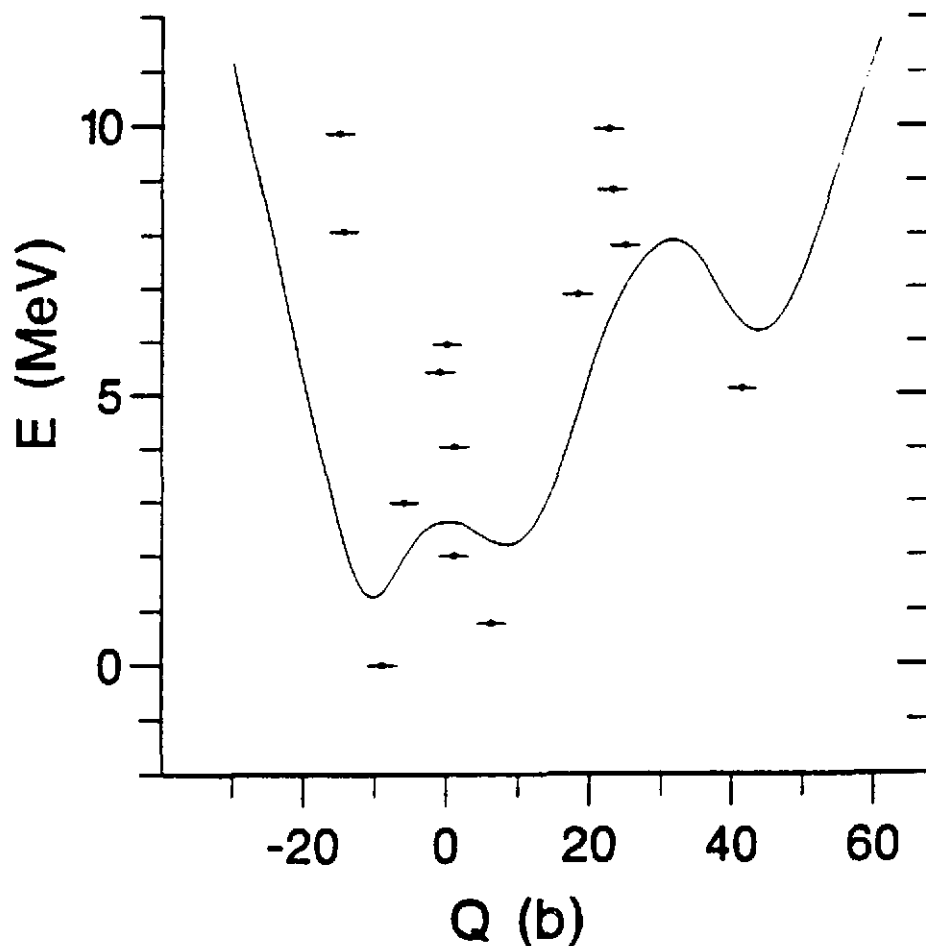


Figure 1

Variation de l'énergie HFBCS en fonction du moment quadrupolaire axial (en trait plein). Les points noirs indiquent les énergies et les moments quadrupolaires moyens des états GCM

Nous verrons dans la deuxième partie de ce cours une méthode plus fondamentale permettant de restaurer exactement des symétries brisées.

Un deuxième problème qui amène à regarder les résultats obtenus par une méthode champ moyen avec une certaine circonspection concerne la stabilité des structures observées en fonction d'une variable collective donnée. Vu de façon semi classique, le noyau est susceptible de vibrer à l'intérieur du puits de potentiel, l'amplitude de ces vibrations dépendant de la géométrie du puits ( hauteur de

la barrière, profondeur du puits). L'énergie de vibration peut être déterminée par une approximation harmonique du fonds du puits. Une prescription doit alors aussi être choisie pour la masse associée à cette vibration. Contrairement à l'énergie de brisure de symétrie, qui abaisse l'énergie totale, cette énergie de point zéro augmente l'énergie. D'autre part, l'état correspondant à un minimum du potentiel peut être instable par effet tunnel et se désintégrer dans le premier puits avec un temps qui est fonction de la largeur et de la hauteur de la barrière de potentiel. Cet effet tunnel peut être calculé par des méthodes semiclassiques. La méthode de la coordonnée génératrice (GCM) permet une approche variationnelle et purement quantique à ces deux problèmes.

La suite de ce cours est consacrée à la GCM. Cette méthode est présentée au chapitre 2. Nous montrerons sur une application à l'étude de la superdéformation que la GCM apporte une réponse très simple à la fois au problème de la stabilité des minima calculés par des méthodes de champ moyen et à celui de la vibration dans un puits de potentiel. Au chapitre 3, nous montrerons que les restaurations de symétrie sont un cas particulier de la GCM. Enfin, au chapitre 4, nous montrerons l'importance d'aller au delà de la méthode du champ moyen dans l'étude des déformations octupolaires.

## 2. La méthode de la coordonnée génératrice

### 2.1. Présentation de la méthode

Une première méthode permettant de corriger certains des défauts de HF-BCS pourrait consister à mélanger les configurations correspondant aux minima obtenus en fonction du degré de liberté étudié. Dans le cas de la figure 1, cela revient à mélanger les trois fonctions correspondant aux minima aplati, allongé et superdéformé. Cependant les éléments de matrice non diagonaux entre ces états sont extrêmement petits: leur rapport avec les éléments de matrice diagonaux est de l'ordre de  $10^{-12}$  pour l'état superdéformé qui est donc totalement découplé. Les éléments de matrice entre les états à déformation normale sont environ  $10^{-5}$  fois plus petits que les éléments diagonaux, ce qui amène des corrections à l'énergie de l'ordre de quelques dizaines de keV et donc non significatives.

La figure 2 indique comment varie le recouvrement entre les trois minima et leurs voisins. Ces recouvrements sont très piqués et en première approximation d'allure gaussienne, ce qui est la base de l'approximation du recouvrement Gaussien discutée dans le cours de J.F. Berger.. Les éléments de matrice du Hamiltonien ont une dépendance en moment quadripolaire très similaire. Il est donc clair qu'un couplage entre états ne peut être obtenu qu'en considérant un réseau beaucoup plus dense et inclure bien plus que les seuls minima de la figure 1. Cette variation rapide des recouvrements se comprend assez facilement si on regarde le nombre de croisements de niveaux que l'on a pour passer de la configuration

aplatie à l'état superdéformé: ce nombre est de l'ordre de quinze. Ceci fournit une idée d'un pas du réseau réaliste: il doit être de l'ordre du rapport entre la différence de moment quadrupolaire entre ces deux minima extrêmes et le nombre de croisements de niveau, soit environ 4b.

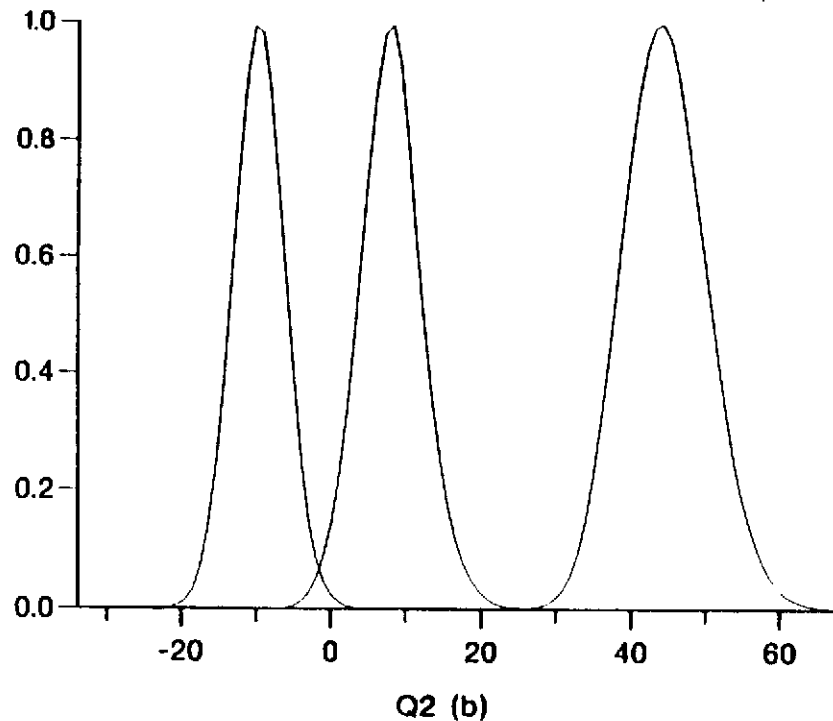


Figure 2

Recouvrements entre les fonctions d'onde correspondant aux minima de la figure 1 et les fonctions HFBCS correspondant aux autres valeurs du moment quadrupolaire

La méthode la coordonnée génératrice<sup>6)</sup> consiste à considérer un réseau continu sur la variable collective étudiée, et à effectuer un mélange de configurations sur cette variable continue.

Deux ingrédients sont nécessaires à la GCM:

-une famille de fonctions d'onde  $|\Phi(q)\rangle$  dépendant d'un (ou éventuellement de plusieurs) paramètre continu  $q$ . Dans notre cas, cette famille est constituée de fonctions d'onde HFBCS et le paramètre continu sera le plus souvent le multiplicateur de Lagrange associé à un mode de déformation.

-un Hamiltonien  $\hat{H}$  comprenant une interaction à deux corps. Dans notre cas, ce sera la même interaction que celle qui a servi à construire les fonctions d'onde HFBCS.

On construit une nouvelle fonction d'essai:

$$|\Psi\rangle = \int f(q)|\Phi(q)\rangle dq \quad , \quad (2.1)$$

la fonction  $f(q)$  étant la nouvelle inconnue.

L'énergie totale est donnée par:

$$E = \frac{\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \quad (2.2)$$

et  $f(q)$  est déterminé par variation de l'énergie. La variation de  $|\Psi\rangle$  par rapport à  $f(q)$  conduit à l'équation de Hill et Wheeler dont  $f(q)$  est solution:

$$\int (H(q, q') - E I(q, q')) f(q') dq' = 0 \quad (2.3)$$

Les noyaux de recouvrement et Hamiltonien sont donnés par:

$$I(q, q') = \langle \Phi(q) | \Phi(q') \rangle \quad (2.4)$$

$$H(q, q') = \langle \Phi(q) | \hat{H} | \Phi(q') \rangle \quad (2.5)$$

L'équation de Hill et Wheeler est une équation intégrale, qui est en pratique discrétisée.

## 2.2. Résolution de l'équation de Hill et Wheeler

On pourrait en principe inverser l'opérateur de norme  $I(q, q')$  et diagonaliser l'opérateur  $I^{-1}H$ . Ceci présente cependant deux inconvénients majeurs. L'opérateur à diagonaliser n'est pas hermitique. D'autre part,  $I$  possède des valeurs propres très petites qui nécessitent un traitement particulier. La méthode usuellement utilisée pour résoudre l'équation de Hill et Wheeler <sup>7)</sup> permet d'éviter ces deux inconvénients.

Cette méthode procède en plusieurs étapes. On commence par diagonaliser  $I$  :

$$\int I(q, q') u_k(q') dq' = n_k u_k(q) \quad (2.6)$$

En se basant sur les propriétés des vecteurs propres d'un opérateur intégral:

$$\sum_k u_k^*(q) u_k(q') = \delta(q - q') \quad \int u_k^*(q) u_{k'}(q) dq = \delta_{k, k'} \quad (2.7)$$

on construit la racine carrée de la matrice de norme:

$$I^{1/2}(q, q') = \sum_k u_k^*(q) \sqrt{n_k} u_k(q') \quad (2.8)$$

et l'inverse de cette racine carrée:

$$I^{-1/2}(q, q') = \sum_k u_k^*(q) (\sqrt{n_k})^{-1} u_k(q') \quad (2.9)$$

Le facteur  $n_k^{-1/2}$  est très grand pour de petites valeurs propres de  $I(q, q')$ . Ces petites valeurs propres sont dues au fait que la base générée par les fonctions d'onde HFBCS est quasi redondante. Ainsi que nous le verrons dans la suite, l'équation de Hill et Wheeler est résolue par discrétisation de la variable collective. Pour obtenir des résultats qui ne dépendent pas du choix de la discrétisation, le recouvrement entre deux points voisins doit être au moins de l'ordre de 80%. Les petites valeurs propres qui résultent de cette quasi redondance sont la cause de problèmes numériques, bien qu'en théorie, elles ne devraient pas influencer les résultats. Ce problème est éliminé en n'introduisant dans 2.9 que les valeurs propres  $n_k$  supérieure à une borne  $\epsilon$ .

Une nouvelle fonction inconnue  $g(q)$  est définie à partir de la racine carrée de I:

$$g(q) = \int I^{1/2}(q, q') f(q') dq \quad (2.10)$$

ainsi qu'une transformation pour tout opérateur  $\hat{O}$ :

$$\tilde{O}(q, q') = \int I^{-1/2}(q, q_1) O(q_1, q_2) I^{-1/2}(q_2, q') dq_1 dq_2 \quad (2.11)$$

où  $O(q, q')$  est calculé à partir des fonctions d'ondes HFBCS:

$$O(q, q') = \langle \Phi(q) | \hat{O} | \Phi(q') \rangle \quad (2.12)$$

L'équation de Hill et Wheeler devient:

$$\int \tilde{H}(q, q') g_\alpha(q') dq' = E_\alpha g(q)_\alpha \quad (2.13)$$

ce qui est une équation intégrale aux valeurs propres.

En pratique, l'équation de Hill et Wheeler est discrétisée. L'équation 2.13 se transforme ainsi en une équation matricielle qui se résoud par les méthodes classiques de diagonalisation de matrices.

La méthode de la coordonnée génératrice appelle plusieurs remarques:

1. La solution des équations de Hill et Wheeler ne peut dépendre ni de la façon dont cette équation est discrétisée, ni de la borne inférieure choisie pour les valeurs propres de la matrice de norme.
2. L'équation 2.13 possède autant de valeurs propres que de points de discrétisation en  $q$ . Seules les valeurs propres les plus basses seront réellement indépendantes de la discrétisation.
3. La GCM est une méthode variationnelle. Elle conduit donc toujours à un abaissement de l'énergie.
4. Les fonctions  $f_\alpha(q)$  ne sont pas orthonormées. On a en effet:

$$\int f_\alpha(q) I(q, q') f_{\alpha'}(q') dq dq' = \delta_{\alpha, \alpha'} \quad (2.14)$$

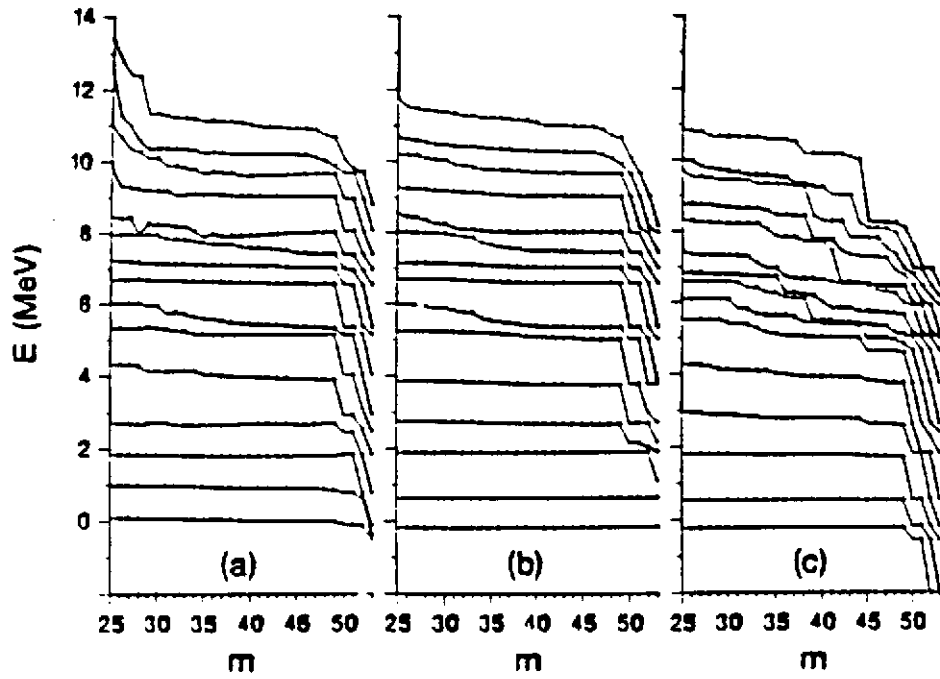


Figure 3

Convergence des valeurs propres obtenues par la GCM pour le  $^{194}\text{Hg}$  en fonction du nombre  $m$  de valeurs propres de l'opérateur de norme retenues

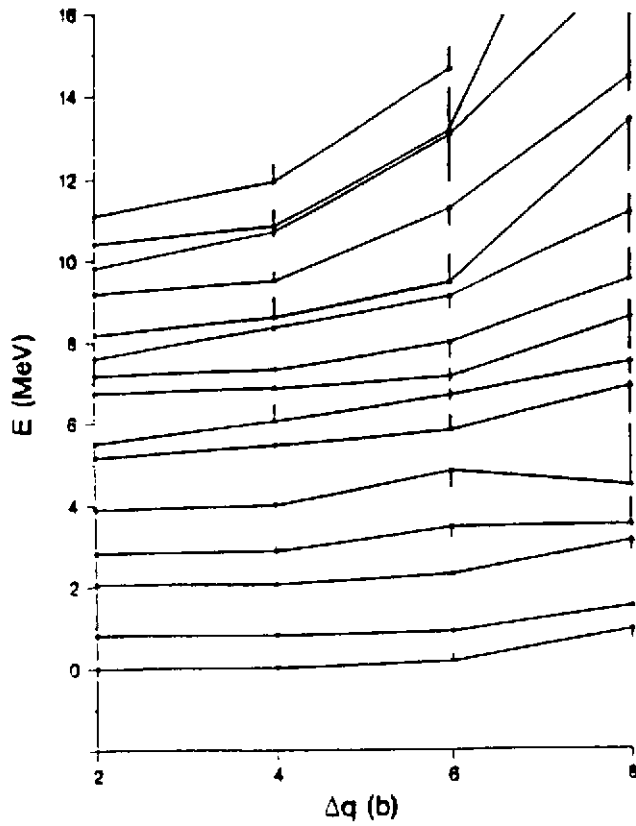


Figure 4

Convergence des valeurs propres GCM en fonction du pas du réseau

Les carrés des modules de ces fonctions ne peuvent donc pas représenter une densité de probabilités. Ce sont les fonctions  $g_\alpha$  qui sont identifiées à des fonctions d'ondes collectives.

5. Les fonctions d'onde HFBCS brisent des symétries du Hamiltonien nucléaire. Les fonctions GCM les brisent également (sauf, bien sûr dans le cas de symétries que l'on restaure, voir chapitre 3). Le bon nombre de particules est imposé en moyenne sur les fonctions d'onde HFBCS. Pour obtenir des fonctions d'onde GCM ayant également en moyenne le bon nombre de particules, il est nécessaire d'introduire des multiplicateurs de Lagrange dans l'équation de Hill et Wheeler. Les erreurs dues à un nombre moyen de particules incorrectes peuvent complètement fausser les résultats GCM. L'erreur sur l'énergie étant de l'ordre de 8MeV par particules, l'erreur sur l'énergie d'une fonction d'onde qui n'a pas le bon nombre de particules à 0.1 près est de l'ordre de 800keV, ce qui est beaucoup trop grand.

6. L'équation de Hill et Wheeler fournit bien sûr des énergies, mais aussi des fonctions d'onde avec lesquelles il est possible de calculer des éléments de matrice de transition.

### 2.3. Quelques résultats GCM obtenus dans l'étude d'états superdéformés

Sur les figures 3 et 4 est testée la précision de la résolution de l'équation de Hill et Wheeler en fonction de la borne inférieure prise pour les valeurs propres de la matrice de norme  $I(q, q')$  (figure 3) et du pas du réseau (figure 4). Ce résultat est tiré d'une étude<sup>8)</sup> du  $^{194}\text{Hg}$  avec le moment quadrupolaire comme coordonnée génératrice (cf. figure 1). Le calcul comprend 55 points de discrétisation pour un pas  $\Delta q$  de 2b. On voit que jusqu'à 10 MeV d'énergie d'excitation, une très bonne stabilité des valeurs propres est obtenue à condition d'éliminer les trois ou quatre plus petites valeurs propres de  $I$  et de prendre un pas de 4b au maximum (ce qui confirme l'évaluation du pas du réseau que nous avons fait précédemment). Les plus petites valeurs propres de l'opérateur de norme font apparaître des valeurs propres (et des vecteurs propres) non physiques de l'équation de Hill et Wheeler. Ces états spurieux se reconnaissent à leur énergie qui varie beaucoup plus rapidement que celle des autres valeurs propres lorsqu'on diminue  $\epsilon$ . Un signe encore plus net de la pathologie de ces états est la forme des fonctions d'onde qui y sont associées: ces fonctions d'onde présentent un nombre de noeuds beaucoup plus grand que celui qu'elles devraient avoir en fonction de leur position dans le spectre. En général, ces vecteurs propres changent très rapidement de signe en fonction de  $q$ .

Sur la figure 4, l'incertitude sur chaque valeur propre due au choix des points du réseau est indiquée par des barres. On peut en effet construire deux réseaux de pas 4b à partir d'un réseau à 2b, trois à 6b et quatre à 8b. La précision obtenue sur les huit premières valeurs propres avec un pas de 4b est de l'ordre de 100 à 200 keV, ce qui est tout à fait suffisant vu les incertitudes liées au choix de l'interaction



nucléaire et plus particulièrement à l'appariement.

Les états obtenus par la GCM dans cette étude du  $^{194}\text{Hg}$  sont indiqués par des barres sur la figure 1. L'abscisse du centre de ces barres est égale à la valeur moyenne du moment quadrupolaire pour l'état considéré. Le fondamental GCM a un moment quadrupolaire moyen très proche de celui du fondamental HFBCS. Le gain en énergie obtenu grâce à la GCM est de l'ordre de 1.5MeV. Sur la figure 5 sont représentées pour le fondamental, le premier état excité et l'état superdéformé les carrés des modules des fonctions d'onde collectives  $g_\alpha(Q)$ . La fonction d'onde du fondamental est très nettement piquée à une déformation proche de celle de l'état HFBCS. Le premier état excité présente une structure à deux composantes. La plus importante correspond à la déformation du minimum allongé observé précédemment, la seconde à celle du fondamental. Il en résulte (cf figure 1) que le moment quadrupolaire moyen est assez différent du minimum HFBCS allongé. L'énergie d'excitation du premier état excité est prédite environ 200 keV plus bas par la GCM que par HFBCS.

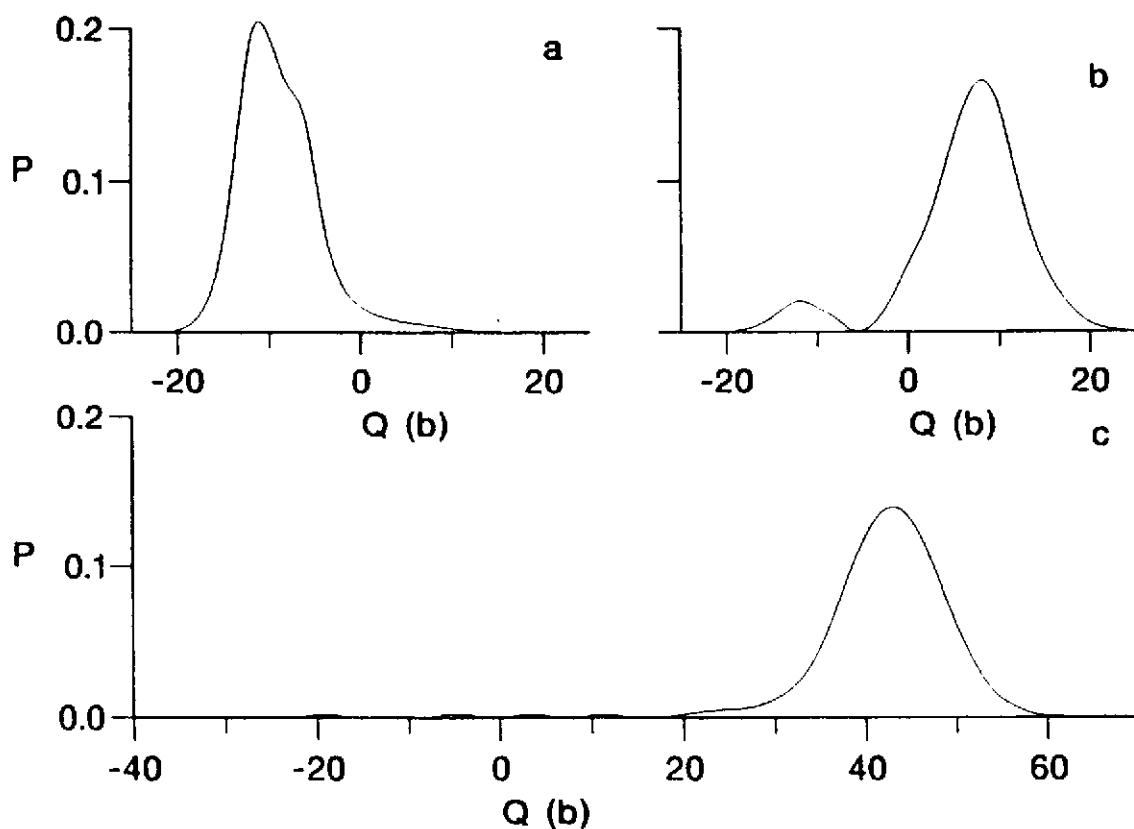


Figure 5

Carré des modules des fonctions collectives  $g_\alpha(Q)$  obtenues pour le fondamental, le premier excité et l'état SD du  $^{194}\text{Hg}$ .

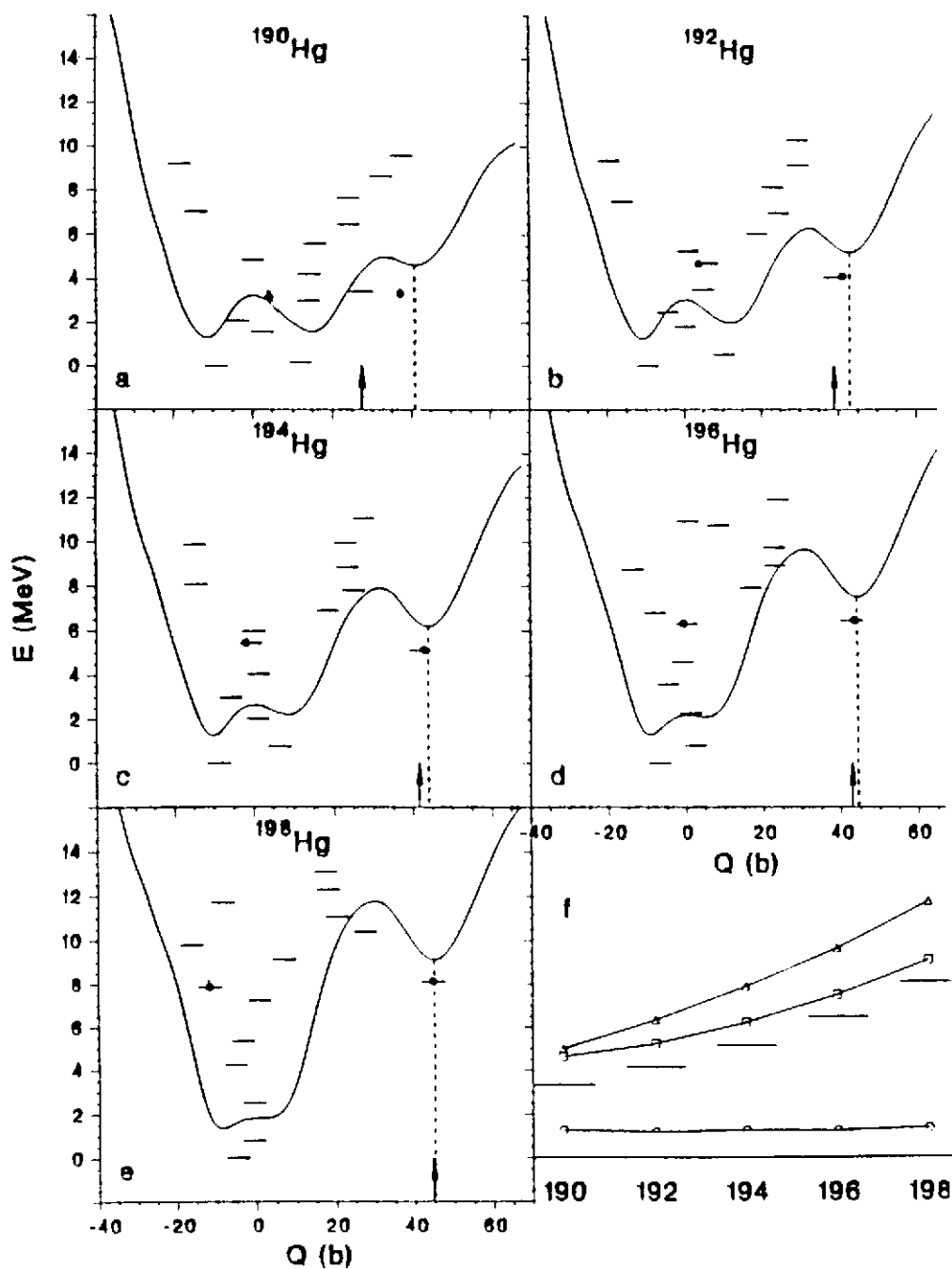


Figure 6

Variation de l'énergie HFBCS et valeurs propres GCM obtenues pour différents isotopes du Hg. Les points noirs indiquent les états obtenus après découplage du moment quadrupolaire (voir texte). Dans la partie inférieure droite, sont indiquées (en prenant le fondamental GCM comme zéro pour chaque noyau) les énergies HFBCS du fondamental ( $\circ$ ), de l'état SD ( $\square$ ) et de la barrière ( $\triangle$ ). Les états SD GCM sont indiqués par des barres.

De la même façon, le moment quadrupolaire moyen de l'état GCM superdéformé est légèrement abaissé par rapport au minimum de la courbe d'énergie potentielle. Ceci est dû à la légère dissymétrie de la fonction d'onde SD par rapport à son maximum: cette fonction d'onde présente une queue de faible amplitude dans le premier puits. C'est cette composante dans le premier puits, qui est responsable du couplage électromagnétique quadrupolaire entre l'état SD et les états à déformation normale. Ce couplage permet d'expliquer la désexcitation rapide de la bande SD en fonction du spin.

La figure 6 reprend les résultats obtenus par la GCM pour cinq isotopes du Hg. La variation de l'énergie HFBCS en fonction du moment quadrupolaire axial dépend fortement du nombre de neutrons. Pour le  $^{198}\text{Hg}$ , le minimum superdéformé est bien marqué, avec une profondeur du puits de potentiel supérieure à 3 MeV. Par contre, la surface ne présente pas de minimum bien marqué aux petites déformations. Lorsque le nombre de neutron diminue, la situation s'inverse. Pour le  $^{190}\text{Hg}$ , le minimum superdéformé est très peu marqué tandis que deux minima aplatis et allongés sont séparés par une barrière proche de 2 MeV. Ces différences de comportement se retrouvent dans la GCM. Le fondamental et le premier état excité GCM ont des déformations proches de celles prédites par HFBCS pour tous les isotopes sauf le  $^{198}\text{Hg}$ . Par contre, la déformation de l'état SD diminue avec le nombre de neutrons. Elle reste cependant proche de la déformation champ moyen jusqu'au  $^{192}\text{Hg}$ . Pour le  $^{190}\text{Hg}$ , plus aucun état GCM ne présente une déformation moyenne que l'on pourrait identifier à celle d'un état SD.

Les fonctions d'onde reprises sur la figure 7 confirment cette analyse. A déformation normale, les fonctions d'onde collectives de l'état fondamental et du premier état excité présentent des maxima pour des déformations proches de celles des minima HFBCS. Par contre, l'étalement des fonctions d'onde varie très fortement. Il est le plus grand pour le  $^{198}\text{Hg}$  et est très faible pour le  $^{190}\text{Hg}$ . Dans le cas de l'état SD, la situation s'inverse. L'état SD du  $^{198}\text{Hg}$  ne présente qu'un étalement très réduit dans le premier puits. Cet étalement augmente fortement lorsque N diminue. Cependant, pour tous les isotopes, il subsiste un état présentant un maximum marqué pour un moment quadrupolaire supérieur à 40b. Dans le cas du  $^{190}\text{Hg}$ , l'état présentant un tel maximum est indiqué par une flèche sur la figure 6. On voit que la queue de cette fonction d'onde collective dans le premier puits est telle que la valeur moyenne du moment quadrupolaire est très différente du maximum de la fonction d'onde.

Sur la figure 7 est aussi reprise la fonction d'onde de l'état du premier puits dont l'énergie est la plus proche de celle de l'état SD. Pour le  $^{190}\text{Hg}$ , la structure de cette fonction d'onde dans le premier puits ressemble fort à celle de l'état SD. Ceci permet de proposer un mécanisme expliquant qu'un état SD est observé pour des spins (probablement) supérieur à 10 dans ce noyau. L'élément de matrice quadrupolaire entre l'état SD et son voisin en énergie est très grand. En diagonalisant la matrice quadrupolaire  $2 \times 2$  entre ces deux états, on obtient deux

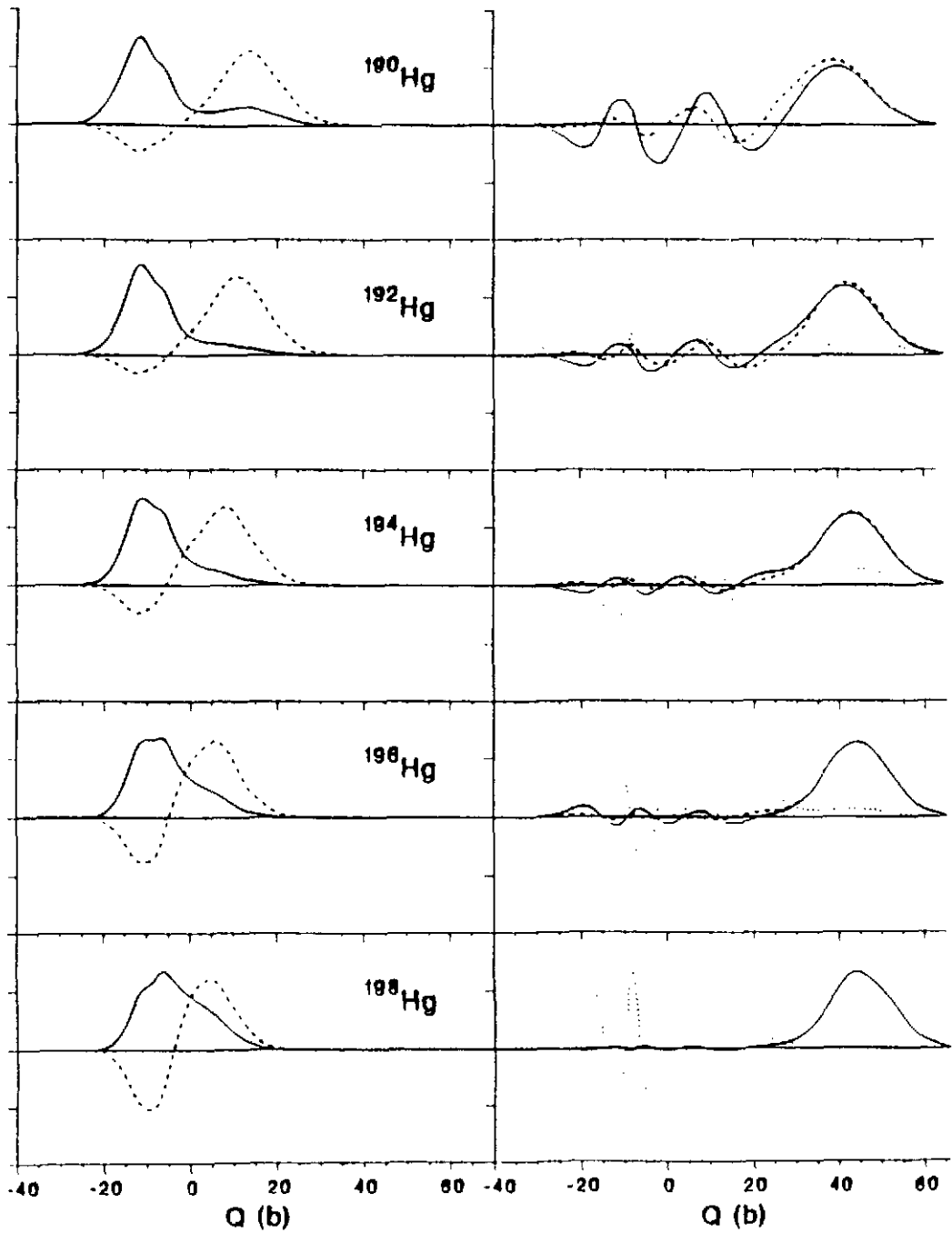


Figure 7

Fonctions d'onde collectives  $g_\alpha$  obtenues par la GCM pour le fondamental (trait plein) et le premier état excité (tireté) sur la partie gauche, l'état SD (trait plein) et l'état du premier puits le plus proche en énergie de l'état SD (pointillé) sur la partie droite. Sur cette partie est aussi indiquée en tireté l'état SD découplé.

nouveaux états (représentés par des ronds noirs sur la figure 6) qui sont découplés en quadrupoles mais ne sont bien sûr plus états propres du hamiltonien. Cependant l'élément de matrice de couplage de  $\hat{H}$  est donné par la GCM et est faible: de l'ordre de quelques centaines de keV. On peut donc supposer que cet élément de matrice est suffisamment grand pour coupler les états des deux puits à bas spin. Par contre, pour des moments angulaires de quelques unités, la différence entre les moments d'inertie normaux et SD rend ce couplage de quelques centaines de keV négligeable vis à vis de la différence entre les énergies dues à la rotation. Les états observés à des spins de l'ordre de 10 sont donc les états découplés, les états GCM obtenus sans découplage l'étant à bas spin. On s'attend donc à ce que des états SD ne soient pas observables à bas spins dans les noyaux les plus légers (le  $^{190}\text{Hg}$  et peut-être le  $^{192}\text{Hg}$ ).

Sur la figure 6 sont portées les différences entre les énergies des fondamentaux GCM et les fondamentaux et états superdéformés HFBCS, ainsi que les énergies d'excitation SD obtenues par la GCM. On voit que l'effet de la GCM sur les énergies consiste principalement en un décalage global et que les énergies d'excitation prédites par le champ moyen sont de bonnes approximations.

Remarquons en conclusion que la GCM incorpore dans un formalisme purement quantique et par une méthode variationnelle des effets que l'on essaye de traiter en général par des méthodes semi-classiques: vibrations d'un état à l'intérieur d'un puits de potentiel, décroissance d'un état par effet tunnel. L'image de la désexcitation d'un état SD vers le premier puits obtenu par la GCM est que c'est le couplage par un opérateur électromagnétique (quadrupolaire dans ce cas-ci) entre la queue de la fonction d'onde SD et les états de ce premier puits qui est responsable de la désexcitation.

### 3. Les restaurations de symétrie

#### 3.1. Position du problème

Ainsi que nous l'avons déjà vu, les fonctions d'onde HFBCS brisent des symétries du Hamiltonien nucléaire. Ceci signifie qu'il existe un groupe de symétrie généré par des opérateurs  $\hat{R}(\Omega)$  tel que  $\hat{H}$  soit invariant et  $|\Phi\rangle$  soit modifié:

$$|\Phi(\Omega)\rangle = \hat{R}(\Omega)|\Phi\rangle \quad \langle\Phi(\Omega)|\hat{H}|\Phi(\Omega)\rangle = \langle\Phi|\hat{H}|\Phi\rangle \quad (3.1)$$

Exemples:

-Parité: Soit  $\hat{P}$  l'opérateur de parité (inversant le signe des coordonnées d'espace). Si  $|\Phi\rangle$  brise la parité, cette fonction est dégénérée avec  $\hat{P}|\Phi\rangle$ , mais différente. Dans ce cas-ci le groupe ne comporte que deux éléments.

-Moment angulaire: Une solution déformée des équations HFBCS possède un moment quadrupolaire non nul et donc:

$$\langle\Phi|\hat{Q}_\mu|\Phi\rangle \neq 0 \quad \hat{Q}_\mu = r^2 Y_2^\mu \quad (3.2)$$

Cette solution brise la symétrie par rotation et n'a pas un bon moment angulaire. L'opérateur générant des fonctions d'onde équivalentes est l'opérateur de rotation:

$$\hat{R}(\Omega) = \exp(i\gamma\hat{J}_z) \exp(i\beta\hat{J}_y) \exp(i\alpha\hat{J}_z) \quad (3.3)$$

où  $\alpha, \beta$  et  $\gamma$  sont trois angles d'Euler. Si la fonction d'onde HFBCS a une symétrie axiale, seule la rotation autour de  $\hat{J}_y$  est à considérer. Dans ce cas-ci, on obtient un ensemble continu de fonctions d'onde dégénérées.

Toutes les fonctions d'onde obtenues grâce à  $\hat{R}(\Omega)$  ayant la même énergie peuvent être mélangées par la GCM. On construit ainsi une nouvelle fonction d'essai:

$$|\Psi\rangle = \int f(\Omega) \hat{R}(\Omega) |\Phi\rangle d\Omega \quad , \quad (3.4)$$

En appliquant  $\hat{R}(\Omega)$  à  $|\Psi\rangle$ , on voit tout de suite que cette nouvelle fonction est invariante pour l'opération considérée (le produit de deux opérations d'un groupe étant une opération du groupe). Le mélange obtenu par la GCM permet donc de restaurer des symétries brisées.

La fonction poids  $f(\Omega)$  peut être déterminé a priori. Nous allons examiner ici quelques cas particuliers.

#### 3.2. Parité

Ce cas est particulièrement simple. Une fonction d'onde à bonne parité est obtenue à partir de  $|\Phi\rangle$  en prenant les combinaisons:

$$|\Psi^\pm\rangle = |\Phi\rangle \pm \hat{P}|\Phi\rangle \quad (3.5)$$

On vérifie immédiatement que:

$$\hat{P}|\Psi^\pm\rangle = \pm|\Psi^\pm\rangle \quad (3.6)$$

### 3.3. Nombre de particules

L'opérateur nombre de particules  $\hat{N}$  est donné par:

$$\hat{N} = \sum_k a_k^\dagger a_k \quad (3.7)$$

où  $a_k^\dagger$  et  $a_k$  sont les opérateurs de création et de destruction d'un nucléon dans l'état  $k$ . Pour un état HFBCS

$$|\Phi\rangle = \prod_k (u_k + v_k a_k^\dagger a_{\bar{k}}^\dagger) |0\rangle \quad (3.8)$$

où  $\bar{k}$  est l'état renversé du temps de  $k$ , le nombre moyen de particules est donné par:

$$\langle \Phi | \hat{N} | \Phi \rangle = \sum_k v_k^2 \quad (3.9)$$

La valeur de ce nombre est fixée au bon nombre de particules par un multiplicateur de Lagrange (qui représente le niveau de Fermi) dans les équations BCS. On vérifie cependant facilement que la dispersion du nombre de particules n'est pas nulle pour  $|\Phi\rangle$ :

$$\langle \Phi | (\hat{N}^2 - N^2) | \Phi \rangle = \sum_k u_k^2 v_k^2 \neq 0 \quad (3.10)$$

sauf pour un état Hartree-Fock pur ( $v_k = 1$  pour les états occupés, 0 pour les autres).

On montre que la forme de l'opérateur de projection sur le nombre de particules  $A$  est donnée par <sup>7)</sup>:

$$\hat{P}^A = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \exp(i\phi(\hat{N} - A)) d\phi \quad (3.11)$$

On vérifie facilement que  $\hat{P}^A$  est un projecteur en le faisant agir sur un état  $|\Phi\rangle$  écrit sous la forme:

$$|\Phi\rangle = \sum_l c_l |\alpha l\rangle \quad (3.12)$$

où  $|\alpha l\rangle$  est un état propre de  $\hat{P}^A$  avec la valeur propre  $l$  ( $\alpha$  spécifiant d'autres nombres quantiques éventuels).

On construit ainsi une fonction d'onde à bon nombre de particules à partir d'un état HFBCS  $|\Phi\rangle$  grâce à une double intégrale pour rétablir à la fois le nombre de neutrons et de protons:

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \exp(i\phi_N(\hat{N} - N)) d\phi_N \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \exp(i\phi_Z(\hat{Z} - Z)) d\phi_Z |\Phi\rangle \quad (3.13)$$

L'action de  $\exp(i\phi\hat{N})$  sur  $|\Phi\rangle$  peut s'écrire explicitement:

$$\begin{aligned} |\Phi(\phi)\rangle &= \exp(i\phi\hat{N})|\Phi\rangle \\ &= \exp(i\phi\hat{N}) \prod_k (u_k + v_k a_k^\dagger a_k^\dagger) |0\rangle \\ &= \prod_k (u_k + \exp(i\phi) v_k a_k^\dagger a_k^\dagger) |0\rangle \end{aligned} \quad (3.14)$$

Cette formule se démontre en développant  $\exp(i\phi\hat{N})$  et en ne retenant que les termes qui contribuent aux contractions, ce qui permet de faire réapparaître  $\exp(i\phi)$  dans chaque terme du produit.

La forme obtenue en 3.14 s'interprète simplement. La phase entre les solutions  $u$  et  $v$  des équations BCS est arbitraire. Le choix habituel consiste à prendre des  $u$  et  $v$  positifs, mais n'importe quel autre choix de phase conduit à des fonctions HFBCS dégénérées en énergie. La restauration du bon nombre de particules revient à mélanger les fonctions d'onde correspondant à tous les choix de phases possibles.

La restauration du bon nombre de neutrons et de protons revient à effectuer un calcul à deux coordonnées génératrices, les angles  $\phi_N$  et  $\phi_Z$ , avec des fonctions poids connues,  $\exp(i\phi_N N)$  et  $\exp(i\phi_Z Z)$ .

En pratique, les intégrales sur  $\phi$  sont discrétisées. Un choix judicieux de la discrétisation permet d'éliminer les composantes spurieuses de la fonction HFBCS ayant le poids le plus grand. Remarquons tout d'abord, au moyen de 3.12 que pour un noyau pair-pair, qui par construction ne comporte que des composantes à nombre pair de particules, on a:

$$\exp(i\pi\hat{N})|\Phi\rangle = |\Phi\rangle \quad (3.15)$$

et les intégrales intervenant dans l'équation 3.14 se réduisent à des intégrales de 0 à  $\pi$ . Discrétisons cette intégrale au moyen de  $M$  points équidistants de 0 à  $(M-1)\pi$ . Le pas choisi est donc

$$\Delta\phi = \frac{\pi}{M} \quad (3.16)$$

On obtient ainsi (en se limitant pour simplifier l'écriture, à un seul type de particules):

$$|\Psi_Z\rangle = \sum_{l,n} c_l \exp(i\Delta\phi(l-Z)n) |\alpha l\rangle \quad (3.17)$$

La somme sur  $n$  est la somme des termes d'une progression géométrique qui se réécrit:

$$|\Psi_Z\rangle = \sum_l c_l \frac{1 - \exp(i\pi(l-Z))}{1 - \exp(i\Delta\phi(l-Z))} |\alpha l\rangle \quad (3.18)$$

ce qui donne 0 pour les composantes ayant un nombre de particules  $l$  différent de  $Z$  de 2 jusqu'à  $2M$  particules.

Remarquons enfin que cette méthode permet de projeter une fonction d'onde HFBCS non seulement sur le nombre de particules moyen imposé dans la résolution



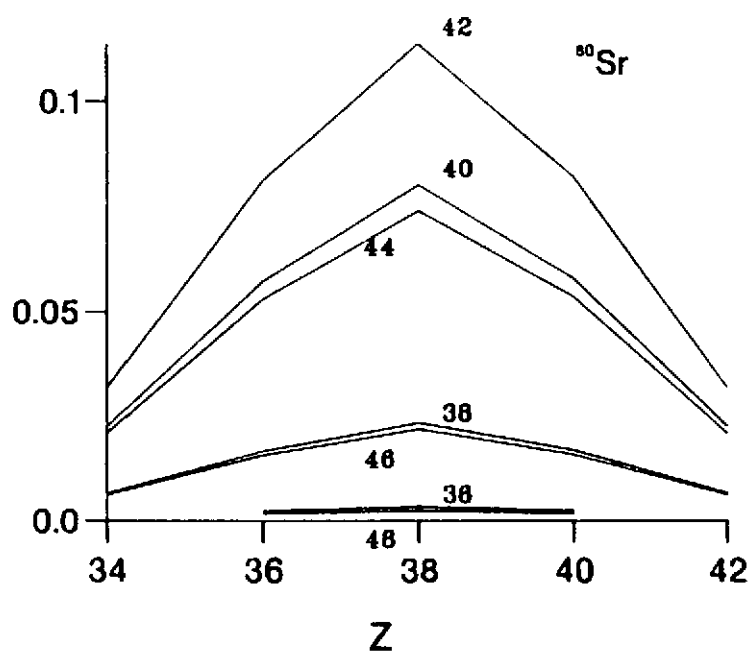


Figure 8

Coefficients de la décomposition de la fonction d'onde du  $^{80}\text{Sr}$  HFBCS correspondant à une déformation quadrupolaire allongée de 1b, en fonction des états à bon nombre de protons (en abscisse) et de neutrons.

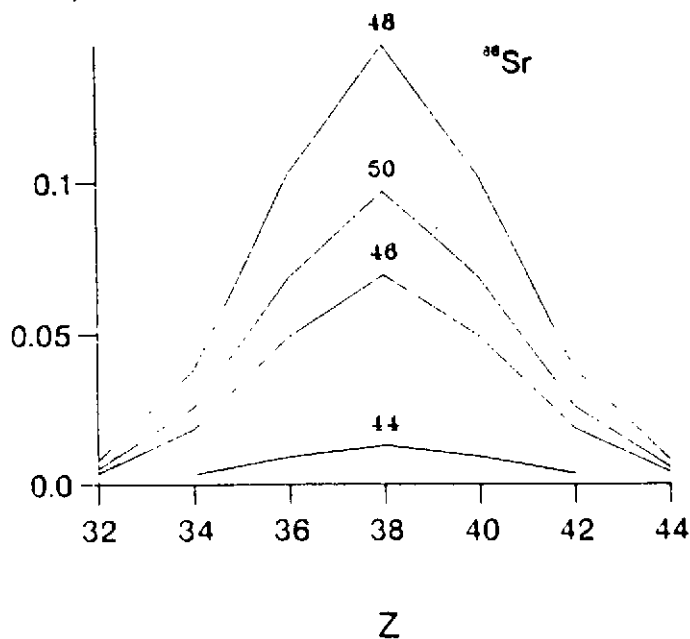


Figure 9

Même légende que la figure 8, pour une fonction d'onde du  $^{86}\text{Sr}$  de moment quadrupolaire aplati de 1b

des équations BCS, mais aussi sur n'importe quel autre nombre de particules de même parité. Cette propriété a été utilisée pour déterminer les poids des différentes composantes de fonctions d'onde de deux isotopes du Sr, qui sont portés sur les dessins des figures 8 et 9. Sur ces figures, on voit que le poids de la composante de la fonction d'onde à bon nombre de particules n'est que légèrement supérieur à 10%. La répartition des poids est à peu près symétrique par rapport à son maximum pour le  $^{80}\text{Sr}$ : les composantes à 40 et 44, 38 et 46,... neutrons ont des poids très proches quel que soit le nombre de protons, la même propriété se vérifiant pour les composantes protons. On a ainsi une illustration simple de la façon dont le bon nombre de particules est obtenu, par compensation des erreurs dues aux noyaux situés symétriquement par rapport au noyau étudié. Ceci montre aussi que d'autres grandeurs, comme l'énergie ou le rayon carré moyen sont une moyenne entre de nombreuses composantes à nombre de particules différent de celui étudié. Des grandeurs variant de façon très rapides avec le nombre de particules seront difficilement reproduites par un méthode de champ moyen sans restauration de symétrie.

La décomposition de la fonction d'onde du  $^{86}\text{Sr}$  (qui a 48 neutrons) montre un autre phénomène intéressant: l'influence d'une fermeture de couche. A cause de la fermeture à  $N = 50$ , le poids des composantes à plus de 50 neutrons est tout à fait négligeable. La symétrie observée dans le cas du  $^{80}\text{Sr}$  n'apparaît plus pour les neutrons, et le bon nombre de neutrons est obtenu par des compensations plus subtiles entre les différentes composantes. Ceci peut avoir un effet non négligeable sur l'énergie et le rayon carré moyen du noyau et explique que HFBCS soit souvent moins précis près des fermetures de couche.

Nous avons jusqu'à présent parlé de projection de fonctions d'onde obtenues en résolvant les équations HFBCS. Le point de départ de cette méthode est la minimisation de l'énergie:

$$E = \frac{\langle \Phi | \hat{H} | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle} \quad (3.19)$$

sur l'ensemble des fonctions HFBCS à bon nombre moyen de particules. On extrait de la solution  $|\Phi\rangle$  une fonction à bon nombre de particules en utilisant 3.13 et l'énergie est déterminée à partir de la fonction d'onde projetée:

$$E = \frac{\langle \Phi | \hat{H} \hat{P}^{N,Z} | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \hat{P}^{Z,N} | \Phi \rangle} \quad (3.20)$$

en tenant compte du fait que le projecteur  $\hat{P}^{N,Z}$  commute avec le hamiltonien et qu'il ne faut donc projeter que le ket. Une telle procédure est appelée une variation avant projection (VAP).

D'un point de vue variationnel, cette méthode n'est pas satisfaisante. Rien n'assure en effet que la projection d'une autre fonction BCS, qui ne serait pas solution des équations HF ne conduirait pas après projection à une énergie plus

basse. Un calcul plus exact consiste à varier  $3.20$ , c'est à dire l'expression de l'énergie calculée sur des fonctions d'onde déjà projetées, ce qui conduit à un calcul de variation après projection (VAP). Les calculs de VAP sont souvent appelés dynamiques car ils vont au delà de l'approximation à un seul Slater (ou fonction d'onde à quasi particules).

Un exemple illustre bien les problèmes que peut poser une variation avant projection. La figure 10 reprend la variation des énergies de particules individuelles obtenues pour le  $^{80}\text{Sr}$  en fonction du moment quadrupolaire. Ces courbes sont les équivalents microscopiques des courbes de Nilsson habituelles.

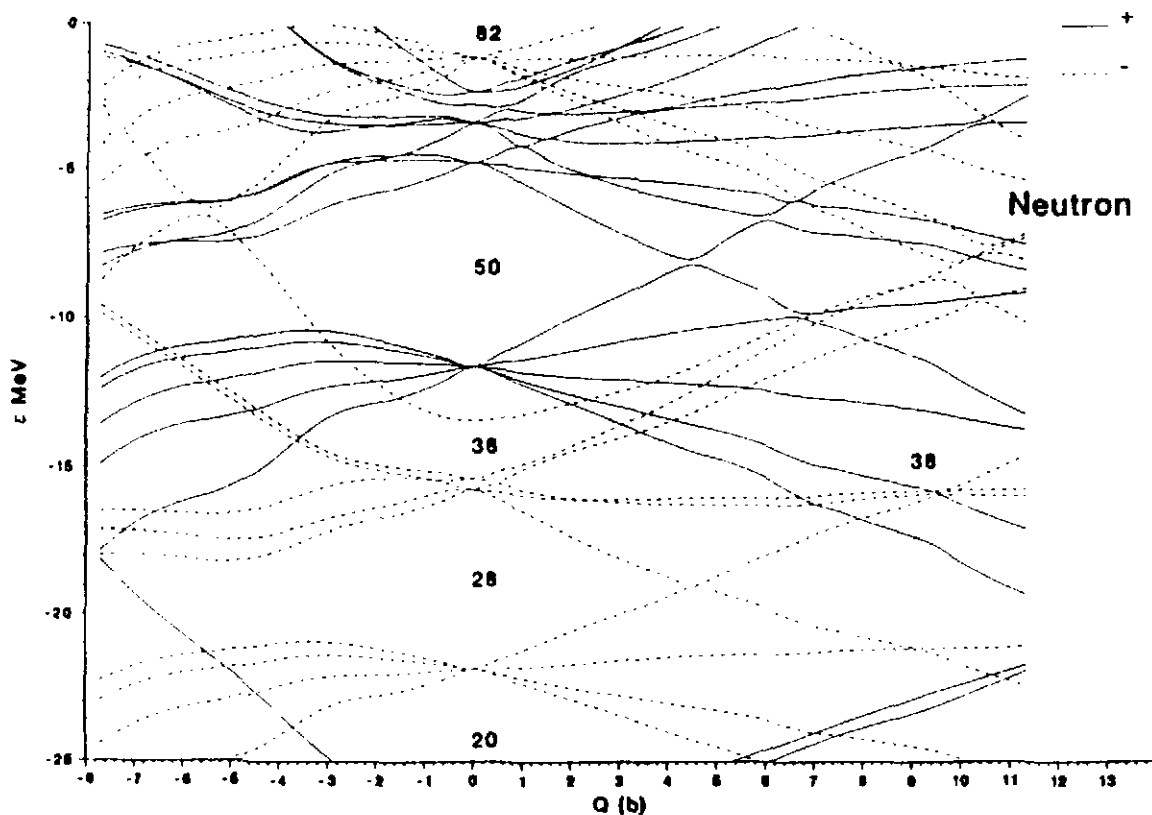


Figure 10

Variation, en fonction du moment quadrupolaire axial, des énergies de particules individuelles neutrons calculées par HFBCS pour le  $^{80}\text{Sr}$ . Les nombres repris sur la figure indiquent les régions à faible densité de niveaux.

En fonction du moment quadrupolaire axial, on voit apparaître entre  $6b$  et  $12b$  une zone à faible densité de niveaux autour de  $N=40$ . Il en résulte que le pairing se déconnecte pour des déformations de cet ordre de grandeur. L'énergie HFBCS est bien sûr continue, puisque ce n'est que lorsque l'énergie sans pairing est plus basse que le pairing se déclanche. On passe à ce moment là d'une fonction d'onde BCS qui n'a pas le bon nombre de particules à une fonction purement

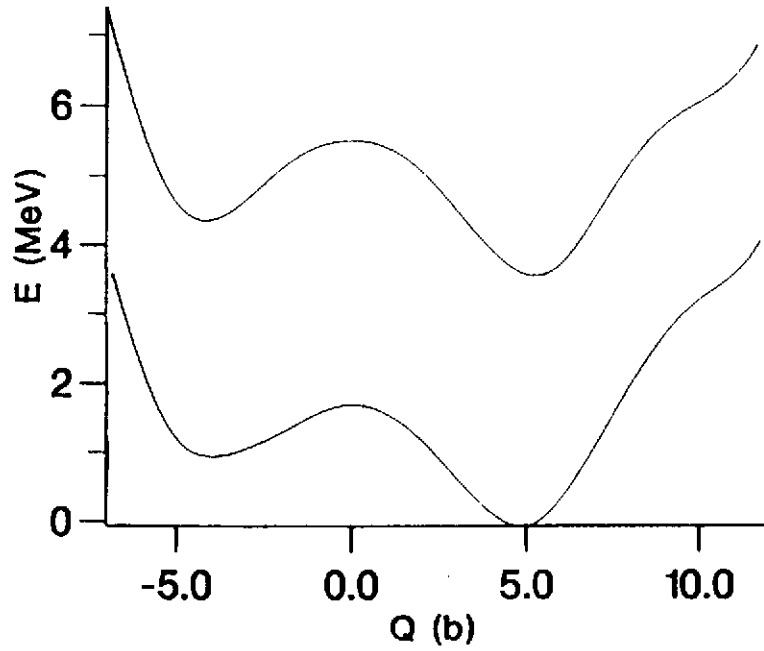


Figure 11

Variation en fonction du moment quadrupolaire axial de l'énergie HFBCS et de l'énergie obtenue en projetant après variation par la méthode de Lipkin Nogami des fonctions d'onde du  $^{96}\text{Zr}$ . Le minimum projeté a été choisi comme zéro de l'énergie.

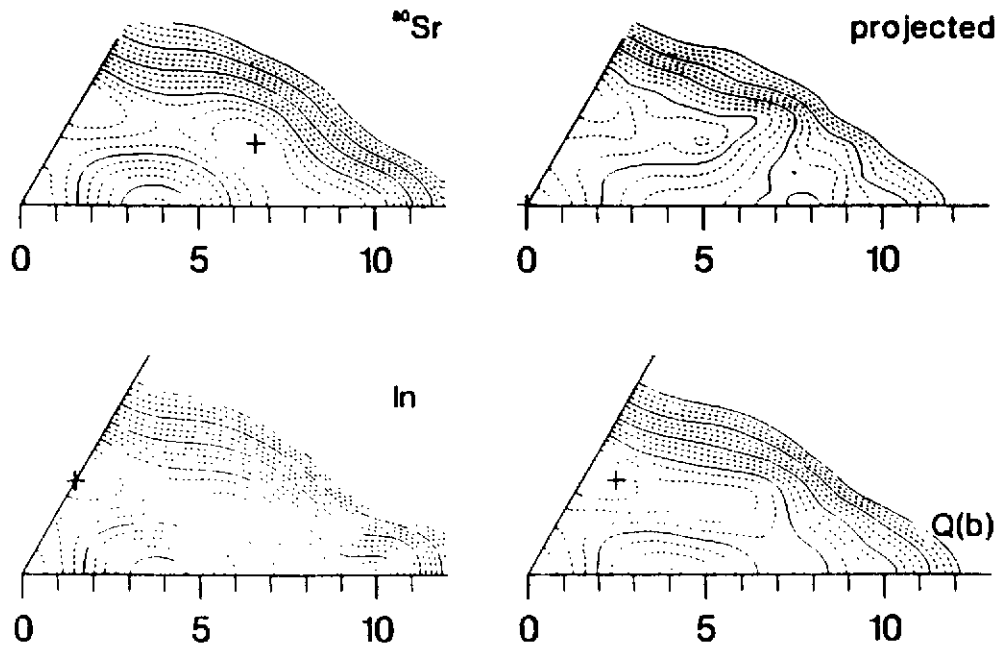


Figure 12

Variation de l'énergie du  $^{80}\text{Sr}$  en fonction du moment quadrupolaire triaxial. A gauche, en haut, est portée l'énergie HFBCS et en bas l'énergie obtenue par la méthode de Lipkin Nogami sans projection. Sur la partie droite sont portées les énergies projetées obtenues à partir des fonctions d'onde de la partie gauche.

Hartree-Fock qui l'a. La projection sur le bon nombre de particules permettra donc dans le premier cas d'abaisser l'énergie totale, tandis qu'elle n'aura aucun effet dans second. L'énergie obtenue par projection après variation présentera ainsi une discontinuité à l'endroit où le pairing se déconnecte.

Un calcul exact de variation après projection est difficile à mettre en oeuvre dans le plupart des cas. Des méthodes approchées de VAP ont été proposées pour la projection sur le moment angulaire ou le bon nombre de particules (méthode de Lipkin Nogami, cranking self consistent,...)

Sur la figure 11 est reprise l'énergie du  $^{96}\text{Zr}$  calculée en fonction du moment quadropolaire axial par HFBCS et par une variation après projection sur le bon nombre de particules (la variation est faite par la méthode approchée proposée par Lipkin et Nogami). On voit que la projection n'affecte pas fortement les conclusions que l'on peut tirer du calcul HFBCS. L'effet de la projection est essentiellement un abaissement général de l'énergie d'environ 3.5MeV. La barrière entre les deux minima n'est pas sensiblement modifiée.

La figure 12 montre la variation de l'énergie du  $^{80}\text{Sr}$  en fonction du moment quadropolaire triaxial obtenue par HFBCS, en projetant directement les fonctions d'onde HFBCS ou en utilisant la méthode VAP approchée de Lipkin Nogami. On voit que la surface projetée obtenue directement à partir des fonctions d'onde HFBCS présente d'importantes irrégularités, liées à la disparition du pairing pour des déformations de l'ordre de 6 à 9b et des angles d'assymétrie  $\gamma$  entre 0 et 20 degrés. Lorsque l'on utilise la méthode de Lipkin Nogami, ces irrégularités disparaissent et la surface obtenue est beaucoup plus proche de la surface HFBCS. Le  $^{80}\text{Sr}$  se trouve dans une région de la table de masse où la déformation varie très rapidement avec le nombre de neutrons. Le  $^{78}\text{Sr}$  est un noyau bien déformé avec un état intrinsèque de déformation de l'ordre de 8b, tandis que les isotopes plus lourds sont influencés par la fermeture de couche à  $N=50$  et ne présentent pas minima très déformés. On voit que la projection sur le nombre de particules élimine l'influence de la fonction d'onde du  $^{78}\text{Sr}$  sur la déformation de l'état non projeté et ramène le fondamental du  $^{80}\text{Sr}$  vers des déformations plus faibles.

### 3.4. Projection sur le moment angulaire

La restauration d'un bon moment angulaire pour une fonction d'onde sans symétrie axiale nécessite une intégration sur trois angles d'Euler:

$$|\Psi^{JM}\rangle = \sum_K g_K \int d\Omega D_{KM}^J \hat{R}(\Omega) |\Phi\rangle \quad (3.21)$$

où  $D_{KM}^J$  est une matrice de rotation de Wigner. L'intégration sur trois angles d'Euler est numériquement très lourde et la projection sur le moment angulaire n'a été effectuée que dans quelques problèmes où des interactions nucléaires simples sont utilisées.

La figure 13 montre un résultat intéressant obtenu en projetant des fonctions HFB sur le moment angulaire<sup>10)</sup>. Dans le cas de l' $^{168}\text{Er}$ , la surface d'énergie quadrupolaire est abaissée d'environ 2.5 MeV, ce qui correspond au gain en énergie auquel on s'attend d'après l'équation (1). Cependant, ce gain est à peu près le même pour tous les moments quadrupolaires et la topologie de la surface n'est pas fortement modifiée par la projection. Dans ce cas, les prédictions champ moyen sont donc fiables. Il en est tout autrement pour l' $^{188}\text{Os}$ , pour lequel les calculs HFB indiquent une très grande instabilité en fonction de  $\gamma$ . Dans ce cas, l'effet de la projection sur le moment angulaire est beaucoup plus grand pour les configurations triaxiales que pour les autres et la surface projetée présente un minimum marqué pour un angle de l'ordre de 30 degrés.

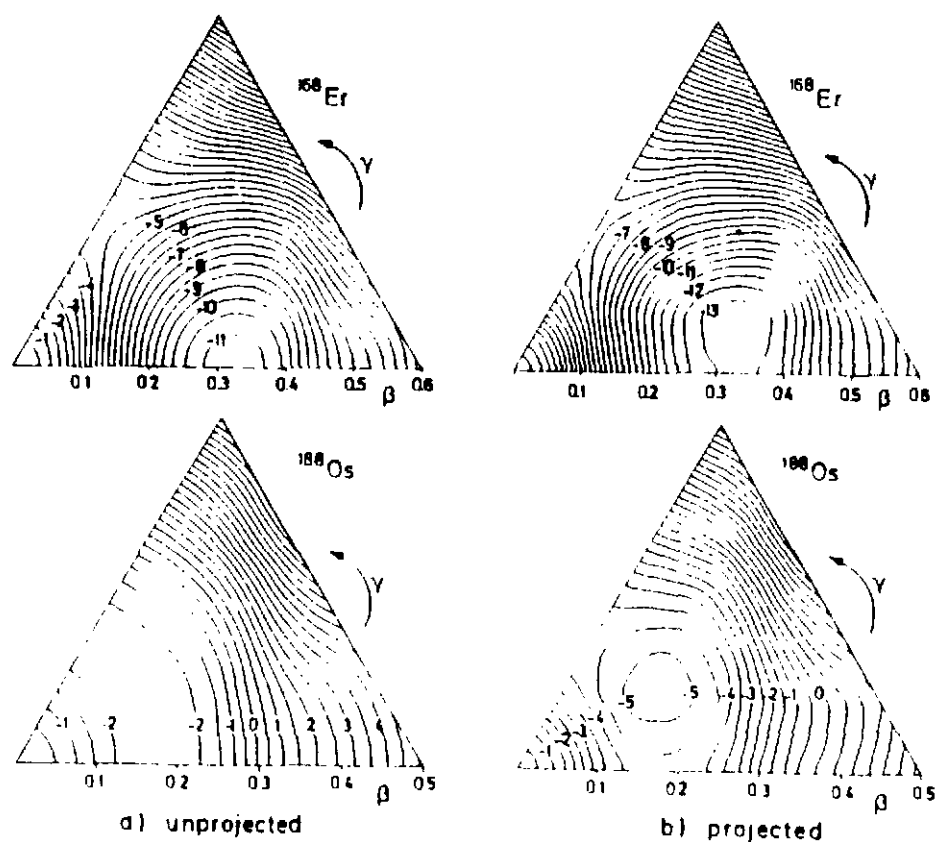


Figure 13

Carte de variation de l'énergie de déformation des noyaux  $^{168}\text{Er}$  et  $^{188}\text{Os}$  (d'après <sup>10)</sup>)

#### 4. Les déformations octupolaires

Les spectres nucléaires associés aux déformations octupolaires <sup>11)</sup> (ainsi qu'à toutes déformations impaires de la densité nucléaire) présentent des caractéristiques différentes de ceux des noyaux ne présentant que des déformations quadrupolaires (ou de façon plus générale des déformations paires). Dans ce dernier cas, la bande fondamentale des noyaux pair-pair présente une succession d'états de spin pair et de parité plus. Des états de parité négative et de spin impair se trouvent éventuellement à des énergies de l'ordre de 1 à 2 MeV et sont généralement expliqués par des excitations à deux quasi-particules. Les noyaux présentant des déformations octupolaires possèdent en plus d'une bande de parité positive une bande de parité négative à basse énergie d'excitation, les deux bandes étant reliées par de fortes transition E1.

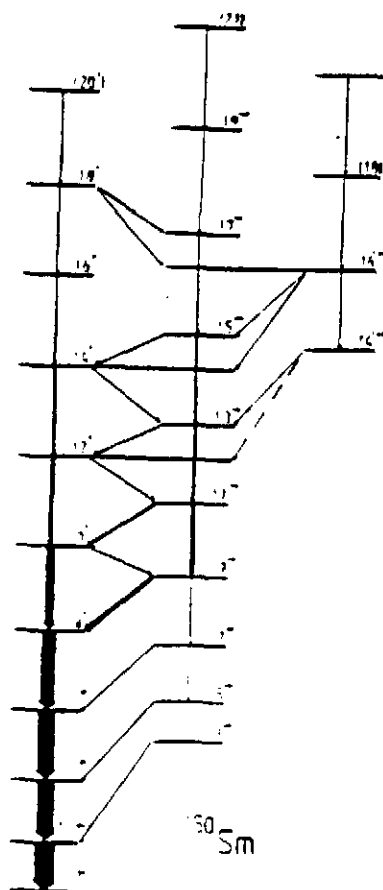


Figure 14

Schéma de niveaux partiel du <sup>150</sup>Sm <sup>12)</sup>

Le spectre du <sup>150</sup>Sm <sup>12)</sup>, repris sur la figure 14, est une bonne illustration de l'existence de déformations octupolaires. Dans ce spectre, coexistent des états

des deux parités, fortement reliés entre eux par des transitions électromagnétiques. L'état  $1^-$  n'est pas connu et la bande de parité négative débute par un état  $3^-$  situé à une énergie légèrement supérieure au  $4^+$ . Les différences d'énergie entre les états des deux parités diminuent avec le spin de telle sorte qu'à partir du  $12^+$ , les états de parité moins sont situés approximativement à mi distance des états de parité plus. D'autres noyaux présentent des caractéristiques similaires. Remarquons cependant qu'aucun noyau ne présente un état  $1^-$  à une énergie inférieure au  $2^+$  et que la succession régulière des états des deux parités s'établit en général pour un spin de l'ordre de 7 ou 8.

Les transitions E1 importantes entre des états des deux parités, ainsi que les énergies relatives de ces états, suggèrent qu'ils peuvent être construits à partir d'un même état intrinsèque. Ceci suppose que cet état intrinsèque n'a pas une bonne parité et donc que la densité nucléaire possède des déformations d'ordre multipolaire impaire.

Une des conséquences des déformations octupolaires est que les transitions électriques impaires (E1 et E3) sont fortement augmentées. La figure 15 (d'après <sup>13</sup>) reprend la variation expérimentale des  $BE3(0_1^+ \rightarrow 3_1^-)$  ( $M(E3)^2$  est proportionnel à  $BE3$ ) en fonction du nombre de neutrons. Cette figure permet de délimiter les régions de la table de masse dans lesquelles on a le plus de chances de trouver des déformations octupolaires. Les régions de la table de masse particulièrement favorisées correspondent à des nombres de particules de l'ordre de 34 (région des Ge et Se), 56 (Zr), 88 (Ba et Sm), 134 (Ra et Th).

Le mécanisme à l'origine de l'apparition des déformations octupolaires peut se comprendre facilement à l'aide d'orbitales de Nilsson. Ces déformations apparaissent lorsque des orbitales différents de 3 unités de moment angulaire deviennent voisines près du niveau de Fermi. Ces orbitales seront alors couplées par une interaction en  $Y_3^m$ . Les régions de la table de masse où ces orbitales jouent un rôle particulier apparaissent clairement sur la figure 16. Elles confirment les zones déduites de la figure 15.

La figure 17 montre une surface d'énergie de déformation en fonction des moments octupolaire et quadrupolaire axial obtenue pour le  $^{96}\text{Zr}^{16}$ ). La surface a été obtenue à l'aide de la méthode de Strutinsky et d'un champ moyen paramétrisé par un Saxon-Woods. Le résultat obtenu par cette méthode semi-microscopique est semblable à ceux obtenus par HFBCS et typique des déformations octupolaires. La surface d'énergie est très molle en fonction de  $\beta_3$ . Le minimum obtenu pour une petite déformation octupolaire diffère de moins de 500 keV de la configuration symétrique que. Les déformations octupolaires constituent donc un cas typique où une approche champ moyen n'est pas suffisante et où il est nécessaire d'utiliser la GCM.

La figure 18 montre pour le même noyau la variation de l'énergie obtenue à moment quadrupolaire nul en fonction du moment octupolaire par HFBCS. Le minimum est ici à  $Q_3$  nul, mais l'énergie varie de moins de 100keV jusqu'à  $500\text{fm}^3$ .



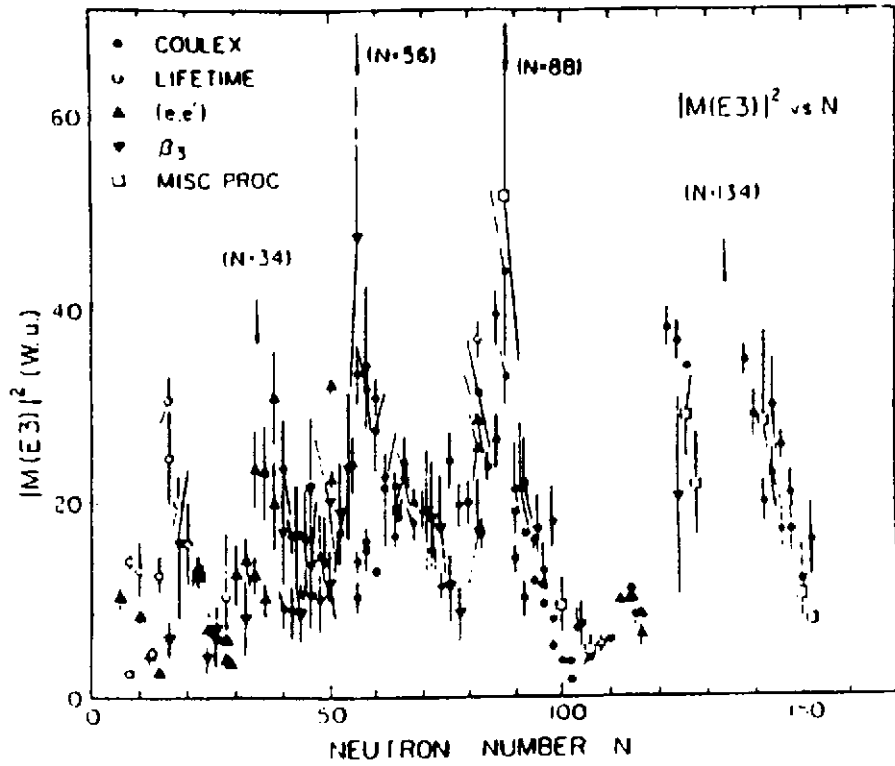


Figure 15

Variation de l'amplitude E3, ( $M(E3)^2$ ), en W.u., en fonction du nombre de neutrons.

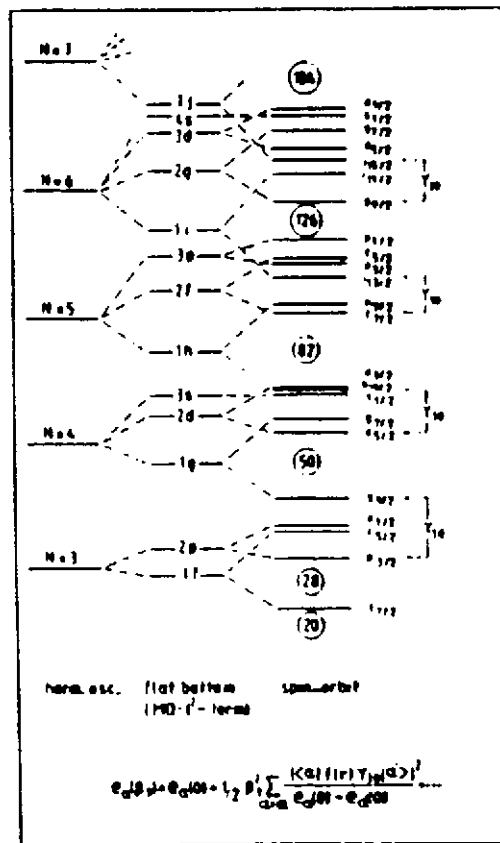


Figure 16

Etats individuels couplés par  $Y_3^0$  dans un potentiel de Nilsson <sup>14)</sup>.

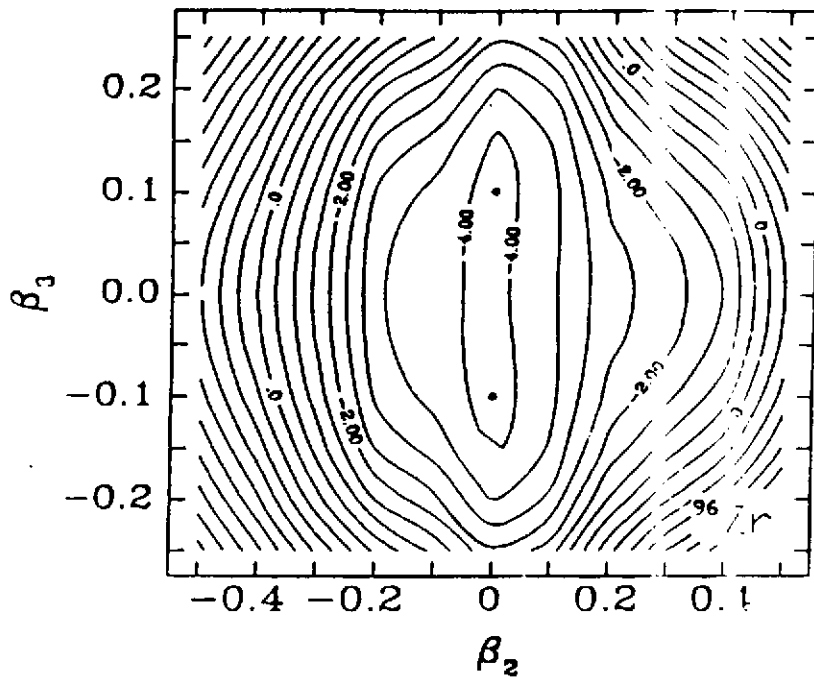


Figure 17

Surface d'énergie du  $^{96}\text{Zr}$  obtenue en fonction des déformations quadrupolaire axiale et octupolaire par la méthode de Strutinsky (d'après <sup>15</sup>).

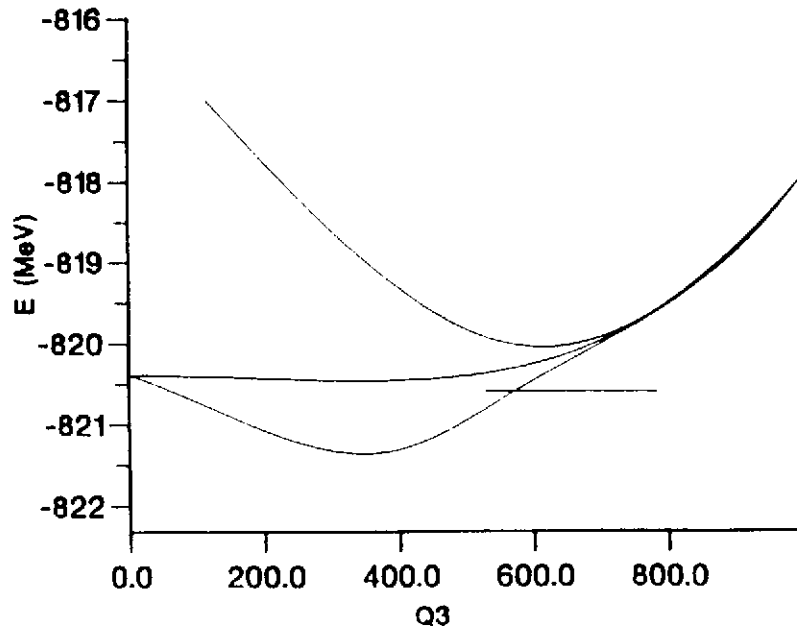


Figure 18

Energies HFBCS, et projetées sur la parité du  $^{96}\text{Zr}$  obtenues en fonction de  $Q_3$ . L'état GCM de parité plus est situé sur l'axe des abscisses, et l'état de parité moins est représenté par une ligne horizontale.

Pour chaque valeur de  $Q_3$ , il est possible de restaurer la parité et d'obtenir au moyen de 3.5 deux états de parité plus et moins. Les courbes obtenues ainsi sont reprises sur la figure. Pour  $Q_3 = 0$ , les énergies des états HFBCS et de parité plus sont égales, l'énergie de la parité moins étant indéfinie (on peut en fait calculer la vraie valeur correspondant au rapport de deux 0 obtenus par 3.5 pour la parité moins à  $Q_3 = 0$ ; on obtient ainsi une énergie égale à la promotion d'un nucléon dans la première couche de parité moins vide). A grand moment octupolaire (ici supérieur à  $800 \text{ fm}^3$ ), les trois courbes sont confondues, le recouvrement entre fonction à  $\pm Q_3$  devenant très petit. Les courbes des deux parités présentent des minima pour des moments octupolaires différents de zéro, le minimum de parité moins présentant une plus grande déformation. Ces deux courbes permettent déjà de tirer plusieurs conclusions:

- La projection sur la parité de fonctions d'onde HFBCS peut faire apparaître des minima alors que la courbe HFBCS n'en a pas. Ces minima sont souvent appelés dynamiques (parce qu'ils apparaissent lorsque l'on va au-delà de l'approximation à un Slater).

- Les courbes de parités plus et moins possèdent le plus souvent des minima pour des déformations octupolaires différentes, le minimum de parité moins apparaissant à plus grande déformation, à cause de sa limite élevée pour  $Q_3 = 0$ . On s'attend à ce que cette différence se traduise par des moments d'inertie différents pour les bandes de rotation construites sur les deux états intrinsèques. Cette propriété est en accord avec les données expérimentales, la bande de parité moins ayant souvent à bas spin un plus grand moment d'inertie.

- La différence entre les énergies des minima des deux parités peut être comparée à l'énergie d'excitation du premier état de parité moins expérimental. Dans le cas du  $^{96}\text{Zr}$  et du calcul repris sur la figure 18, l'accord entre la théorie et l'expérience est bon.

- Les énergies des états projetés sont portées en fonction de  $Q_3$ . Il faut cependant se souvenir que la valeur moyenne de  $Q_3$  est nulle pour tout état de bonne parité (puisque c'est la valeur moyenne d'un opérateur impair par parité). Les éléments de matrice de transition dipolaires et octupolaires ne sont non nuls qu'entre les états intrinsèques des deux parités.

- La remarque précédente permet de préciser la signification des minima observés en fonction de  $Q_3$  pour les courbes des deux parités. Les valeurs de  $Q_3$  auxquelles sont situés ces deux minima ne sont pas liées à des déformations des têtes de bande des deux parités, puisque celles ci sont nulles. Elles donnent plutôt une mesure de l'amplitude des fluctuations octupolaires présentes dans la fonction d'onde collective.

- Les minima obtenus pour les deux parités à des déformations octupolaires différentes indiquent les limites de l'image d'un état intrinsèque unique décrivant les bandes rotationnelles des deux parités.

Sur la figure 18 sont aussi reprises les énergies des deux premiers états obtenus par la GCM en considérant  $Q_3$  comme coordonnée génératrice (avec  $Q_2$  fixé à zéro). L'origine a été prise à l'énergie de la première valeur propre qui est de parité plus. On voit que les différences entre les énergies des deux bandes calculées par la GCM et la projection sur la parité sont fort proches.

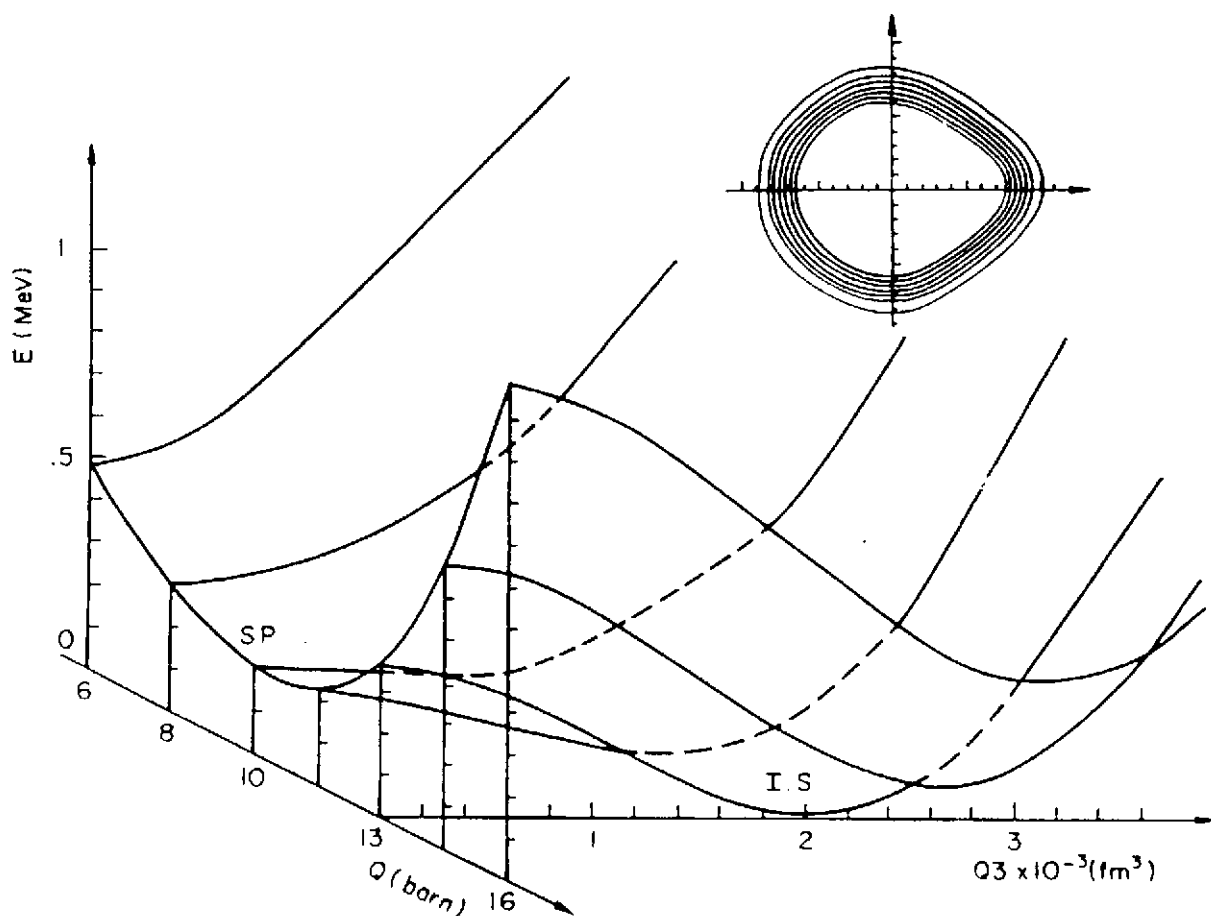


Figure 19

Variation de l'énergie HFBCS du  $^{222}\text{Ra}$  en fonction des moments quadrupolaire axial et octupolaire. L'interaction de Skyrme Skm' a été utilisée.

La figure 19 présente un exemple typique où imposer des symétries à la densité nucléaire peut amener à des conclusions erronées<sup>17)</sup>. Le noyau étudié est le  $^{222}\text{Ra}$ , qui se trouve dans une zone de la table de masse où on s'attend à trouver des déformations octupolaires puisque ce noyau possède 134 neutrons. Si, en imposant à la fonction d'onde totale d'avoir une bonne parité, on empêche l'apparition de déformations octupolaires, on obtient la courbe d'énergie de déformation en fonction du moment quadrupolaire axial dessinée à  $Q_3=0$ . sur la figure 19. Elle

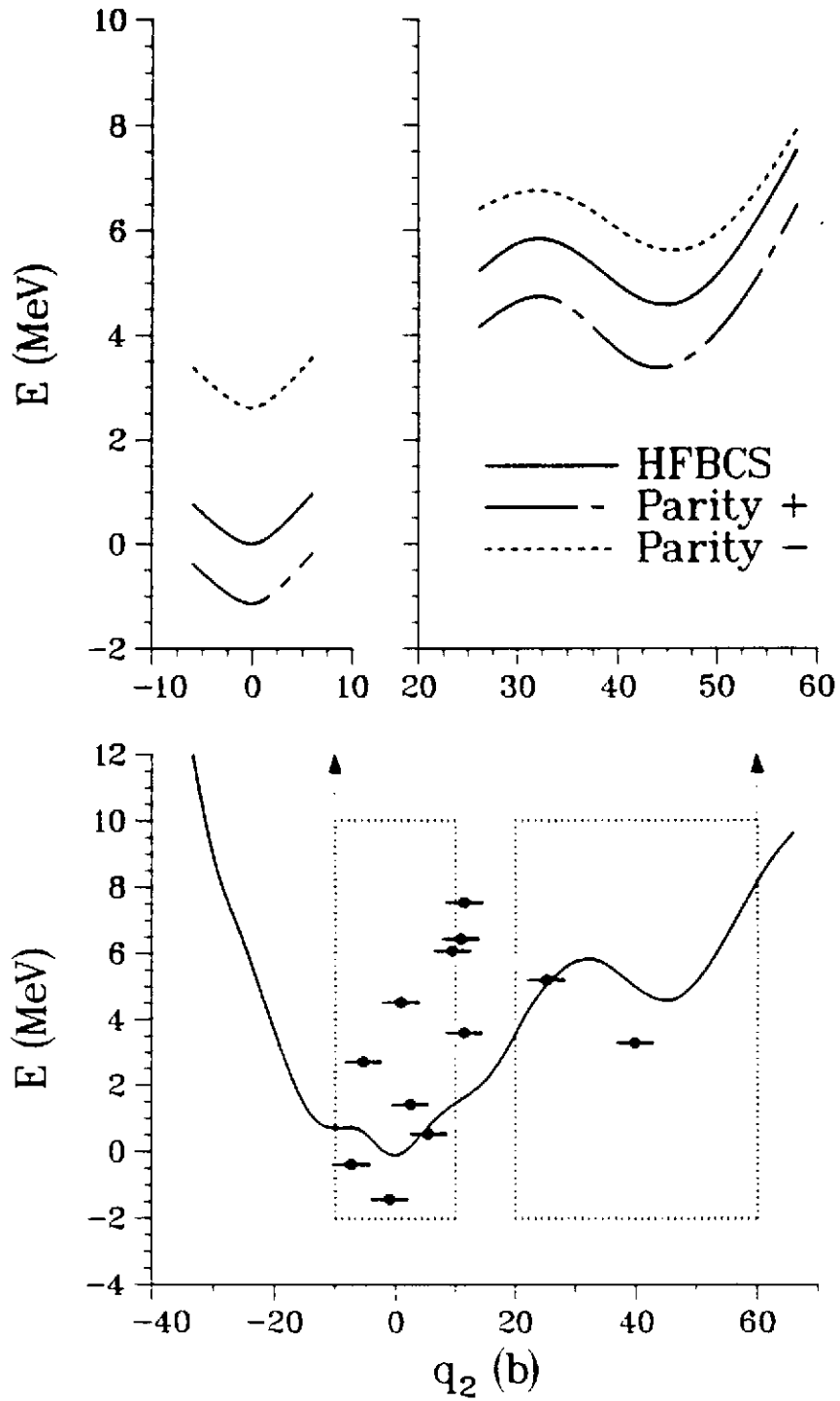


Figure 20

Courbe d'énergie de déformation HFBCS du  $^{194}\text{Pb}$  en fonction du moment quadrupolaire axial, avec indication des états GCM (partie inférieure). Dans la partie supérieure sont repris les minima obtenus en fonction de  $Q_3$  pour chaque valeur de  $Q_2$ , dans la zone de déformation du fondamental et de l'état SD.

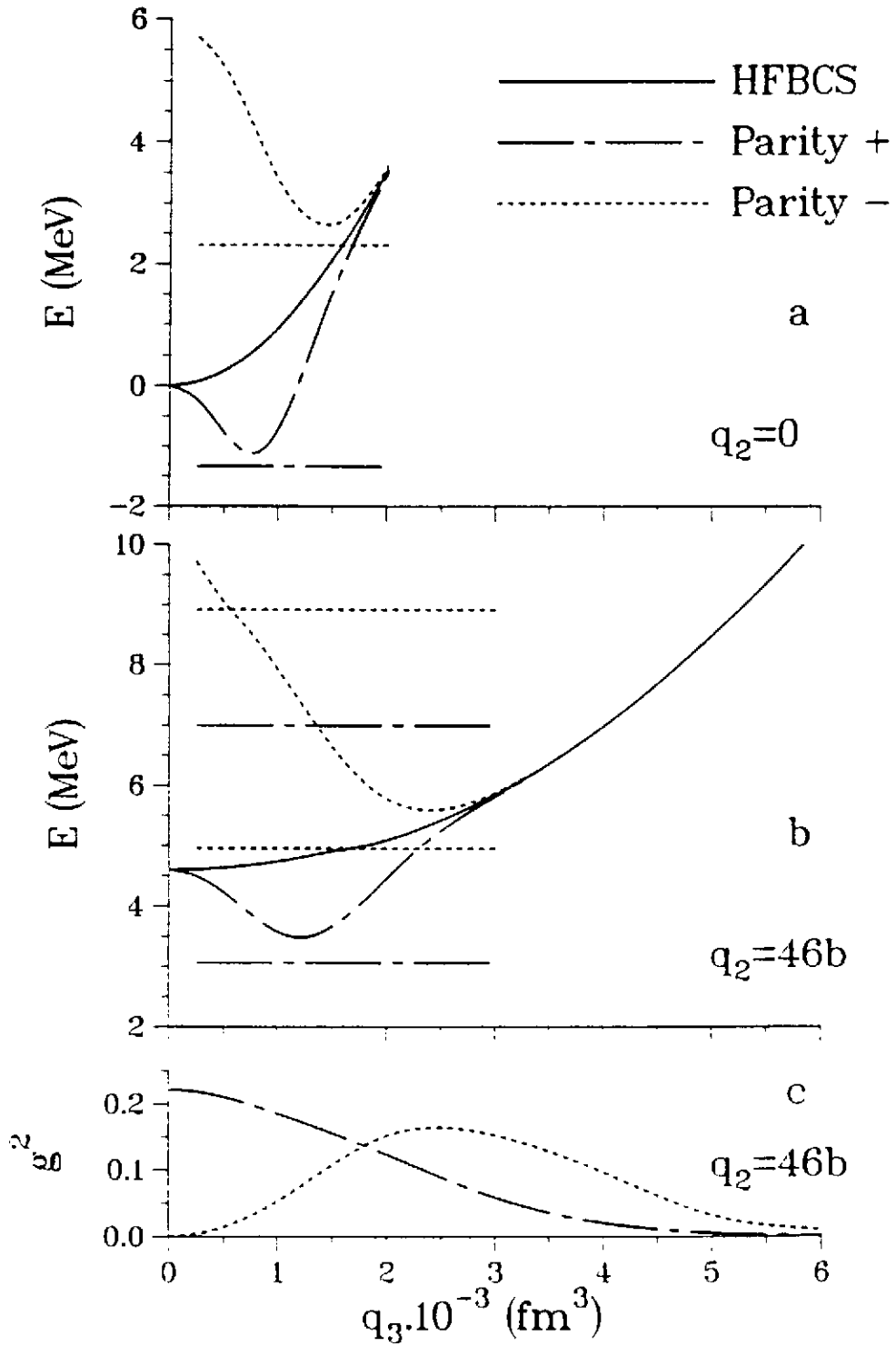


Figure 21

Courbes d'énergie de déformation octupolaire du  $^{194}\text{Pb}$  pour (a)  $Q_2=0$ , (b) la déformation de l'état SD. En trait plein, est donnée l'énergie HFBCS, en trait d'axe la parité plus et la parité moins en pointillé (courbes projetées et états GCM). Dans la partie (c) sont représentées les fonctions d'onde des deux parités.

présente un minimum pour un moment quadrupolaire de l'ordre de 10b. Lorsque l'on permet des déformations octupolaires, ce minimum devient un point selle. Le minimum absolu ne s'obtient cependant pas pour la même valeur de  $Q_2$ , mais pour une valeur plus grande (13b). La densité nucléaire au minimum absolu est dessinée également sur cette figure. L'effet des déformations octupolaires se voit clairement sur les lignes de niveau.

Les figures 20 à 23 reprennent un ensemble de résultats obtenus dans l'étude de l'effet des déformations octupolaires sur la superdéformation du  $^{194}\text{Pb}^{18}$ .

Le bas de la figure 20 montre le résultat d'un calcul GCM avec le moment quadrupolaire axial comme coordonnée génératrice unique. Le fondamental HFBCS est sphérique, la valeur moyenne de  $Q_2$  pour le fondamental GCM étant également nulle. Le cinquième état GCM possède une déformation proche de l'état HFBCS SD.

Sur le haut de la figure, la variation de l'énergie HFBCS en fonction de  $Q_2$  est comparée aux courbes reprenant pour chaque valeur de  $Q_2$  les minima obtenus en fonction de  $Q_3$  pour les deux parités. Le moment octupolaire varie donc le long de ces deux dernières courbes. Les courbes des deux parités sont, entre 26b et 46b, en première approximation globalement décalée d'un peu plus d'un MeV par rapport à la courbe intrinsèque. En particulier, le moment quadrupolaire des états SD et les hauteurs de barrière des deux parités sont très proches. Par contre, l'énergie d'excitation de l'état SD par rapport à l'état du premier puits de même parité est plus faible pour la parité négative que pour la positive. On peut donc s'attendre à ce que la probabilité de désexcitation vers le premier puits soit plus faible pour la parité négative.

La figure 21 reprend les résultats obtenus par la GCM avec  $Q_3$  comme coordonnée génératrice, pour les valeurs de  $Q_2$  correspondant au fondamental et à l'état SD. La variation de l'énergie en fonction de  $Q_3$  est beaucoup plus rapide pour les petites déformations que pour les grandes. Pour un moment quadrupolaire correspondant au fondamental, l'état de parité moins est obtenu à une énergie d'excitation de plus de 3 MeV. Cette énergie est nettement plus basse pour l'état superdéformé (environ 2MeV), ce qui s'explique par la différence de mollesse en  $Q_3$  entre les petites et les grandes déformations. Les fonctions d'onde des deux parités sont aussi indiquées sur cette figure. On voit que la fonction d'onde de parité plus possède un maximum pour une déformation octupolaire nulle, mais s'étale jusqu'à de relativement grandes déformations. Le maximum de parité moins est bien sûr obtenu pour de grandes déformations.

Sur la figure 22 sont reprises les courbes d'énergie de déformation que l'on obtient en fonction de  $Q_2$  pour différente valeur de  $Q_3$ . Ces courbes s'étendent jusqu'à des déformations de l'ordre de 100b, ce qui permet de voir un troisième puits correspondant à ce que l'on appelle l'hyperdéformation. Les courbes obtenues en fonction de  $Q_3$  sont de plus en plus resserrées lorsque  $Q_2$  augmente. Pour la superdéformation, le minimum en  $Q_2$  se déplace vers de plus grandes valeurs pour

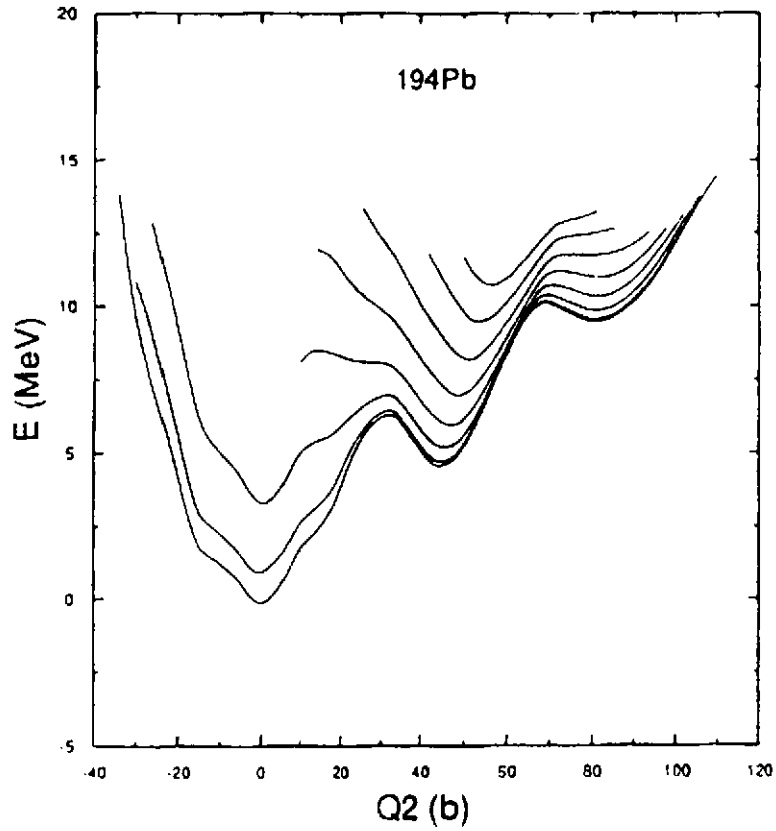


Figure 22

Courbes d'énergie de déformation HFBCS du  $^{194}\text{Pb}$  en fonction du moment quadrupolaire axial, obtenues pour différentes valeurs de  $Q_3$ , variant par pas de  $1000 \text{ fm}^3$ .

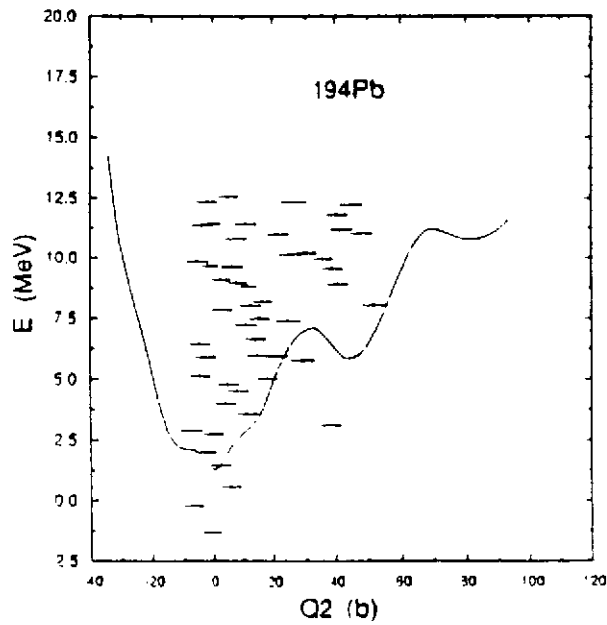


Figure 23

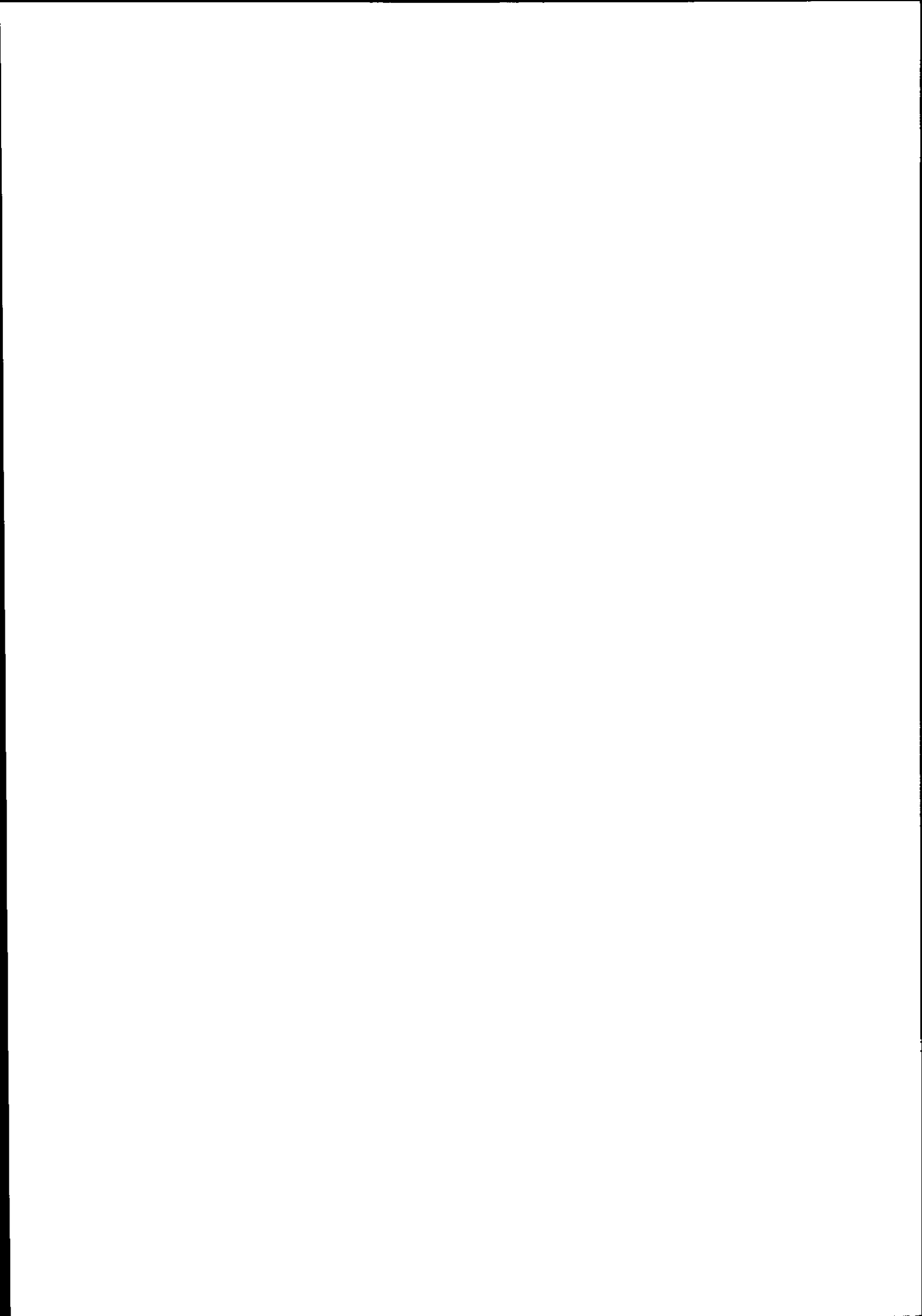
États GCM obtenus avec  $Q_2$  et  $Q_3$  (limité à  $2000 \text{ fm}^3$ ) comme coordonnées génératrices pour le  $^{194}\text{Pb}$ . Les états de parité négative sont repérés par des carrés noirs.

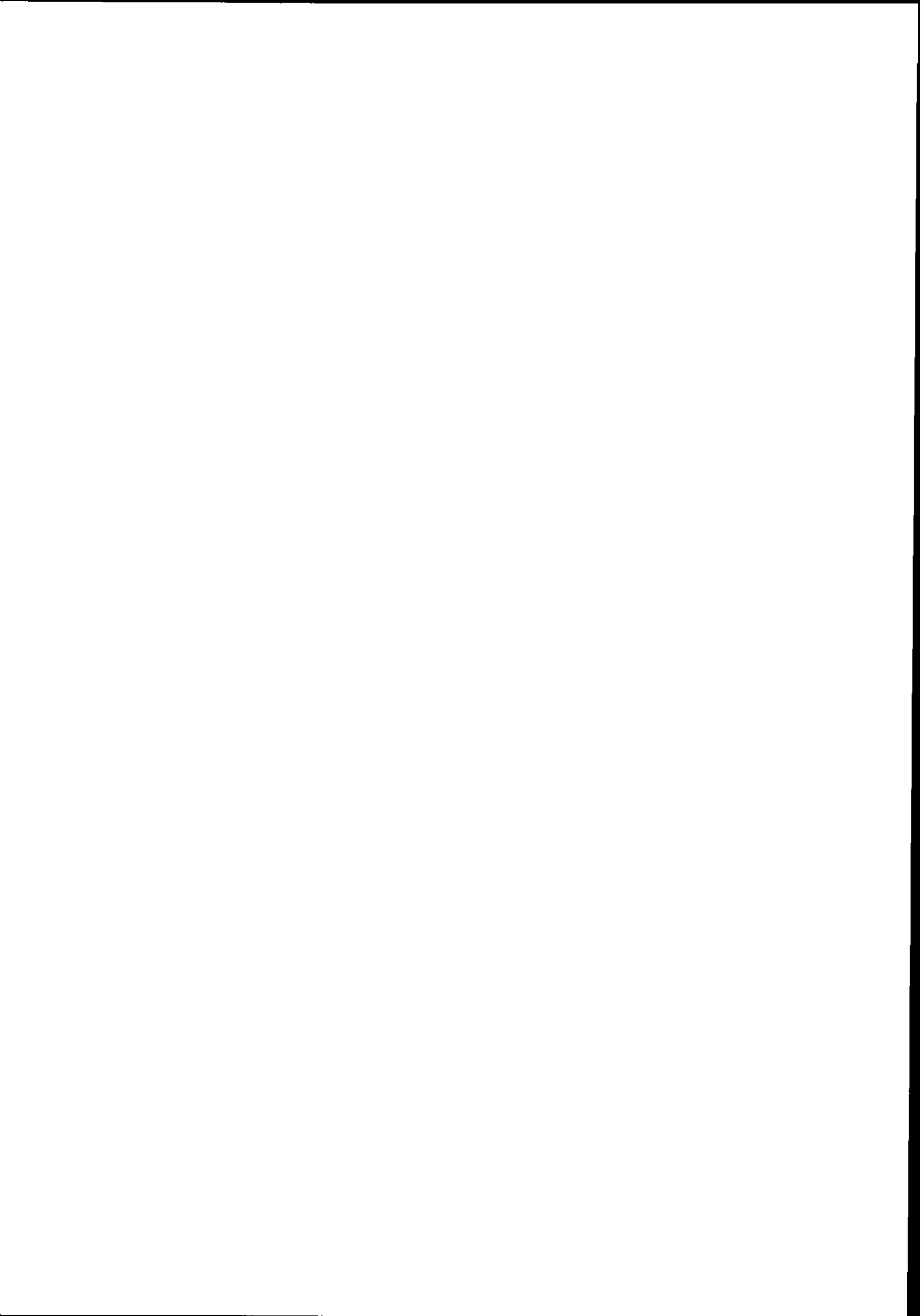


$Q_3$  augmentant.

Les résultats préliminaires d'un calcul GCM en  $Q_2$  et  $Q_3$  (pour  $Q_3 = 0, 1000$  et  $2000 \text{ fm}^3$ ) sont repris sur la figure 23. L'énergie d'excitation de l'état SD n'est pas significativement affectée par le couplage entre déformations quadrupolaire et octupolaire. Le premier état de parité négative du premier puits est obtenu à une énergie plus basse d'environ  $500 \text{ keV}$  par rapport à celui obtenu à  $Q_2 = 0$ , ce qui donne une mesure de l'importance du couplage entre les deux modes de déformation. Ce calcul préliminaire ne comprend pas encore suffisamment d'états HFBCS à grande déformation octupolaire pour tirer des conclusions définitives sur les propriétés de l'état SD de parité moins. Il montre cependant qu'il est aujourd'hui possible d'étudier au moyen de la GCM le couplage entre différents modes de déformation pour des noyaux aussi lourds que le Pb. Un calcul tel que celui-ci nécessite un pas de  $4b$  en  $Q_2$  et de  $1000 \text{ fm}^3$  en  $Q_3$ , soit plus de 200 fonctions d'onde HFBCS. Ce résultat illustre bien la puissance de la GCM dans l'étude de la dynamique nucléaire.

**Remerciements** Je remercie vivement P. Bonche, J. Dobaczewski, H. Flocard, S. Krieger, J. Meyer, J. Skalski et M. Weiss en collaboration avec qui de nombreux résultats présentés ici (parfois non encore publiés) ont été obtenus.





### References

- 1) A. Bohr and B. Mottelson, Nuclear Structure (vol2) (1975) W. Benjamin, New York
- 2) Z. Szymanski, Cours donné à cette école.
- 3) P. Bonche, P. Quentin, S.J. Krieger, M. S. Weiss, J. Meyer, M. Meyer, N. Redon, H. Flocard et P.-H. Heenen Nucl Phys **A500** (1989) 308
- 4) M. Girod, J.P. Delaroche, D. Gogny et J.F. Berger, Phys. Rev. Lett. **62** (1989) 2452
- 5) M.A. Riley, D.M. Cullen, A. Alderson, I. Ali, P. Fallon, P.D. Forsyth, F. Hanna, S.M. Mullins, J.W. Roberts, J.F. Sharpey-Schafer, P.J. Twin, R. Poynter, R. Wadsworth, M.A. Bentley, A.M. Bruce, J. Simpson, G. Sletten, W. Nazarewicz, T. Bengtsson, and R. Wyss, Nucl. Phys. **A512** (1990) 178
- 6) D.L. Hill and J.A. Wheeler, Phys. Rev. **89** (1953) 1102
- 7) P. Ring and P. Schuck, The Nuclear Many-Body Problem (1980) Springer Verlag, Berlin
- 8) P. Bonche, J. Dobaczewski, H. Flocard, P.-H. Heenen and J. Meyer, Nucl. Phys. **A510** 466 (1990)
- 9) P. Bonche, J. Dobaczewski, H. Flocard, P.-H. Heenen, S.J. Krieger and M. S. Weiss, Nucl Phys **A519** (1990) 509
- 10) A. Hayashi, K. Hara et P. Ring, Phys. Rev. Lett. **53** (1984) 337
- 11) R. R. Chasman, Nuclear Structure, Reactions and Symmetries, 5 (1986), vol 1., R. A. Meyer et V. Paar éditeurs, World Scientific (Singapore)
- 12) W. Urban, R.M. Lieder, W. Gast, G. Hebbinghaus, A. Krämer-Flecken, K.P. Blume et H. Hübel, Phys. Lett. **185B** (1987) 331
- 13) R.H. Spear et W.N. Catford, Phys. Rev. **C41** (1990) 1351
- 14) W. Nazarewicz, P. Olanders, I. Ragnarsson, J. Dudek, G.A. Leander, P. Möller et E. Ruchowska, Nucl. Phys. **A429** (1984) 269
- 15) W. Nazarewicz, Proc. Intern. Conf on High Spin Physics and Gamma-Soft Nuclei, (1991) 406, J.X. Saladin, R.A. Sorensen et C.M. Vicent éditeurs, World Scientific (Singapore)
- 16) H. Mach, S. Ówiok, W. Nazarewicz, B. Fogelberg, M. Moszyński, J. Winger et R.L. Gill, Phys. Rev. **C42** (1990) R811

- 17) P. Bonche, P.-H. Heenen, H. Flocard et D. Vautherin, Phys. Lett. **B175** (1986) 387
- 18) P. Bonche, S.J. Krieger, M.S.Weiss, J.Dobaczewski, H. Flocard et P.-H. Heenen, Phys. Rev. Lett. **66** (1991) 876

## ALGEBRAIC APPROACHES TO NUCLEAR STRUCTURE

K.Heyde

Institute for Theoretical Physics,  
Proeftuinstraat, 86 - B 9000 Gent (Belgium)

In the present lecture notes, I have tried to present a short overview of how recent developments in nuclear structure calculations, concentrating mainly on low-lying collective excitations, can be understood in the light of the nuclear shell-model. The particular approach where the independent-particle motion in an average nuclear potential and the residual interactions amongst nucleons are assumed to form the basic ingredients for studying nuclear collective motion is of course a personal view. Also, many aspects of recent developments in nuclear structure studies starting from self-consistent methods (eg using Skyrme type forces), the interesting studies on nuclear deformation within the Nilsson model (Cranked shell-model, etc.), the observation in a systematic way of coexistence of different types of excitations near closed shells ( $0^+$  levels in Pb, Sn region) nor the extended shell-model calculations (MONSTER, ...) could be discussed in this lectures although sometimes very exciting results have been obtained.

### 1.1. Introduction

When studying the atomic nucleus, in the early stages, use has been made of nuclear models to approximate the nuclear many-body problem that can be described by a Hamiltonian of the form

$$H = \sum_{i=1}^A t_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^A v_{i,j} + \dots \quad (1.1)$$

for the A-body system. Starting from the nuclear shell-model as outlined by M.G.Mayer<sup>1)</sup> and H.Jensen<sup>2)</sup>, which emphasises the independent particle motion in an average potential  $U(r)$ , the structure of many properties (excitation energies, electromagnetic properties, ...) is largely understood. In the average potential, the one-body Schrödinger equation can be solved for the single-particle wave functions and single-particle energies as

$$h_0(i) \varphi_a(\vec{r}_i) = \varepsilon_a \varphi_a(\vec{r}_i) \quad (1.2)$$

and the original Hamiltonian can be rewritten as

$$H = H_0 + H_{res} \quad (1.3)$$

with

$$H_0 = \sum_{i=1}^A h_0(i) \quad (1.4)$$

where  $H_0$  describes the independent-particle model and  $H_{res}$  the residual interactions that have to be treated in the basis spanned by the independent-particle wave functions. Even in its simplest form, the independent-particle model describes the ground-state spin of most odd-A nuclei. However, for nuclei with many nucleons outside of the closed shells, determined via the shell-model itself, the residual interactions play a major role in determining the precise nuclear structure. Here, the

independent-particle shell-model wave functions  $\varphi_a(\vec{r}_i)$  are used to construct a basis for expressing the total nuclear wave function as

$$\bar{\psi} = \sum_i a_i \psi_i \quad , \quad (1.5)$$

where  $\psi_i$  is a short-hand notation for a particular wave function conform to a given nucleus  $A(Z,N)$  i.e.

$$\psi_i \equiv \psi((j_1)_{a_1 J_1}^{n_1} (j_2)_{a_2 J_2}^{n_2} \dots)_{JM} \quad , \quad (1.6)$$

where  $n_i$  nucleons are moving in the single-particle orbital characterized by the quantum number  $j_i$  ( $j_i \equiv n_i, l_i, j_i$ ). Here,  $J_i$  is the angular momentum,  $a_i$  denotes extra quantum numbers needed to specify states uniquely and  $J$  is the total angular momentum ( $\sum_i n_i = n$ ) where  $n$  is the number of valence nucleons outside of the closed shells).

The eigenvalue equation, using the Hamiltonian of eq. (1.3), now leads to a matrix eigenvalue equation

$$H\bar{\psi} = E\bar{\psi} \quad , \quad (1.7)$$

or substituting the expression (1.5), one gets

$$\sum_{l,k=1}^n a_{lp'} H_{lk} a_{kp} = E_p \delta_{pp'} \quad , \quad (1.8)$$

where

$$H_{lk} = \langle \psi_l | H_0 + H_{res} | \psi_k \rangle \quad . \quad (1.9)$$

In the next paragraphs, I will shortly discuss, as a reminder, some properties of the two-particle system relating to the pairing properties of the nuclear interaction and sketch the extension to  $n$  particles in many shells.



## 1.2. The nuclear shell-model

### 1.2.1. Two-particle system

Using the notation  $j_a (\equiv n_a, l_a, j_a)$ , two-particle angular momentum and antisymmetrized wave functions can be constructed using the wave functions of the independent-particle shell-model as

$$\psi(j_1 j_2, JM) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{m_1 m_2} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2, JM \rangle$$

$$[\varphi_{j_1 m_1}(1) \varphi_{j_2 m_2}(2) - \varphi_{j_1 m_1}(2) \varphi_{j_2 m_2}(1)] , \quad (1.10)$$

or

$$\psi(j^2, JM) = \sum_m \langle j m j m' | JM \rangle \varphi_{j m}(1) \varphi_{j m'}(2) , \quad (1.11)$$

where in (1.10)  $|j_1 - j_2| \leq J \leq j_1 + j_2$  and in (1.11)  $J = 0, 2, 4, \dots, 2j-1$ .

When considering non-identical nucleons, the isospin quantum number has also to be taken into account. When calculating the nuclear two-particle interaction matrix elements, (using Dirac bra-ket notation) one gets the binding energy that are

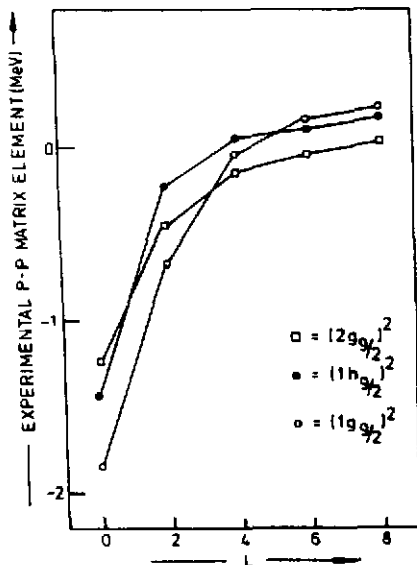


fig.1.1.

The experimental particle-particle matrix elements for three different shell-model orbitals

$$\text{or } \left. \begin{aligned} \Delta E_J &= \langle j_1 j_2, JM | H_{\text{res}} | j_1 j_2, JM \rangle \\ \Delta E_J &= \langle j^2, JM | H_{\text{res}} | j^2, JM \rangle \end{aligned} \right\} , \quad (1.12)$$

depicted in fig.1.1 for some typical  $j$ -values. All two-particle energy spectra for nuclei having just two-particles (or holes) outside closed shells are of this form eg  $^{18}\text{O}$ ,  $^{42}\text{Ca}$ ,  $^{134}\text{Te}$ ,  $^{206}\text{Pb}$ , ... and indicate the pairing aspect of the residual two-body interaction. Most effective interactions (that are constructed explicitly for describing energy spectra in a restricted model space) have this pairing property<sup>3,4</sup>). Also, more realistic interactions, constructed for describing free nucleon-nucleon scattering outside the nucleus, are shown to exhibit this pairing property when putting nucleons in the nuclear medium in a given model space<sup>5</sup>). In the remaining part of this lecture, I will simplify the residual interaction to the pairing component only and discuss some consequences for the energy spectra when considering many more valence nucleons.

### 1.2.2. Particles in degenerate shells

Starting from the above pairing aspects, it is tempting to use an interaction that has this pairing property of acting only in  $J^\pi = 0^+$  states. Knowing that a given two-body interaction, given in coordinate space can be written in a second quantized form

$$V_{12} \rightarrow \frac{1}{4} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle \alpha\beta | V | \gamma\delta \rangle a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger a_\delta a_\gamma , \quad (1.13)$$

we can define an interaction Hamiltonian, immediately in second quantized form as<sup>4,6</sup>)

$$H = - G \sum_{m, m' > 0} a_{jm}^\dagger a_{j-m}^\dagger a_{j-m} a_{jm} (-1)^{2j+m+m'} . \quad (1.14)$$

In the two-particle subspace (m-states), H has the matrix representation

$$H = -G \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & \vdots & \vdots \\ 1 & 1 & 1 & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{bmatrix} . \quad (1.15)$$

It can be shown that the state

$$\frac{1}{\sqrt{\Omega}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ \vdots \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{m>0} (-1)^{j+m} a_{jm}^{\dagger} a_{j-m}^{\dagger} |0\rangle \quad (1.16)$$

$$= (j)^2 J=0 \ M=0\rangle ,$$

is the lowest energy eigenstate of (1.15). Here  $|0\rangle$  denotes the closed-shell wave function and  $\Omega$  is the shell degeneracy or  $\Omega = j + 1/2$ . The eigenenergy of the state (1.16) is  $E_0 = -G/\Omega$ .

To solve now for the n-particle system the pairing interaction problem, we define the pair creation operator

$$S_j^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{m>0} (-1)^{j+m} a_{jm}^{\dagger} a_{j-m}^{\dagger} , \quad (1.17)$$

which creates the two-particle  $J^{\pi} = 0^+$  state. Using this operator  $S_j^{\dagger}$ , the Hamiltonian (1.14) can be rewritten as

$$H = -G \Omega S_j^{\dagger} S_j . \quad (1.18)$$

The commutation relations are

$$[S_j, S_j^{\dagger}] = 1 - \frac{\hat{n}}{\Omega} , \quad (1.19)$$

where  $\hat{n}$  is the number operator

$$\hat{n} = \sum_m a_{jm}^{\dagger} a_{jm} = \sum_{m>0} (a_{jm}^{\dagger} a_{jm} + a_{j-m}^{\dagger} a_{j-m}) . \quad (1.20)$$

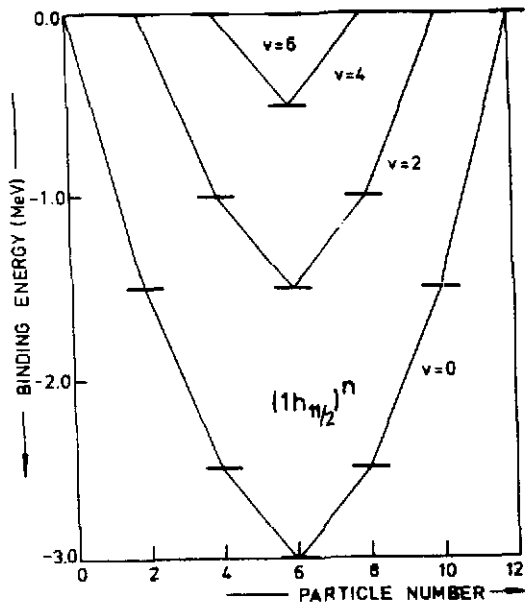


fig.1.2.

The spectrum for a pairing interaction within the  $1h_{11/2}$  orbital  $(1h_{11/2})^n_v$  for  $v=0, 2, 4$  and  $6$  as a function of  $n$ . The pairing strength is  $G=0.25$  MeV.

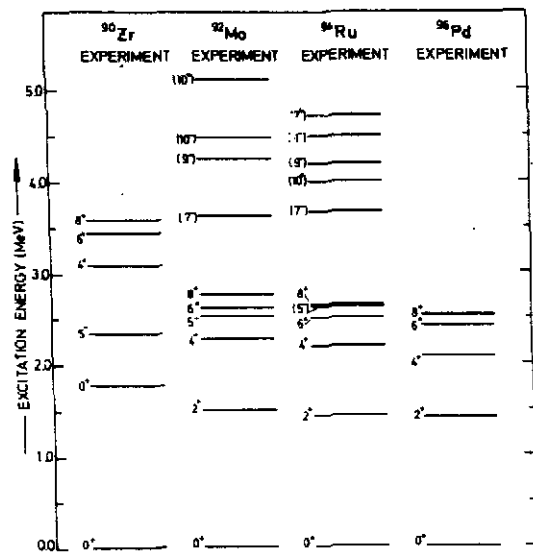


fig.1.3.

The experimental spectra for the  $N=50$  single-closed shell nuclei  $^{90}\text{Zr}$ ,  $^{92}\text{Mo}$ ,  $^{94}\text{Ru}$ ,  $^{96}\text{Pd}$ . The seniority  $v=2$  states are clearly observed  $(1g_{9/2})^n_{v=2}$ .

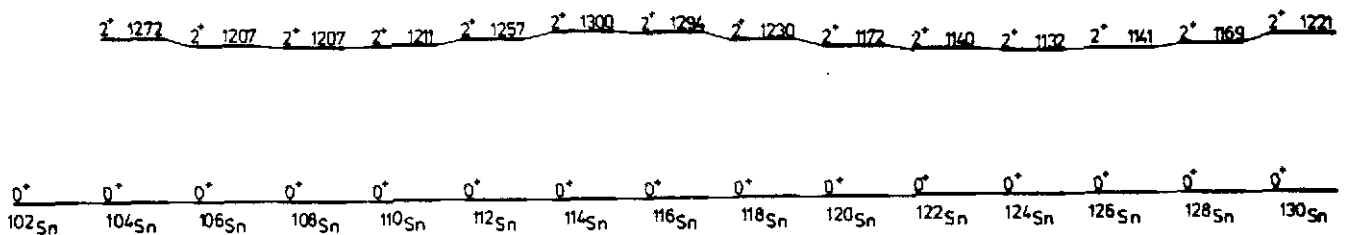


fig.1.4. Systematics of the first  $2^+$  level in the even-even Sn nuclei ( $102 \leq A \leq 130$ ).

A class of eigenstates of H (eq. 1.14) are now given by

$$[H, S_j^\dagger] = -G S_j^\dagger (\Omega - \hat{n}) = -G (\Omega - \hat{n} + 2) S_j^\dagger . \quad (1.21)$$

Starting from zero valence particles, one gets

$$\left. \begin{aligned} H S_j^\dagger |0\rangle &= -G \Omega S_j^\dagger |0\rangle , \\ H (S_j^\dagger)^2 |0\rangle &= -2G (\Omega - 1) (S_j^\dagger)^2 |0\rangle , \\ \vdots & \\ H (S_j^\dagger)^{n/2} |0\rangle &= -\frac{G}{4} n(2\Omega - n + 2) (S_j^\dagger)^{n/2} |0\rangle . \end{aligned} \right\} \quad (1.22)$$

Here all particles are coupled pairwise to  $J^\pi = 0^+$ . They are described as seniority  $v = 0$  states, where the seniority quantum number  $v$  denotes number of unpaired particles. In shorthand we can write

$$|n, v=0\rangle = (S_j^\dagger)^{n/2} |0\rangle , \quad (1.23)$$

and

$$E_{v=0}(n) = -\frac{G}{4} n(2\Omega - n + 2) . \quad (1.24)$$

One can generalize this procedure in adding to the  $S_j^\dagger$  operator, the  $\Omega-1$  operators  $B_J^\dagger$  which create pairs coupled to angular momentum  $J$  ( $J \neq 0$ ) defined as

$$B_J^\dagger = \sum_{m>0} (-1)^{j-m} \langle j m j -m | J 0 \rangle a_{j m}^\dagger a_{j -m}^\dagger , \quad (1.25)$$

and obey the relation

$$[H, B_J^\dagger] |0\rangle = 0 . \quad (1.26)$$

So we can construct a set of seniority  $v = 2$  states

$$\begin{aligned}
 H B_J^+ |0\rangle &\equiv H |n=2, v=2, J\rangle = 0 \quad , \\
 H S_J^+ B_J^+ |0\rangle &\equiv H |4, 2, J\rangle = -G(\Omega-2) |4, 2, J\rangle \quad , \\
 &\vdots \qquad \qquad \qquad \vdots \qquad \qquad \qquad \vdots \\
 H (S_J^+)^{\frac{n}{2}-1} B_J^+ |0\rangle &\equiv H |n, 2, J\rangle = -\frac{G}{4} (n-2)(2\Omega-n) |n, 2, J\rangle \quad .
 \end{aligned}
 \tag{1.27}$$

For  $v > 2$  we cannot continue in this way since an overcomplete set of states  $B_J^+ B_J^+ |0\rangle, \dots$  arises. Still we can calculate the energy since a state with maximum seniority  $v = n$  has energy zero or  $H |n, v = n\rangle = 0$ . We can now calculate successively

$$\left. \begin{aligned}
 H |n, n-2\rangle &= H (S_J^+) |n-2, n-2\rangle = -G(\Omega-n+2) |n, n-2\rangle \quad . \\
 H |n, n-4\rangle &= H (S_J^+)^2 |n-4, n-4\rangle = -G(2\Omega-2n+6) |n, n-4\rangle \quad . \\
 &\vdots \qquad \qquad \qquad \vdots \qquad \qquad \qquad \vdots \\
 H |n, v\rangle &= H (S_J^+)^{\frac{(n-v)}{2}} |v, v\rangle = -\frac{G}{4} (n-v)(2\Omega-n-v+2) |n, v\rangle \quad .
 \end{aligned} \right\}
 \tag{1.28}$$

giving the general expression for the spectrum

$$E_v(n) - E_0(n) = \frac{G}{4} v(2\Omega-v+2) \quad . \tag{1.29}$$

(see fig.1.2 and 1.3 for some illustrations).

### 1.2.3. Particles in non-degenerate shells

If we now have two or  $n$  particles in non-degenerate shells, much of the simplicity of the above discussion is lost but the major ingredients of classification of energy spectra in families of different seniority  $v = 0, v = 2, v = 4, \dots$ , remains and the above approximation of treating the many body

system of  $n$  identical nucleons outside closed shells using a product wave function of pairs is a good approximation<sup>4,6</sup>). Many calculations using this pair approximation and different types of residual interactions have been carried out under the name of BCS (Bardeen-Cooper-Schrieffer theory), broken-pair approximation, generalized seniority, (see ref.4 for a more detailed discussion and references to the literature) and all result in a good description of single-closed shell nuclei (see fig.1.4 for an example).

When however, both proton and neutron valence numbers are present this seniority classification breaks down rapidly and completely different types of energy spectra, reminiscent of coherent collective motion start to appear<sup>7</sup>). In the second lecture we will come back to this point and try to develop a microscopic basis for describing nuclear collective motion. Now, we mention a number of striking features relating to the presence of both active protons and neutrons.

### 1.3. Collective modes of the nucleus

Parallel to the study of the nuclear shell-model to a high degree of sophistication, the study of nuclear collective motion as a description of a liquid drop has been developed by A.Bohr, B.Mottelson<sup>7-9</sup>), S.G.Nilsson<sup>10</sup>) and many others in particular in the Copenhagen school<sup>8,9</sup>).

Here, one starts of with a nuclear shape, for which the radius vector  $R$  is written as

$$R = R_0(1 + \sum_{\lambda\mu} \alpha_{\lambda\mu} Y_{\lambda\mu}(\theta, \varphi)), \quad (1.30)$$

where  $\lambda$  describes the multipolarity of the shape ( $\lambda = 2$  : quadrupole,  $\lambda = 3$  : octupole, ... see fig.1.5). The dynamics for such an object in the small amplitude limit of oscillations around a spherical equilibrium shape is described starting from the Hamiltonian (for quadrupole vibrations)

$$H = \frac{1}{2} B \sum_{\mu} |\dot{\alpha}_{\mu}|^2 + \frac{C}{2} \sum_{\mu} |\alpha_{\mu}|^2 \quad . \quad (1.31)$$

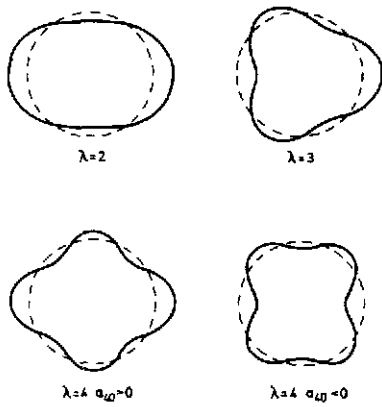


fig.1.5.  
Nuclear shapes with quadrupole ( $\lambda=2$ ), octupole ( $\lambda=3$ ) and hexadecapole ( $\lambda=4$ ) deformations.

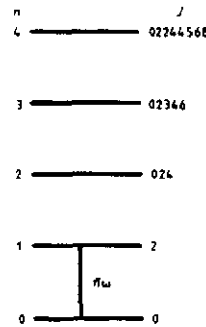


fig.1.6.  
The quadrupole phonon spectrum for  $n \leq 4$ . The angular momenta are indicated on the right hand side.

Defining the momentum  $\pi_{\mu} = B a_{\mu}^*$  or  $-i\hbar(\partial/\partial a_{\mu})$ , one can quantize the Hamiltonian in eq (1.31). It is convenient to define creation and annihilation operators for oscillator quanta of a given multipolarity via the relation

$$b_{\mu}^{+} = -\frac{1}{2a_0} a_{\mu} + (-1)^{\mu} a_0 \frac{\partial}{\partial a_{-\mu}} \quad (a_0 = \sqrt{\hbar^2/4BC}) \quad (1.32)$$

Using these boson operators, satisfying boson commutation relations

$$[b_{\mu}, b_{\mu}^{+}] = \delta_{\mu\mu} \quad (1.33)$$

the Hamiltonian takes the form

$$H = \hbar\omega \sum_{\mu} (b_{\mu}^{+} b_{\mu} + \frac{1}{2}), \quad (1.34)$$

with frequency  $\omega = \sqrt{C/B}$ . The energy spectrum consists of equidistant sets of levels with angular momenta determined by the multipolarity  $\lambda=2$  (see fig. 1.6). In more realistic cases, the



degeneracies are broken through anharmonicities in the vibrational Hamiltonian and many such possibilities have been studied over the years<sup>8)</sup>.

Whenever the nucleus is described by a non-spherical shape, rotations can result besides vibrational motion. Here, it is convenient to transform from the coordinates  $\alpha_\mu$  to three Euler angles and two intrinsic variables (for  $\lambda = 2$ ) using

$$\alpha_\mu = \sum_{\nu} D_{\mu\nu}^2(\Omega) \alpha'_\nu \quad , \quad (1.35)$$

With  $D_{\mu\nu}^2$  the Wigner D or rotation matrix. In the new system we require

$$\alpha'_1 = \alpha'_{-1} = 0 \quad , \quad \alpha'_2 = \alpha'_{-2} \quad , \quad (1.36)$$

if the new "intrinsic" axis are to be the principal axis of the nuclear shape. So, we can parametrize

$$\left. \begin{aligned} \alpha'_0 &= \beta \cos\gamma \\ \alpha'_2 &= \frac{\beta}{\sqrt{2}} \sin\gamma \end{aligned} \right\} \quad . \quad (1.37)$$

Now, since the original potential energy was written in terms of rotationally invariant expressions of the coordinates, the following two forms will frequently occur i.e.

$$\left. \begin{aligned} (\alpha \times \alpha)_0^{(0)} &= \frac{\beta^2}{\sqrt{5}} \\ (\alpha \times \alpha \times \alpha)_0^{(0)} &= -\sqrt{\frac{2}{35}} \beta^3 \cos 3\gamma \end{aligned} \right\} \quad . \quad (1.38)$$

Here,  $\gamma$  measures the departure from axial symmetry with  $\gamma = 0^\circ$  giving a prolate,  $\gamma = 60^\circ$  an oblate shape and thereby all shapes can be obtained within the sector  $(0^\circ, 60^\circ)$ . Also, the potential

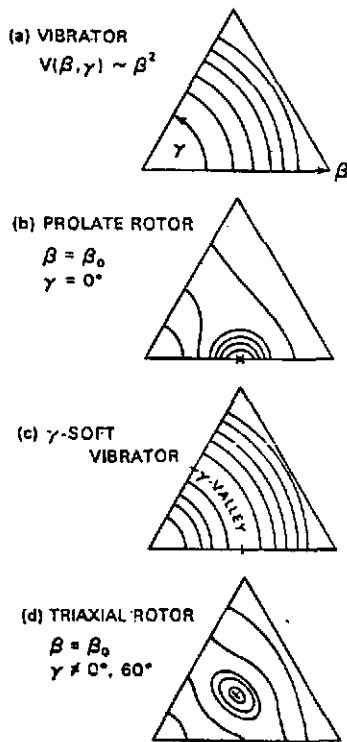


fig.1.7.

Different shapes  $V(\beta, \gamma)$  in the  $\beta, \gamma$  ( $\gamma=0^\circ-\gamma=60^\circ$ ) sector corresponding to a spherical vibrator, a prolate rotor, a  $\gamma$ -soft vibrator and a triaxial rotor.

energy  $V(\beta, \gamma)$  will determine the nuclear dynamics in a major way (fig.1.7). The energy for rigid, rotation for an axially symmetric nucleus around an axis perpendicular to the symmetry axis then becomes

$$E_J = \frac{\hbar^2}{2\mathcal{I}} J(J+1) \quad , \quad (1.39)$$

with as a wave function

$$\psi_{JM} = \frac{2J+1}{8\pi^2} D_{MO}^J(\Omega) \quad . \quad (1.40)$$

In the more general case, when a general  $(\beta, \gamma)$  shape exists, vibrations in the  $\beta$  and  $\gamma$  direction can be formed and classified according to the number of quanta for each type ( $\beta$ -vibrations :  $n_\beta$ ,  $\gamma$ -vibrations :  $n_\gamma$ ). This more general wave function becomes

$$\psi_{JM} = \sqrt{\frac{2J+1}{16\pi^2}} (D_{MK}^J(\Omega) + (-1)^{J-K} D_{M-K}^J(\Omega)) \varphi_{n_\beta}(\beta) \varphi_{n_\gamma}(\gamma) \quad , \quad (1.41)$$

and the energy will be dependent on the specific form of  $V(\beta, \gamma)$ . An interesting shape, is the  $\gamma$ -unstable rotor where  $V(\beta, \gamma)$  is independent of  $\gamma$  (a valley in the  $\gamma$ -direction, see fig. 1.7) which we shall discuss later on in lecture 3.

A large number of nuclei will of course be intermediate between the more simple shapes and thus we need a numerical method to study such cases. I shortly discuss two major groups of models.

Frankfurt (Gneuss, Greiner) approach<sup>11,12</sup>). Within the vibrational basis characterized by the number of quadrupole phonons and extra quantum numbers (seniority)  $|n, v, \alpha; J\rangle$ , one calculates the matrix elements of a general Hamiltonian, where the two invariants of eqs. (1.38) are used, up to sixth order in the  $\alpha_\mu$ , (6 parameters) and diagonalizes the energy matrix in the finite boson space (in general  $n \leq 25$ ). This approach has enjoyed considerable success over a wide range of nuclei.

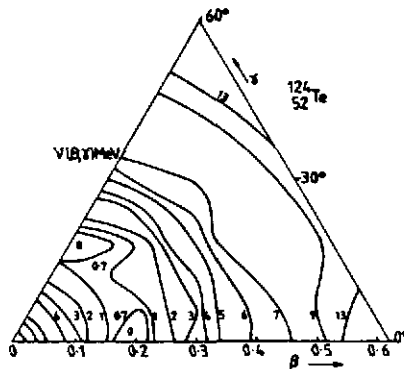
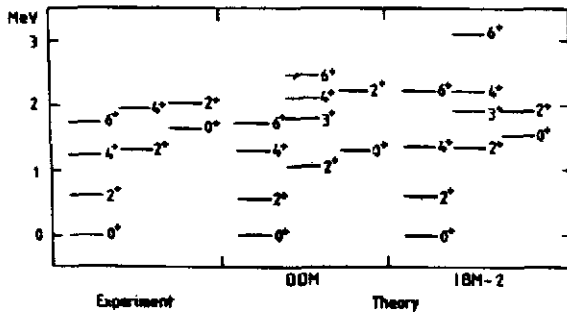


fig.1.8.

The contour plot of  $V(\beta, \gamma)$  for  $^{124}\text{Te}$  calculated using the DDM method.

The corresponding collective bands in  $^{124}\text{Te}$  are also shown.



Baranger and Kumar (DDM)<sup>13,14</sup>). The major difference with the Frankfurt model approach is the use of a microscopic basis in order to calculate the constants of inertia for rotations and

vibrations and the potential energy starting from the deformed single-particle field (Nilsson model)<sup>10</sup>). This is done on a  $\beta, (\gamma = 0^\circ - \gamma = 60^\circ)$  mesh for a Hamiltonian of the form

$$H = \frac{1}{2} B_{\beta\beta} \dot{\beta}^2 + \frac{1}{2} B_{\gamma\gamma} \beta^2 \dot{\gamma}^2 + B_{\beta\gamma} \beta \dot{\beta} \dot{\gamma} + V(\beta, \gamma) + \frac{1}{2} \sum_{\kappa} \mathcal{J}_{\kappa} \omega_{\kappa}^2 \quad (1.42)$$

Afterwards, the corresponding Schrödinger equation is solved numerically. In principle, the DDM approach contains very few parameters which are connected to the single-particle field, the pairing field and the liquid droplet model parameters. (see fig.1.8 for an example in <sup>124</sup>Te).

#### 1.4. Conclusions

In this first lecture, we have discussed that starting from the picture where nucleons are moving in zero order in an independent way, a systematic inclusion of the residual short range interactions between nucleons leads to many-particle energy spectra where pairing correlations remain dominant. This whole procedure can eventually be performed in a fully self-consistent way starting from e.g. Skyrme type interactions<sup>15-17</sup>).

On the other hand, macroscopic models have been developed by A.Bohr, B.Mottelson and co workers in which shape vibrations and rotations can be studied. In the latter, the low-lying quadrupole mode is highly interesting and is one of the better known multipole modes in the nucleus.

It is now important, in order to reconcile both aspects, to treat at the same time the pairing forces between identical nucleons and the quadrupole residual interactions among protons and neutrons.

## 2.1 Introduction

In the first lecture we have discussed the possibilities to describe nuclei with a large number of valence nucleons outside closed shells (identical nucleons) within the nuclear shell-model. It is basically the nuclear pairing force component that determines the characteristics of such nuclei. On the other hand, when many valence protons and neutrons are present the residual proton-neutron interaction modifies the seniority-type of spectra in a major way and quadrupole, collective motion sets in. In the first lecture we relied on the Bohr-Mottelson model in order to study vibrational and rotational excitations. We shall now try to start from the nuclear shell-model in construction a basis for understanding low-lying quadrupole collective excitations in nuclei.

## 2.2 Shell-model basis of collective quadrupole motion

### 2.2.1 A simple example

Starting from the second quantized form of the pair states that were constructed in sect.1., and restricting to a single  $j$  shell ( $j_\pi = j_\nu = j$ ), the lowest  $2^+$  and  $0^+$  excitations for protons and neutrons separately can be described by<sup>18)</sup>

$$\left. \begin{array}{l} (S_j^+)^{\frac{n_\pi}{2}-1} (D_j^+)^{2^+} |0\rangle \\ (S_j^+)^{\frac{n_\nu}{2}-1} (D_j^+)^{2^+} |0\rangle \end{array} \right\} \quad (2.1)$$

$$\left. \begin{array}{l} (S_j^+)^{n_\pi/2} |0\rangle \\ (S_j^+)^{n_\nu/2} |0\rangle \end{array} \right\} \quad (2.2)$$

where  $S_j^+$  and  $D_j^+$  (the  $B_j^+$  operator of sect.1 for  $J = 2$ ) were discussed in sect.1.

In the proton-neutron coupled basis; there are two independent  $2^+$  basis states i.e.

$$\left. \begin{aligned} |2_\pi^+\rangle &= (S_j^+)^{\frac{n_\pi}{2}-1} (D_j^+)^2 \otimes (S_j^+)^{n_\nu/2} |0\rangle \\ |2_\nu^+\rangle &= (S_j^+)^{\frac{n_\nu}{2}-1} (D_j^+)^2 \otimes (S_j^+)^{n_\pi/2} |0\rangle \end{aligned} \right\} \quad (2.3)$$

If, the energy of the lowest  $2^+$  states in the proton and neutron space are nearly equal (what is often the case in experimental situations e.g.  $E_x(2_1^+)$  in Sn and  $E_x(2_1^+)$  in  $N = 82$  nuclei) and taken as  $\epsilon_{2^+}^0 = \epsilon_{2_\pi^+}^0 = \epsilon_{2_\nu^+}^0$ , then the eigenstates for the coupled proton-neutron system follow from diagonalizing in the  $2 \times 2$  model space, the residual proton-neutron interaction. Using a quadrupole proton-neutron interaction  $-\kappa Q_\pi \cdot Q_\nu$  and using the Racah algebra reduction formulae<sup>19)</sup>, one obtains for the matrix element

$$\begin{aligned} \langle V_{\pi\nu} \rangle &= \langle 2_\pi^+ | -\kappa Q_\pi \cdot Q_\nu | 2_\nu^+ \rangle \\ &= -\frac{\kappa}{5} \left[ N_\pi \left(1 - \frac{N_\pi}{\Omega_\pi}\right) N_\nu \left(1 - \frac{N_\nu}{\Omega_\nu}\right) \right]^{1/2} \left[ \frac{4}{(\Omega_\pi-1)(\Omega_\nu-1)} \right]^{1/2} \\ &\quad \langle j_\pi || Q_\pi || j_\pi \rangle \langle j_\nu || Q_\nu || j_\nu \rangle \quad (\text{with } N_\rho \equiv \frac{n_\rho}{2}). \end{aligned} \quad (2.4)$$

The energy matrix becomes

$$\begin{bmatrix} \epsilon_{2^+}^0 & \langle V_{\pi\nu} \rangle \\ \langle V_{\pi\nu} \rangle & \epsilon_{2^+}^0 \end{bmatrix}, \quad (2.5)$$

with as lowest eigenvalue, the expression

$$E(2_1^+) = \epsilon_{2^+}^0 - \frac{\kappa}{5} \left[ N_\pi N_\nu \left(1 - \frac{N_\pi}{\Omega_\pi}\right) \left(1 - \frac{N_\nu}{\Omega_\nu}\right) \right]^{1/2} \cdot F. \quad (2.6)$$

The corresponding wave function reads

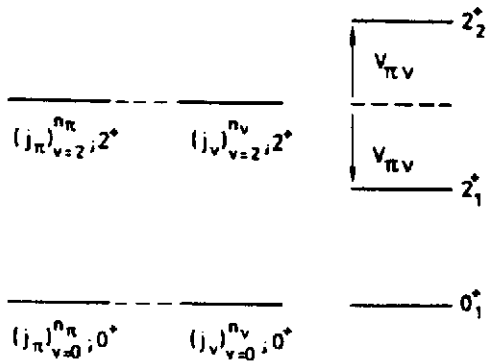


fig.2.1.

The unperturbed seniority  $v=2$  proton and neutron shell-model configurations (see Eqs. 2.1, 2.2) and the two  $2^+$  levels obtained after diagonalizing the quadrupole proton-neutron force in the two-level model space of eqs. 2.3.

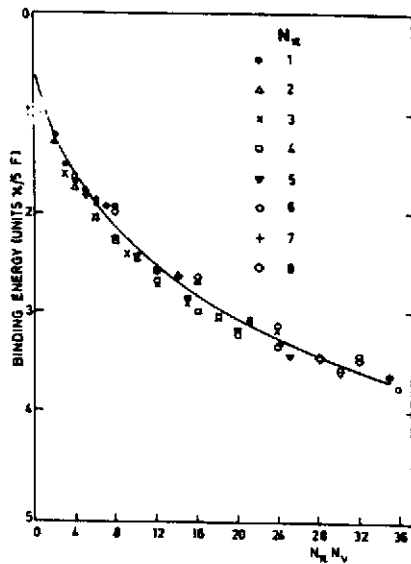


fig.2.2.a.

The energie of the lowest  $2^+$  level (eq.2.6), in units of  $(\kappa/5)F$ , as a function of the product  $N_{\pi}N_{\nu}$  for nuclei in the  $N_{\pi}=1$  to  $N_{\pi}=8$  region.

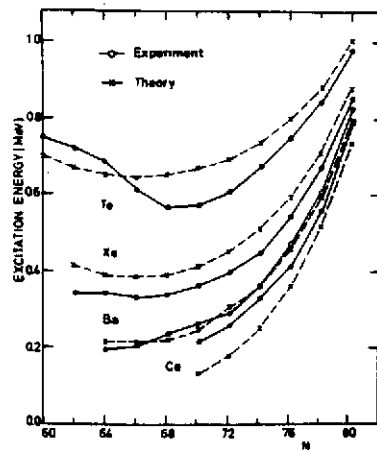


fig.2.2.b.

A detailed fit, using eq. 2.6, to the Te, Xe, Ba and Ce nuclei, using  $\Omega_{\pi}=\Omega_{\nu}=16$ , and a constant value of  $(\kappa/5)F=0.365$  MeV.

$$|2_1^+\rangle = 1/\sqrt{2} (|2_{\pi}^+\rangle + |2_{\nu}^+\rangle) . \quad (2.7)$$

(see fig.2.1)

So, the lowest  $2^+$  state is a symmetric linear combination of the unperturbed states and thus seniority becomes strongly mixed in the final  $2^+$  state. Also, the energy eigenvalue presents a specific  $N_\pi N_\nu$  dependence shown in figs. (2.2a), (2.2b) which for small  $N_\pi/\Omega_\pi$ ,  $N_\nu/\Omega_\nu$  is almost like  $\sqrt{N_\pi N_\nu}$ . Recently Casten et al.<sup>20)</sup> have pointed out the very striking observation that experimental quantities such as  $E_X(2_1^+)$ ,  $E_X(4_1^+)/E_X(2_1^+)$  lie on a smooth curve when plotted as a function of the product of  $N_\pi N_\nu$ . At least in the vibrational (transitional) regime, the above simple shell-model calculations predicts such a behaviour for  $E_X(2_1^+)$ .

### 2.2.2 General method

Since we like to go beyond the vibrational region and also if we like to handle more realistic cases where particles move in many, non-degenerate shells, we have to use more general pair creation operators e.g. we use

$$\left. \begin{aligned} S_\pi^+ &= \sum_{j_\pi} \alpha_j S_{j_\pi}^+ \\ D_{\pi, \mu}^+ &= \sum_{j_\pi, j_{\pi'}} \beta_{j_\pi, j_{\pi'}} D_{j_\pi, j_{\pi'}, \mu}^+ \\ G_{\pi, \mu}^+ &= \sum_{j_\pi, j_{\pi'}} \gamma_{j_\pi, j_{\pi'}} G_{j_\pi, j_{\pi'}, \mu}^+ \\ &\vdots \qquad \qquad \qquad \vdots \end{aligned} \right\} , \quad (2.8)$$

with

$$\left. \begin{aligned} S_{j_\pi}^+ &= (a_{j_\pi}^+ a_{j_\pi}^+)_{0}^{(0)} \\ D_{j_\pi, j_{\pi'}, \mu}^+ &= (a_{j_\pi}^+ a_{j_{\pi'}}^+)_{\mu}^{(2)} \end{aligned} \right\} , \quad (2.9)$$

and where the sums go over all single-particle states. The  $S_\pi^+$  operator used in the generalized seniority scheme, and in the further discussion, has a different normalization i.e. for a single  $j$ -shell  $S_\pi^+ \equiv \sqrt{\Omega} S_j^+$ . For degenerate orbitals, all  $\alpha_j$  are equal ( $\alpha_j = \sqrt{1/2(j+1/2)}$ ) but for more realistic situations,



deviations occur and the optimum pair will have to be determined from a variational procedure for each nucleus (and in principle for each excited state). Using all possible angular momenta S,D,G,..., a huge shell-model basis results.

Here, our first approximation comes in, by truncating to S and D pairs only (see lecture 1). For a typical nucleus of interest e.g.  $^{156}\text{Sm}$ , this results into a typical reduction from  $\approx 10^{14}$  to a  $10^3$  dimensional space. The basis functions are now written as

$$\left\{ \left[ \begin{array}{cc} (S_{\pi}^+)^{N_{S\pi}} & (D_{\pi}^+)^{N_{D\pi}} \\ & \gamma_{\pi} J_{\pi} \end{array} \right] \otimes \left[ \begin{array}{cc} (S_{\nu}^+)^{N_{S\nu}} & (D_{\nu}^+)^{N_{D\nu}} \\ & \gamma_{\nu} J_{\nu} \end{array} \right] \right\}_M^{(J)} |0\rangle, \quad (2.10)$$

with

$$\left. \begin{array}{l} N_{S\pi} + N_{D\pi} = \frac{n_{\pi}}{2} = N_{\pi} \\ N_{S\nu} + N_{D\nu} = \frac{n_{\nu}}{2} = N_{\nu} \end{array} \right\}, \quad (2.11)$$

where  $n_{\pi}$  ( $n_{\nu}$ ) are the number of valence protons (neutrons) respectively.

As shortly mentioned in lecture 1, there are problems with the construction of orthonormal states when many D-pairs are present, e.g.

$$\text{and} \left. \begin{array}{l} (S_{\rho}^+)^{N_S} (D_{\rho}^+)^{N_D} \gamma_{JM} |0\rangle \\ (J_{\rho}^+)^{N_{S+1}} (B_{\rho}^+)_{JM} |0\rangle \\ \vdots \end{array} \right\}, \quad (2.12)$$

where  $(B_{\rho}^+)_{JM}$  are all operators which create  $2(N_D-1)$  nucleons ( $\rho=\pi,\nu$ ) (for instance, the state  $|D^2, J=0\rangle$  is not orthogonal to the state  $|S^2, J=0\rangle$ <sup>21</sup>). Thus, calculations using fermion pairs are still cumbersome. Although the fermion pair commutator relations resemble the boson ones, there are corrections that vanish only in the small  $n$  limit.

Here, the second approximation comes in. We map the space built from S,D fermion pairs and the operators in the S,D space to a corresponding s,d-boson space (fig.2.3). Thus, the corresponding boson state of eq.(2.10) reads

$$\left\{ \left[ \begin{pmatrix} (s_{\pi}^+) & N_{s_{\pi}} & (d_{\pi}^+) & N_{d_{\pi}} \\ & & & \gamma_{\pi J_{\pi}} \end{pmatrix} \otimes \left[ \begin{pmatrix} (s_{\nu}^+) & N_{s_{\nu}} & (d_{\nu}^+) & N_{d_{\nu}} \\ & & & \gamma_{\nu J_{\nu}} \end{pmatrix} \right]^{(J)} \right\}_M |\bar{0}\rangle \quad (2.13)$$

where now  $|\bar{0}\rangle$  is the boson vacuum state (see table 2.1) for the fermion-boson correspondence for the lowest seniority states). We now discuss in some more detail how this mapping is actually carried out for general fermion operators<sup>21)</sup>. The method used starts by equating matrix elements between corresponding fermion and boson states and thereby we obtain implicit equations for the boson operator

$$\langle \psi_F | H_F | \psi_F \rangle = \langle \psi_B | H_B | \psi_B \rangle \quad (2.14)$$

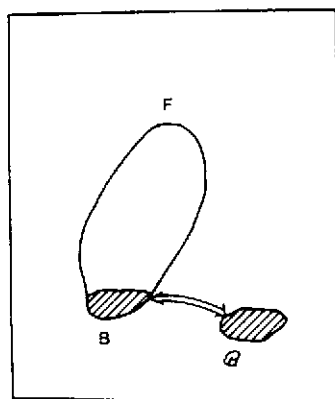


fig.2.3.

A schematic representation of the mapping procedure in order to construct the boson Hamiltonian and transition operators. F is the fermion space, B is the S-D fermion subspace and B is the sd boson space.

Fermion Space		Boson Space	
$n = 0, v = 0$	$ 0\rangle$	$N = 0, n_d = 0$	$ 0\rangle$
$n = 2, v = 0$	$S^{\dagger} 0\rangle$	$N = 1, n_d = 0$	$s^{\dagger} 0\rangle$
$v = 2$	$D^{\dagger} 0\rangle$	$n_d = 1$	$d^{\dagger} 0\rangle$
$n = 4, v = 0$	$S^{\dagger 2} 0\rangle$	$N = 2, n_d = 0$	$s^{\dagger 2} 0\rangle$
$v = 2$	$S^{\dagger}D^{\dagger} 0\rangle$	$n_d = 1$	$s^{\dagger}d^{\dagger} 0\rangle$
$v = 4$	$D^{\dagger 2} 0\rangle$	$n_d = 2$	$d^{\dagger 2} 0\rangle$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$

Table 2.1.

### 2.2.3 Mapping for pairing-plus-quadrupole Hamiltonian

Using the above eq.(2.14), fermion matrix elements for low-seniority states can be calculated using Racah algebra. Since the starting Hamiltonian for discussing quadrupole collective motion consists of a pairing-plus-quadrupole part we discuss both terms separately.

i) Pairing term :

This part of the Hamiltonian, for a pure pairing force between identical nucleons  $\rho$  ( $\rho \equiv \pi, \nu$ ) (eq.1.14), can also be written as

$$H_{\text{pair}} = - G S_{\rho}^{\dagger} S_{\rho} \quad . \quad (2.15)$$

Since H does not mix seniority,  $N_s$  and  $N_d$  will be conserved separately, and we only need the two-body matrix-elements for all states from the  $(j)^2$  and  $(j)^4$  configurations in order to determine, via eq.(2.14), the boson Hamiltonian uniquely. After some calculations, one gets<sup>21)</sup>

$$H_B = \epsilon_s s^{\dagger} s + \epsilon_d d^{\dagger} \cdot \tilde{d} + \frac{1}{2} \sum_L C_L (d^{\dagger} d^{\dagger}) (L) \cdot (\tilde{d} \tilde{d}) (L) + \frac{1}{2} u_0 s^{\dagger} s^{\dagger} s s + u_2 (s^{\dagger} d^{\dagger}) (2) \cdot (s \tilde{d}) (2) \quad , \quad (2.16)$$

with the coefficients given by

$$\left. \begin{aligned} \epsilon_s &= \langle (j)^2 \ J=0 \mid H_{\text{pair}} \mid (j)^2 \ J=0 \rangle = -G \cdot \Omega \\ \epsilon_d &= \langle (j)^2 \ J=2 \mid H_{\text{pair}} \mid (j)^2 \ J=2 \rangle = 0 \\ C_L &= \langle (j)^4 \ J \mid H_{\text{pair}} \mid (j)^4 \ J \rangle - 2 \epsilon_d = 0 \\ u_0 &= \langle (j)^4 \ J=0 \mid H_{\text{pair}} \mid (j)^4 \ J=0 \rangle - 2 \epsilon_s = 2G \\ u_2 &= \langle (j)^4 \ J=2 \mid H_{\text{pair}} \mid (j)^4 \ J=2 \rangle - \epsilon_s - \epsilon_d = 2G \end{aligned} \right\} \quad . \quad (2.17)$$

Thus, for a proton-neutron system and considering the pairing term only, a boson Hamiltonian

$$H_B = \epsilon_{s\nu} \hat{n}_{s\nu} + \epsilon_{d\nu} \hat{n}_{d\nu} + \epsilon_{s\pi} \hat{n}_{s\pi} + \epsilon_{d\pi} \hat{n}_{d\pi} + V_{\pi\pi} + V_{\nu\nu} \quad , \quad (2.18)$$

( $\hat{n}_{s\rho}$ ,  $\hat{n}_{d\rho}$ , are the number operators) is obtained which can be rewritten (since  $\epsilon_s < \epsilon_d$ ) as

$$H_B = E_0 + \epsilon_{s\nu} \hat{n}_{d\nu} + \epsilon_{d\pi} \hat{n}_{d\pi} + V_{\pi\pi} + V_{\nu\nu} . \quad (2.19)$$

ii) Quadrupole term :

We map the fermion quadrupole operator, using the matrix element mapping method. Since the quadrupole operator has both seniority changing and non-changing parts, two different terms result in the boson quadrupole operator. For the seniority changing boson term one can write

$$Q_B' = \alpha_0 (d^+s)^{(2)} + \sum_L \alpha_1^{(L)} ((d^+d^+)^{(L)} \tilde{d})^{(2)}_s + \dots . \quad (2.20)$$

By mapping the corresponding fermion and boson matrix elements we get the equality

$$\langle s^{N-1}d || Q_B' || s^N \rangle = \langle (s^+)^{N-1}D^+, J=2 || Q^F || (s^+)^N J=0 \rangle, \quad (2.21)$$

or

$$\alpha_0 = \sqrt{\frac{\Omega-N}{\Omega-1}} \frac{1}{\sqrt{5}} \langle j^2 J=2 || Q^F || j^2 J=2 \rangle . \quad (2.22)$$

Similarly, the non-changing seniority part becomes

$$Q_B'' = \beta_0 (d^+\tilde{d})^{(2)} + \sum_{LL'} \beta_1^{(L, L')} [(d^+d^+)^{(L)} (\tilde{d}\tilde{d})^{(L')}]^{(2)} + \dots . \quad (2.23)$$

Mapping matrix elements gives

$$\langle s^{N-1}d || Q_B'' || s^{N-1}d \rangle = \langle (s^+)^{N-1}(D^+)J=2 || Q^F || (s^+)^{N-1}(D^+)J=2 \rangle \quad (2.24)$$

or

$$\beta_0 = \frac{\Omega-2N}{\Omega-2} \frac{1}{\sqrt{5}} \langle j^2 J=2 || Q^F || j^2 J=2 \rangle . \quad (2.25)$$

Combining all parts, the full image (in lowest order) of the fermion quadrupole operator becomes

$$Q_B^{(2)} = \kappa_\rho ((d^+s + s^+\tilde{d})^{(2)} + \chi_\rho (d^+d^+)^{(2)}) , \quad (2.26)$$

with  $\kappa_\rho = a_0$  and  $\chi_\rho = \beta_0/a_0$ .

A rather general IBM-2 Hamiltonian can now be written as

$$H_B = E_0 + \varepsilon_{d_\pi} \hat{n}_{d_\pi} + \varepsilon_{d_\nu} \hat{n}_{d_\nu} + \kappa Q_\pi^{(2)} Q_\nu^{(2)} + V_{\pi\pi} + V_{\nu\nu} + M_{\pi\nu}, \quad (2.27)$$

for which  $E_0$ ,  $\varepsilon_{d_\pi}$ ,  $\varepsilon_{d_\nu}$ ,  $\kappa$ ,  $\chi_\pi$ ,  $\chi_\nu$  are related to the underlying shell-model structure that we now study. The last term  $M_{\pi\nu}$  describes the Majorana term which we do not discuss here.

#### 2.2.4 Parameters in the IBM-2

We have determined that  $\varepsilon = \varepsilon_s - \varepsilon_d = G\Omega$  and thus has to be a constant value independent of the particle number (fig.2.4) For the quadrupole operator parameters, the following behaviour results

- i) the total strength  $\kappa = \bar{\kappa} \kappa_\pi \kappa_\nu$  should be given by the function (fig.2.4)

$$\kappa = \kappa_0 \sqrt{(\Omega_\nu - N_\nu)(\Omega_\pi - N_\pi)} . \quad (2.28)$$

(here  $\bar{\kappa}$  is the strength of the fermion quadrupole interaction)

- ii) the relative value  $\chi_\rho$  then, is given by the expression

$$\chi_\rho = \chi_\rho^0 (\Omega_Q - 2N_\rho) / \sqrt{\Omega_\rho - N_\rho} \quad (\rho \equiv \pi, \nu) . \quad (2.29)$$

We show the dependence of  $\varepsilon$ ,  $\kappa$  and  $\chi_\rho$  for a series of isotones in the 50-82 shell where all orbitals are considered as one large degenerate  $j=31/2$  shell ( $\Omega=16$ ) (fig.2.4).

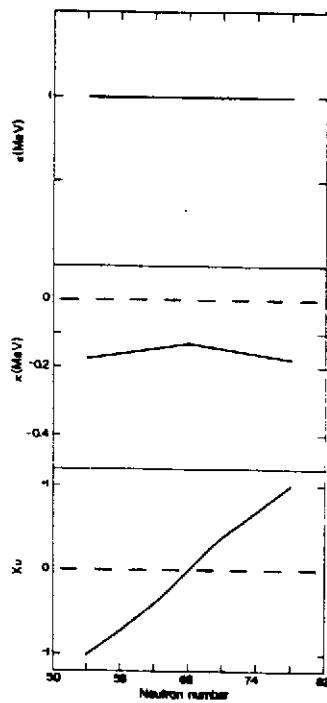


fig.2.4.

The dependence of  $\epsilon, \kappa, \chi_\rho$  on  $N_\nu$  as expected using the shell-model theory with degenerate single-particle orbitals.

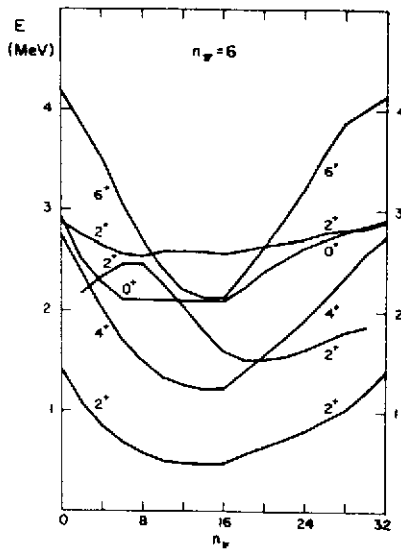


fig.2.5.a.

The energy spectra of even-even nuclei, for fixed proton number  $n_p = 2N_\pi = 6$ , and varying neutron number  $0 \leq n_\nu \leq 32$ , in the single j approximation.

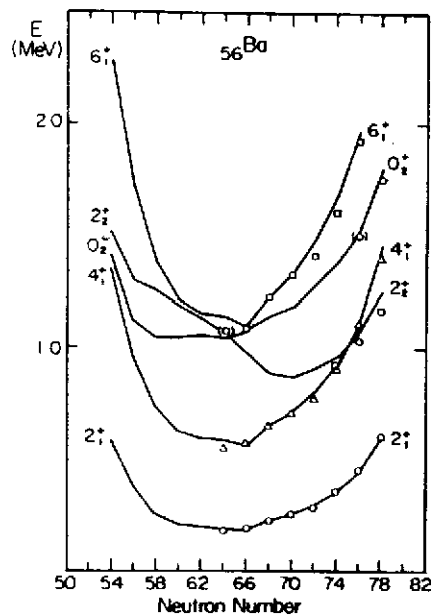


fig.2.5.b.

Calculated energy spectra in  $\text{Ba}(n_\pi=6)$ . The circles, squares and triangles denote experimental values.

More detailed calculations studying the parameter behaviour have been given by Duval, Barrett (for two  $j$ -shells)<sup>22)</sup> and by Pittel et al. (for many non-degenerate shells)<sup>23)</sup> where the major trends in  $\epsilon, \kappa, \chi_\rho$  are retained. A full calculation along the above lines, using a delta interaction and a quadrupole proton-neutron force was carried out by T.Otsuka<sup>21)</sup>. Results for the case  $n_\pi=6$  ( $0 \leq n_\nu \leq 14$ ) are presented in fig.2.5 for a single  $j$  ( $j=31/2$ ) approximation together with a fit (using  $\epsilon, \kappa, \chi_\rho, V_{\pi\pi}, V_{\nu\nu}$  as parameters) for the Ba nuclei. Thus, it appears that many nuclear properties in medium-mass and heavy mass regions are rather insensitive to details and only depend on gross features such as

- the existence of closed shells at 50, 82, 126
- the number of valence protons  $n_\pi$  and neutrons  $n_\nu$ .

### 2.3 Conclusion

We have shown how, starting from general shell-model techniques, and using the pairing and quadrupole force components a rather interesting approximation to the shell-model could be determined. The basic approximations are the S, D pair truncation and subsequently, the boson (s,d) space mapping. A boson Hamiltonian is obtained which for the lowest lying levels is determined via the shell-model S,D basis and shell-model

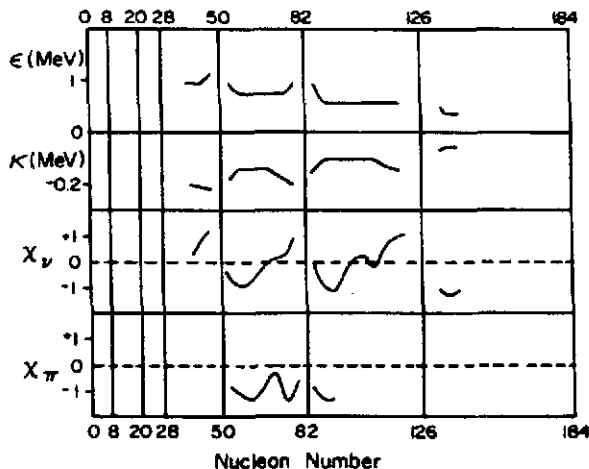


fig.2.6.  
Behaviour of the parameters  $\epsilon, \kappa$  and  $\chi_\nu$  as a function of  $N_\nu$  and of  $\chi_\pi$  as a function of  $N_\pi$ .

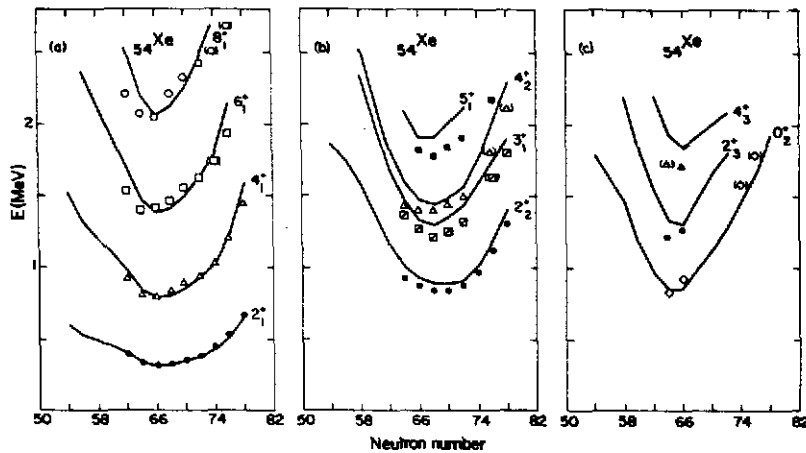


fig.2.7.  
Comparison between calculated (IBM-2) and experimental energy levels in Xe.

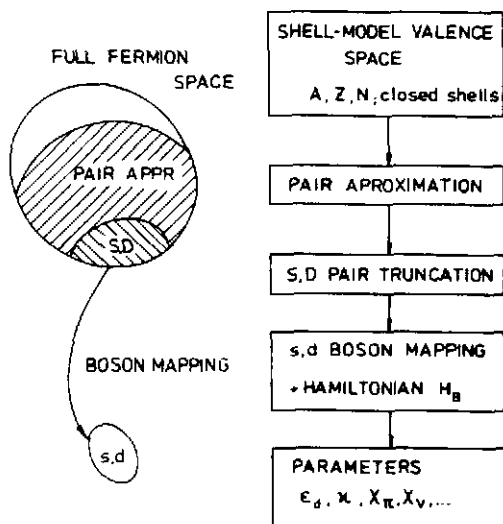


fig.2.8.  
Schematic representation of the approximations underlying the interacting boson model when starting from the full shell-model valence space.

interactions. This Hamiltonian is able to describe a large class of collective states in medium heavy and heavy nuclei. One can now also from here on, consider the parameters  $\epsilon$ ,  $\kappa$ ,  $\chi_\rho$ , .. as free parameters that are determined in order to describe nuclear excited states optimally (fig.2.6). In order to carry out such a program, the general  $H_B$  needs to be diagonalized in the boson basis of eq.(2.13). A general code has been written by T. Otsuka for performing this task (NPBOS)<sup>24)</sup> and I show some typical results (fig.2.7). The general strategy for carrying out an IBM-2 calculation is schematically depicted in fig.2.8.



### 3.1 Introduction

In lectures 1, 2 we have tried to set up a shell-model description of nuclear quadrupole collective motion using the pairing (identical nucleons) and quadrupole proton-neutron interactions. It was shown that an interacting boson approximation (IBM-2) gives a very nice approximation to the full shell-model many body problem and that the underlying parameters in it can be related to the nuclear shell-model interaction and the shell-model space. We can also take the philosophy of the IBM-2 as a phenomenological model defined in the boson space itself and thereby study collective motion resulting from the interactions and possible symmetries in this boson space. In the latter approach (IBM-1), the distinction between proton and neutron variables is left out (and thus also the relation to the nuclear shell-model), a procedure that can be carried out in a specific way. Here, I will not go into a discussion of this IBM-2  $\rightarrow$  IBM-1 projection since the IBM-1 form is just a subspace of the IBM-2 where proton and neutron bosons are moving in a symmetrized way but I refer to the existing literature<sup>25,26</sup>).

### 3.2 Symmetries

In many problems in physics, exact solutions can be obtained if the Hamiltonian has certain symmetries. Rotational invariance leads in general to the possibility to characterize the angular eigenfunctions by quantum number  $l$ ,  $m$ , quantum numbers related to the rotation group  $O(3)$  and  $O(2)$  in three and two dimensions. The group structure of the boson model is of course more complex but can be discussed in a 6-dimensional space spanned by the  $s^+$ ,  $d_\mu^+$  ( $\mu = -2, \dots, +2$ ) bosons. The column vector

$$b_\mu^+ \equiv \begin{bmatrix} s^+ \\ d_2^+ \\ d_1^+ \\ \vdots \\ d_{-2}^+ \end{bmatrix}, \quad (3.1)$$

then transforms according to the group U(6) and the s and d bosons basis states

$$B = \underbrace{b_{\mu}^{+} b_{\pi}^{+} b_{\kappa}^{+} \dots}_{N} |0\rangle \quad , \quad (3.2)$$

therefore form the totally symmetric representations of the group U(6), which is characterized by the number of bosons N. In the present section 3, where no distinction is made between proton and neutron bosons, we call N the total boson number. The 36 bilinear combinations  $G_{\mu\nu} = b_{\mu}^{+} b_{\nu}$  ( $\mu, \nu = 1, 2, \dots, 6$ )  $b^{+} \equiv (s^{+}, d^{+})$  form a U(6) Lie-algebra since these generators "close" under commutation. This is the case if for the generators  $X_a$ , one has the relation

$$[X_a, X_b] = \sum_c C_{ab}^c X_c \quad . \quad (3.3)$$

The general two-body Hamiltonian within this U(6) Lie algebra consists of terms linear (single-boson energies) and quadratic (two-body interactions) in the generators  $G_{\mu\nu}$

$$\left. \begin{aligned} H &= E_0 + \sum_{\mu\nu} \epsilon_{\mu\nu} G_{\mu\nu} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{\mu\nu \\ \kappa\sigma}} U_{\mu\nu\kappa\sigma} G_{\mu\nu} G_{\kappa\sigma} \\ H &= E_0 + H' \end{aligned} \right\} \quad (3.4)$$

indicating that, in the absence of  $H'$ , all possible states for given N, will be degenerate in energy. The interaction  $H'$  will then split the different possible states for given N and one needs a matrix diagonalization in general.

There are now situations where the Hamiltonian H can be rewritten exactly as a sum of Casimir (invariant) operators of a complete chain of subgroups of G,  $G \supset G' \supset G'' \dots$

$$H = \alpha C(G) + \alpha' C(G') + \alpha'' C(G'') + \dots \quad (3.5)$$

Then, the eigenvalue problem for H can be solved in closed form and leads to energy (mass) formulae in which the eigenvalues are given in terms of the quantum numbers labelling the irreducible representations (irrep) of  $G \supset G' \supset G'' \dots$  e.g.

$$E = \alpha \langle C(G) \rangle + \alpha' \langle C(G') \rangle + \alpha'' \langle C(G'') \rangle + \dots \quad (3.6)$$

where  $\langle \dots \rangle$  are the expectation values. In this case one says that the systems has a dynamical symmetry (e.g. Gell-Mann-Ne'eman's SU(3) mass equation, see also appendix 1).

So the general problem to be solved becomes :

- i) to identify all possible subgroup chains of U(6)
- ii) to find the irrep for these chains of groups,
- iii) to evaluate the expectation values of the Casimir invariants.

Problems (ii) and (iii) are well defined group theoretical problems, (i) depends on the physics of the problem.

### 3.2.1 Subgroup chains of U(6)

#### Chain I

The 25 generators  $T_m^{(1)} \equiv (d^+ \tilde{d})_m^{(1)}$  close on commutation. They form the algebra U(5), and we have  $U(6) \supset U(5)$ . Further, the three components of  $T^{(1)}$  and the seven components of  $T^{(3)}$ , 10 altogether, close on commutation. They generate the algebra O(5). Clearly, again, the three components of  $T^{(1)} \propto \hat{L}$  close on commutation, and trivially  $T_0^{(1)}$  by itself closes on commutation. The first chain thus emerges as

$$U(6) \supset U(5) \supset O(5) \supset O(3) \supset O(2) \quad (3.7)$$

#### Chain II

The one operator

$$s^+ s + \sqrt{5} T^{(0)} = \hat{n}_s + \hat{n}_d = \hat{N}, \quad (3.8)$$

the three components of  $T^{(1)} = \hat{L}/\sqrt{10}$  and the five components of  $Q$

$$Q = d^+s + s^+\tilde{d} - \frac{\sqrt{7}}{2} (d^+\tilde{d})^{(2)}, \quad (3.9)$$

close on commutation. The total of nine operators generate  $U(3)$ . Moreover,  $\hat{N}$  separates from the other eight, which then generate  $SU(3)$ . Omitting  $U(3)$  as trivially related to  $SU(3)$ , the second chain reads

$$U(6) \supset SU(3) \supset O(3) \supset O(2), \quad (3.10)$$

$O(3)$  and  $O(2)$  being obvious as in chain I.

### Chain III

The ten generators of  $O(5)$  identified above and the five components of  $d^+s + s^+\tilde{d}$ , 15 together, close on commutation. They can be identified as the generators of  $O(6)$ . The complete chain can now be written down immediately as

$$U(6) \supset O(6) \supset O(5) \supset O(3) \supset O(2). \quad (3.11)$$

Equations (3.7), (3.10), (3.11) are the only possible chains of subgroups of  $U(6)$  since the presence of  $O(3)$  is required by the good angular momentum of physical states. The chains are referred to as I, II, III or, alternatively, as  $U(5)$ ,  $SU(3)$ ,  $O(6)$  symmetries of  $U(6)$ .

### 3.2.2 Casimir operators

The Casimir operators of a given group are found by requiring that they commute with all the generators of the group. The Casimir operators then also commute with each other. By the defining property (see also ref.27)) we can derive the Casimir operators of the groups appearing in our chains I, II and III. We denote linear, quadratic etc. Casimir operators as  $C_1$ ,  $C_2$  etc. The results are

$$\left. \begin{aligned}
 C_{1U6} &= \hat{N}, \quad C_{2U6} = \hat{N}(\hat{N}+5), \\
 C_{1U5} &= \hat{n}_d, \quad C_{2U5} = \hat{n}_d(\hat{n}_d+4), \\
 C_{2O5} &= \frac{2}{5} \hat{L}^2 + 4(T^{(3)})^2 \\
 C_{2O3} &= \hat{L}^2 \\
 C_{2SU3} &= 2Q^2 + \frac{3}{4} \hat{L}^2 \\
 C_{2O6} &= \hat{N}(\hat{N}+4) - 4P^+P,
 \end{aligned} \right\} \quad (3.12)$$

where  $P^+$  is given by  $1/2(d^+.d^+ + s^+.s^+)$ . There exists<sup>27)</sup> also a  $C_{3SU3}$  but it is not needed for the IBA. These Casimir operators are written with the multiplicative factors, undetermined by the defining property, of ref.28).

### 3.2.3 Representation labels

Those generators of a group which commute and the group's Casimir operators can be simultaneously diagonalized. Their quantum numbers provide representation labels and basis-state labels within a representation. Suitable labels and their possible values can be found analogously to the algebraic treatment of angular momentum. Only the algebraic procedures are generally more complicated.

The next question is : what representations of a subgroup belong to a given representation of the larger group? One case we already know : the representations of  $O(3)$  are labelled by  $j$  and those of its subgroup  $O(2)$  by  $m = j, j-1, \dots, -j$ . The procedure of answering the question above is known as the reduction of a group with respect to its subgroup. Angular momentum coupling, e.g. the result that two quadrupole bosons couple to  $J = 0, 2, 4$ , is in fact an example of such reduction. The technique of Young tableaux, well presented in ref.<sup>19,29)30)</sup>, is the customary bookkeeping device in group reduction.

For IBA-1 a considerable simplification results from the complete symmetry of the states required by the identical bosons. A general representation of  $U(6)$  is labelled by six quantum

numbers,  $[N_1 N_2 N_3 N_4 N_5 N_6]$ , but IBM-1 only contains the completely symmetric representation  $[N00000] \equiv [N]$ . Likewise the subgroup labels are simplified. Below, we discuss the quantum numbers and their possible values for the three chains.

### Chain I

The subgroup  $U(5)$  of  $U(6)$  carries the single label  $n_d$  for completely symmetric states. The following link  $O(5)$  is characterized by the quantum number  $\nu$ , the d-boson seniority : number of d bosons not pairwise coupled to angular momentum 0. The quantum number  $L$  and  $M$  go with  $O(3)$  and  $O(2)$ . It turns out that an additional quantum number is needed for the reduction  $O(5) \rightarrow O(3)$ . In other words, an additional label is needed to classify completely the basis states belonging to given  $N n_d \nu$ . The number  $n_\Delta$  of d-boson triplets coupled to zero angular momentum is a possible choice for that quantum number, and the IBM has adopted it. Chain I with the quantum numbers then appears as

$$\begin{array}{cccccc}
 U(6) \supset U(5) \supset O(5) \supset O(3) \supset O(2) & . & & & & \\
 [N] & n_d & \nu & n_\Delta & L & M
 \end{array} \quad (3.13)$$

The square brackets are retained around  $N$  to remind of the complete symmetry.

The possible values of the various quantum numbers are here quite obvious. For a given nucleus the total boson number  $N$  is fixed. For  $n_d$  we have the rule

$$n_d = N, N-1, \dots, 0; n_s = N - n_d. \quad (3.14)$$

The seniority quantum number follows the rule

$$\nu = n_d, n_d-2, \dots, 1 \text{ or } 0. \quad (3.15)$$

Obviously we have

$$n_\Delta = 0, 1, \dots \quad (3.16)$$

For enumerating the possible angular momenta  $L$ , define the auxiliary quantity

$$\lambda \equiv v - 3n_{\Delta} \geq 0, \quad (3.17)$$

i.e. the number of  $d$  bosons not in angular-momentum-zero pairs of triplets. Then the allowed angular momenta are

$$L = 2\lambda, 2\lambda-2, 2\lambda-3, \dots, \lambda+1, \lambda, \quad (3.18)$$

note that  $2\lambda-1$  is missing. That the algorithm works can be checked by the usual  $m$ -table construction<sup>19)</sup> or by means of Young tableaux<sup>29)</sup>.

With the quantum numbers and their ranges established, we have now a complete set of basis states of  $U(6)$  in terms of chain I :

$$|[N] n_d v n_{\Delta} L M \rangle \equiv U(5) \text{ basis.} \quad (3.19)$$

For more details we refer to the IBM-1 article of ref.31.

#### Chain II

For chain II, eq.(3.10), we need the representation labels of  $SU(3)$ . There are two of them because the group has two Casimir operators (sect.3.2.2.). They are denoted  $(\lambda\mu)$ . As was the case for  $O(5) \rightarrow O(3)$  in chain I, here too is an additional quantum number needed for the reduction  $SU(3) \rightarrow O(3)$ . This quantum number is called  $K$  and it is related to the  $K$  of the geometric collective model. However, the  $SU(3)$  states are wrought with great technical complications (angular-momentum projection, nonorthogonal and overcomplete states). Suffice it to refer to Elliott's<sup>32)</sup> and Vergados's<sup>33)</sup> pioneering work. Chain II with its quantum numbers reads

$$\begin{array}{ccccccc} U(6) & \supset & SU(3) & \supset & O(3) & \supset & O(2). \\ [N] & & (\lambda\mu) & & K & & L & & M \end{array} \quad (3.20)$$

The ranges of the quantum numbers are not as obvious as for chain I but must be found by use of Young tableaux. Generalized, the results for  $U(6) \rightarrow SU(3)$  is (see IBM-1 article of ref.34)

$$\begin{aligned}
 (\lambda\mu) = & (2N, 0), (2N-4, 2), \dots, \begin{cases} (0, N) & N \text{ even} \\ (2, N-1) & N \text{ odd} \end{cases} \\
 & (2N-6, 0), (2N-10, 2), \dots, \begin{cases} (0, N-3) \\ (2, N-4) \end{cases} \\
 & (2N-12, 0), (2N-16, 2), \dots, \begin{cases} (0, N-6) \\ (2, N-7) \end{cases} \\
 & \dots \\
 & \vdots \\
 & \vdots
 \end{aligned} \tag{3.21}$$

Note that, unlike Elliott's original shell-model study, all  $\lambda$  and  $\mu$  are here even.

For determining the L values belonging to a given  $(\lambda\mu)$ , define an auxiliary quantity

$$K_0 \equiv \min\{\lambda, \mu\}, \min\{\lambda, \mu\} - 2, \dots, 0 \tag{3.22}$$

Then the L values are, generalized from a building-up process<sup>29,30)</sup> with Young tableaux,

$$\begin{aligned}
 L = & K_0, K_0 + 1, \dots, K_0 + \max\{\lambda, \mu\} \text{ for } K_0 \neq 0, \\
 L = & 0, 2, \dots, \max\{\lambda, \mu\} \text{ for } K_0 = 0.
 \end{aligned} \tag{3.23}$$

The IBM assigns the L values to K bands [K is called  $\kappa$  by Vergados<sup>33)</sup> and  $\chi$  by Iachello<sup>30,34)</sup>] according to an orthogonalization scheme due to Vergados, Vergados's rule for short. Then the set of K values is taken to be the same as the set of  $K_0$  values. When for a given  $(\lambda\mu)$  an L occurs only once, it is assigned to the lowest possible K value; when an L occurs twice, it is assigned to the two lowest possible K values etc. "Possible" here implies that only even spins are allowed for  $K = 0$ .

Unlike the original Elliott basis, the Vergados basis is orthogonal and complete, and we record it as



$$|[N](\lambda\mu) K L M\rangle \equiv \text{SU}(3) \text{ basis} . \quad (3.24)$$

These states have mixed values of the geometric, or Elliott's K.

### Chain III

The quantum number labelling the completely symmetric representation of  $O(6)$  is called  $\sigma$ . In a formal way it is a generalization of the  $O(5)$  quantum number  $\nu$ , although it does not have a similar direct physical meaning. The definition of  $\sigma$  and its properties are arrived at by a mathematical study of the boson quasispin group  $SU(1,1)$  : the procedure is a straightforward extension of the boson quasispin considerations of ref.31. Beyond  $O(6)$  the chain is identified with chain I and thus reads with labels

$$\begin{array}{ccccccccc} U(6) & \supset & O(6) & \supset & O(5) & \supset & O(3) & \supset & O(2) . \\ [N] & & \sigma & & \nu & & n_{\Delta} L & & M \end{array} \quad (3.25)$$

The quasispin procedure gives the spectrum of  $\sigma$  as

$$\sigma = N, N-2, \dots, 0 \text{ or } 1. \quad (3.26)$$

By inspection of the various states of a given  $\sigma$  one finds

$$\nu = \sigma, \sigma-1, \dots, 0. \quad (3.27)$$

Equations (3.16) to (3.18) are valid also here and give the possible values of  $n_{\Delta}$  and  $L$ . The original<sup>35)</sup> and most subsequent IBM literature uses for  $O(6)$  the redundant notation

$$\tau \equiv \nu, \nu_{\Delta} \equiv n_{\Delta}. \quad (3.28)$$

We have now defined

$$|[N] \sigma \nu n_{\Delta} L M\rangle \equiv O(6) \text{ basis}. \quad (3.29)$$

Let us finally note that the three bases (3.19), (3.24) and (3.29) span the same complete space for all IBM-1 states. The bases may be transformed into one another by unitary transformations.

### 3.2.4 Eigenvalues of the Casimir operators

The eigenvalues of the Casimir operators (3.12) are found by operator algebra. The group  $SU(2) \simeq O(3)$  again serves as an example, and we adopt a shorthand notation like

$$\langle \vec{J}^2 \rangle_j = j(j+1) . \quad (3.30)$$

The results are

$$\left. \begin{aligned} \langle C_{1U6} \rangle_N &= N, & \langle C_{2U6} \rangle_N &= N(N+5), \\ \langle C_{1U5} \rangle_{n_d} &= n_d, & \langle C_{2U5} \rangle_{n_d} &= n_d(n_d+4), \\ \langle C_{2O5} \rangle_v &= v(v+3), \\ \langle C_{2O3} \rangle_L &= L(L+1), \\ \langle C_{2SU3} \rangle_{(\lambda\mu)} &= (\lambda^2 + \mu^2 + \lambda\mu + 3\lambda + 3\mu), \\ \langle C_{2O6} \rangle_\sigma &= \sigma(\sigma+4). \end{aligned} \right\} \quad (3.31)$$

Of these, some are obtained trivially. The  $O(5)$  and  $O(6)$  results emerge from calculations with boson quasispins. The  $SU(3)$  result is quite tedious to get. Instead of working out each case separately, one may wish to use ready-made algorithms for the eigenvalues of various types of group<sup>30)</sup>.

### 3.3 IBA-1 group structure and dynamic symmetries

#### 3.3.1 Group structure

The IBM-1 Hamiltonian is built up of the generators of the group U(6). This means that IBM-1 has U(6) group structure. What is more, the six-parameter Hamiltonian can be expressed in terms of the Casimir operators of the subgroups of U(6) (eqs.3.12) as

$$H = \varepsilon C_{1U5} + \alpha C_{2U5} + \beta C_{2O5} + \gamma C_{2O3} + \delta C_{SU3} + \eta C_{2O6}. \quad (3.32)$$

The parameters are simply related to those of more phenomenological Hamiltonians<sup>25,30</sup>). Note that, for all its parameters nonzero, eq.(3.32) contains Casimir operators from all three subgroup chains.

#### 3.3.2 Dynamic symmetries

When the Hamiltonian contains Casimir operators from only one subgroup chain, it is said to possess a dynamic symmetry, which is then suitably labelled by the chain. Thus IBM-1 has dynamic symmetries I  $\equiv$  U(5), II  $\equiv$  SU(3) and III  $\equiv$  O(6). It should be emphasized that the dynamic symmetries are special cases of IBM-1; the general case has no dynamic symmetry although it does have U(6) group structure.

##### Dynamic symmetry I, U(5)

By putting  $\delta = 0 = \eta$  in eq.(3.32), we obtain a Hamiltonian containing only chain-I Casimir operators and thus representing dynamic symmetry I, or U(5) :

$$\begin{aligned} H_I &= \varepsilon C_{1U5} + \alpha C_{2U5} + \beta C_{2O5} + \gamma C_{2O3}, \\ E_I &= \varepsilon n_d + \alpha n_d(n_d+4) + \beta v(v+3) + \gamma L(L+1). \end{aligned} \quad (3.33)$$

##### Dynamic symmetry II, SU(3)

With  $\varepsilon, \alpha, \beta, \eta = 0$ , the Hamiltonian displays dynamic symmetry II, or SU(3) :

$$\begin{aligned} H_{II} &= \gamma C_{203} + \delta C_{2SU3} , \\ E_{II} &= \gamma L(L+1) + \delta (\lambda^2 + \mu^2 + \lambda\mu + 3\lambda + 3\mu) . \end{aligned} \quad (3.34)$$

Dynamic symmetry III, O(6)

With  $\varepsilon, \alpha, \delta = 0$ , we have dynamic symmetry III, or O(6) :

$$\begin{aligned} H_{III} &= \beta C_{205} + \gamma C_{203} + \delta C_{206} \\ E_{III} &= \beta v(v+1) + \gamma L(L+1) + \delta \sigma(\sigma+4) \end{aligned} \quad (3.35)$$

### 3.3.3 Example : dynamic U(5) symmetry with N=3

We choose to use  $N = 3$  as an example to show in detail how the dynamic symmetries of IBM-1 are worked out. It is the smallest  $N$  which demonstrates the substance of the model, and it leads to tractable and compact results.

For U(5), the quantum numbers for  $N = 3$  are shown in table 3.1. Also the auxiliary quantity  $\lambda$  is shown in the table although it is not needed as a state label. The quadrupole phonon spectrum carries the same quantum numbers. We note in passing

Table 3.1. U(5)-chain quantum numbers for  $N = 3$

$n_d$	$v$	$n_\Delta$	$\lambda$	$L$
0	0	0	0	0
1	1	0	1	2
2	2	0	2	4, 2
		0	0	0
3	3	0	3	6, 4, 3
		1	0	0
	1	0	1	2

that the states of the same  $L$  distinguished by  $v$  occur first at  $n_d = 4$ , and states of the same  $L$  and of the same  $v$  distinguished by  $n_\Delta$  occur first at  $n_d = 6$ . The IBM  $U(5)$  spectrum, however, differs from the geometric spectrum in that the former cuts off at  $n_d = N$ ;  $N \rightarrow \infty$  corresponds to the geometric model. A cutoff fixed by  $N$  is a general feature of the IBM.

The energy spectrum given by eq.(3.33), with parameters chosen for a qualitative resemblance to experiment, is shown in fig.3.1. All ten states of table 3.1 are included.

Quasirotational ground ( $g$ ),  $\beta$  and  $\gamma$  bands are indicated.

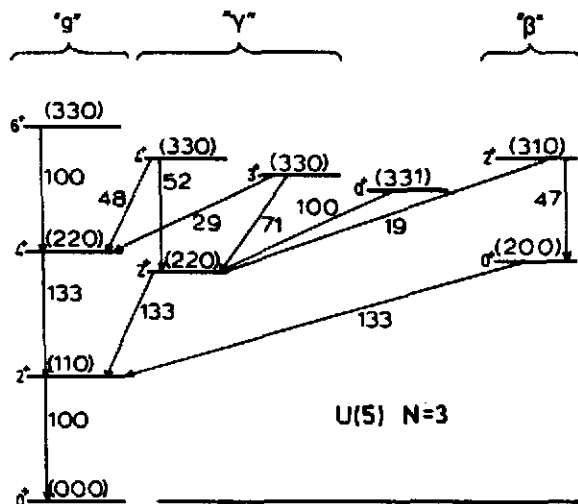


fig.3.1.

The  $U(5)$  spectrum with  $N=3$ . The quantum numbers  $(n_d, v, n_\Delta)$  are given.  $B(E2)$  values are normalized to  $B(E2; 2_1^+ \rightarrow 0_1^+)$  and quasi-bands are also shown.

All  $B(E2)$  values allowed by the selection rules are indicated in fig.3.1. They are normalized to  $B(E2; 2_1^+ \rightarrow 0_1^+) = 100$ . The  $B(E2)$  values for  $U(5)$  are given essentially by boson c.f.p. coefficients; some algebraic formulas have been worked out in ref.<sup>31)</sup>. Numerical boson c.f.p. coefficients have been tabulated by Bayman and Lande<sup>36)</sup>. However, their phases differ from those of the subroutine CFPGEN of PHINT<sup>37)</sup> and their additional label is not the quantum number  $n_\Delta$ .

The IBA again differs from the geometric limit  $N \rightarrow \infty$ . The effect of a finite  $N$  on  $B(E2)$  is simple for dynamic symmetry I :

$$B(E2)_N = \frac{N - n_d}{N} B(E2)_\infty, \quad (3.36)$$

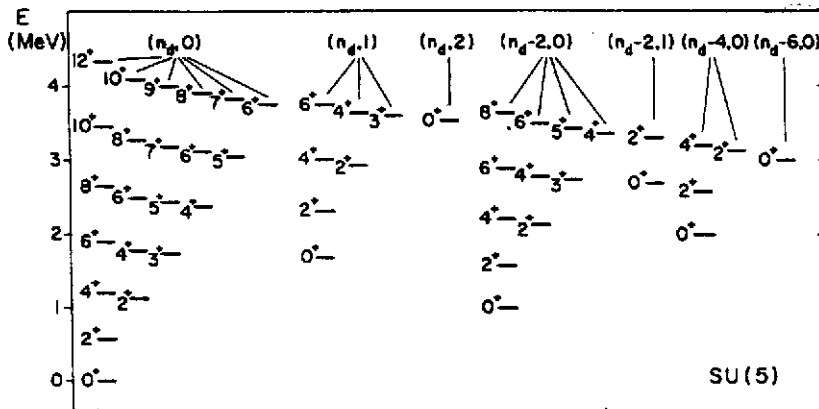


fig.3.2.a.  
A theoretical U(5) spectrum with  $N=6$ . The notation  $(\nu, n_{\Delta})$  is given at the top.

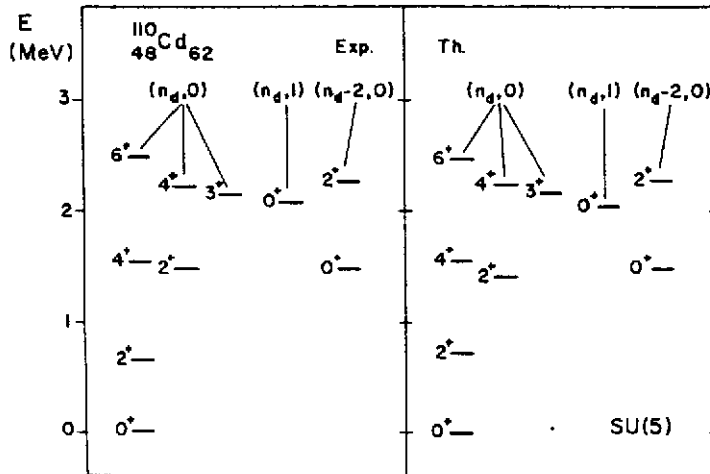


fig.3.2.b.  
Experimental energy levels of  $^{110}\text{Cd}(N=7)$  and a U(5) fit.

where  $n_d$  refers to the final state and  $B(E2)_{\infty}$  is the phonon value. Thus the IBM predicts a fall-off in the  $B(E2)$  values as compared to the geometric model. Such a fall-off is a general feature of the IBM, although the  $N$  dependence for dynamic symmetries II and III is more complicated than in eq.(3.36), and outside the dynamic symmetries it only appears numerically. The experimental manifestation of finite  $N$  has been recently studied for deformed nuclei by Casten et al.<sup>38</sup>).

An example for the vibrational limit U(5) with a large boson number and a comparison for  $^{110}\text{Cd}$  is presented in fig.3.2. Similar figures for the SU(3) limit (fig.3.3) and the O(6) limit (fig.3.4) are given.

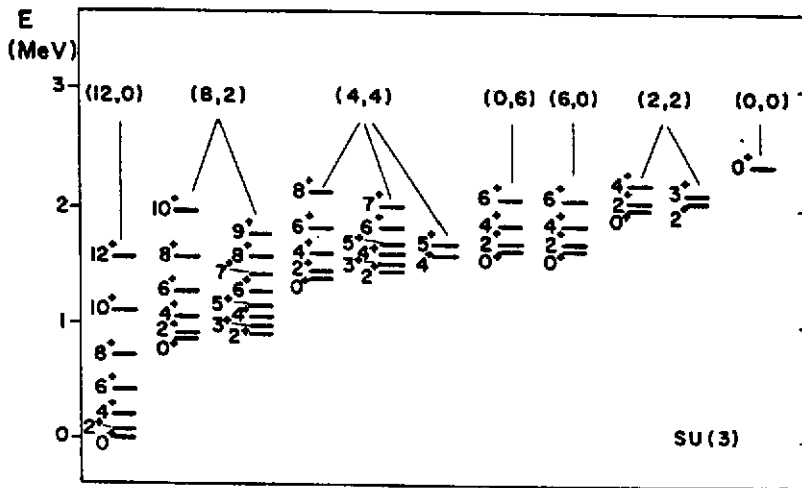


fig.3.3.a.  
A theoretical SU(3) spectrum with  $N=6$ . The notation  $(\lambda, \mu)$  is given at the top.

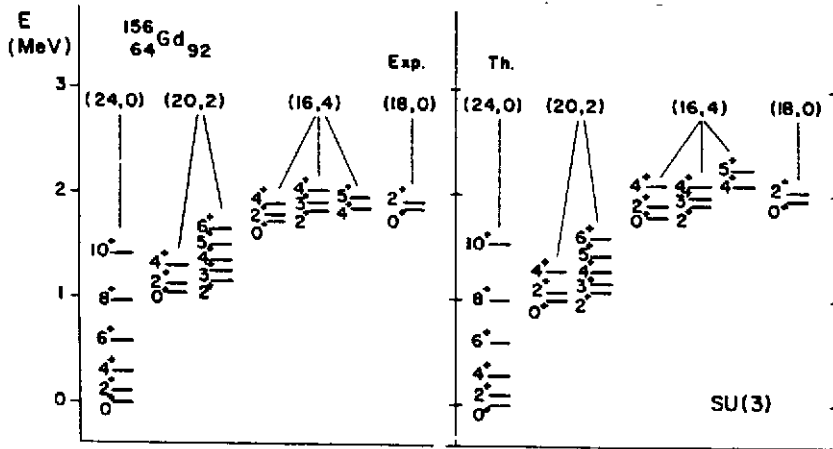


fig.3.3.b.  
Experimental energy levels of  $^{156}\text{Gd}$  ( $N=12$ ) and a SU(3) fit.

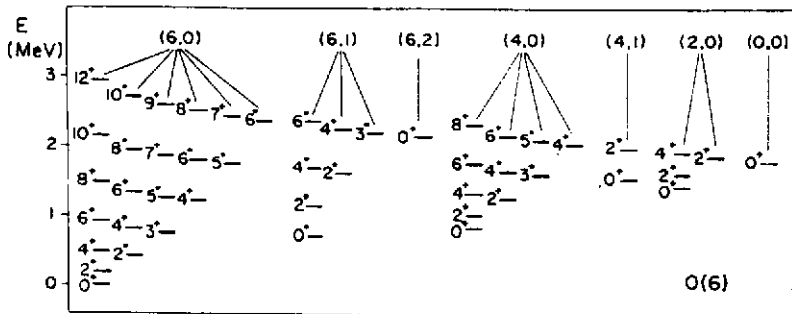


fig.3.4.a.  
A theoretical O(6) spectrum with  $N=6$ . The notation  $(\sigma, n_{\Delta})$  is given at the top.

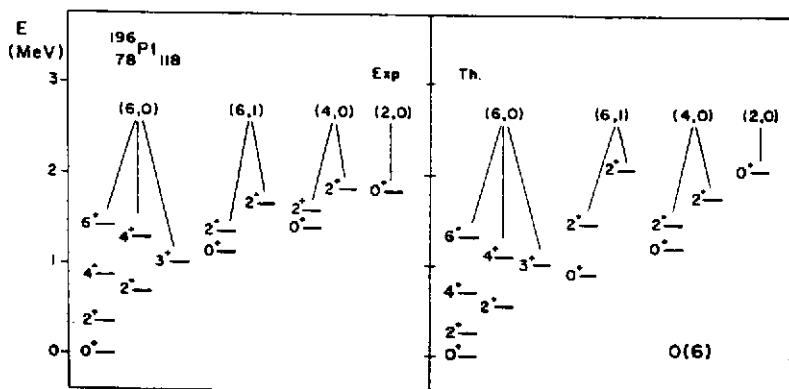


fig.3.4.b.  
Experimental energy levels of  $^{196}\text{Pt}$  ( $N=6$ ) and an O(6) fit.

### 3.4 Conclusion

We have indicated how the (s,d) interacting boson model, when a distinction between proton and neutron bosons is left out, using the concept of dynamical symmetry, leads to exact solvable cases for the nuclear many body problems in the vibrational, rotational and  $\gamma$ -unstable rotor limits. The present method can be extended for the use of more general boson Hamiltonians. In these cases, a numerical solution of the IBM-1 problem, using the U(5) wave functions as a basis, can be carried out using the package PHINT<sup>37)</sup>.



## Appendix

A certain working knowledge of group theory is necessary for understanding and appreciating the IBM. Group theory is essential for defining basis states and for identifying the dynamic symmetries and deriving their consequences. Useful, to-the-point references are Lipkin's book<sup>39)</sup> and Iachello's Gull Lake lectures<sup>30)</sup>. Here we introduce basic concepts of group theory by working out a simple example : the proton-neutron isospin.

Consider the two-dimensional space spanned by orthogonal unit vectors  $|\pi\rangle = a_{\pi}^{\dagger}|0\rangle$  and  $|\nu\rangle = a_{\nu}^{\dagger}|0\rangle$ , representing the proton and neutron states, respectively, of the nucleon. The general state  $\psi$  of the space is a linear combination of  $|\pi\rangle$  and  $|\nu\rangle$ . Unitary transformations on  $\psi$ , i.e. essentially rotations in the  $\pi\nu$  space, are said to form the unitary group in two dimensions,  $U(2)$  or  $U2$  for short. The creation and annihilation operators obey fermion anticommutators :

$$\{a_{\pi}, a_{\pi}^{\dagger}\} = 1, \{a_{\nu}, a_{\nu}^{\dagger}\} = 1 \quad , \quad (A.1)$$

all other commutators being zero.

Now form the bilinear operators

$$a_{\pi}^{\dagger}a_{\nu}, a_{\nu}^{\dagger}a_{\pi}, a_{\pi}^{\dagger}a_{\pi}, a_{\nu}^{\dagger}a_{\nu} \quad , \quad (A.2)$$

then we can make the linear combinations

$$\begin{aligned} a_{\pi}^{\dagger}a_{\nu} &\equiv t_{+} \equiv t_1 + it_2 \quad , \quad a_{\nu}^{\dagger}a_{\pi} \equiv t_{-} \equiv t_1 - it_2 \quad , \\ \frac{1}{2}(a_{\pi}^{\dagger}a_{\pi} - a_{\nu}^{\dagger}a_{\nu}) &\equiv t_3 \quad , \quad a_{\pi}^{\dagger}a_{\pi} + a_{\nu}^{\dagger}a_{\nu} \equiv B \quad . \end{aligned} \quad (A.3)$$

Thus we have four linearly independent operators  $t_1$ ,  $t_2$ ,  $t_3$  and  $B$ , which are Hermitian. Next we calculate all commutators within the latter set. The result is

$$[t_1, t_2] = it_3 \text{ and cyclic permutations of } 123, \quad (A.4)$$

$$[B, t_k] = 0 \quad , \quad k = 1, 2, 3 \quad .$$

The four operators are said to close on commutation since the righthand sides of the commutators are linear combinations of the same operators. Likewise the original operators (A.2), or the set with  $t_{\pm}$ , close on commutation. As defined by this property, the four operators are said to form a Lie algebra, here designated by  $U(2)$ . The group of transformations on  $\psi$  is likewise called a Lie group. It is appropriate to remark that the various concepts of group theory introduced here and below are quite general and not restricted to the simple example of  $U(2)$ .

The four operators are the generators of the group  $U(2)$ . Note that the operator  $B$  commutes with all the generators  $t_k$  and of course with itself. Such an operator which commutes with all the generators of the group is called a Casimir operator of that group. Further,  $B$  is called the linear Casimir operator since it is linear in the generators.

In fact, eq. (A.4) shows that the  $t_k$  by themselves form a Lie algebra, called  $SU(2)$  with  $S$  standing for "special". The generators of  $SU(2)$  being a subset of those of  $U(2)$ , the group  $SU(2)$  is called a subgroup of  $U(2)$ , denoted as

$$U(2) \supset SU(2) \quad . \quad (A.5)$$

Commutation shows that

$$t_1^2 + t_2^2 + t_3^2 \equiv \vec{t}^2 \quad (A.6)$$

is a Casimir operator of  $SU(2)$ . It is quadratic in the generators and the only Casimir operator of  $SU(2)$ . It is also the quadratic Casimir operator of  $U(2)$ , which thus has two Casimir operators.

The notation  $\vec{t}$  serves to underline the fact that it is algebraically like the angular-momentum vector  $\vec{J}$ : the 123 components of both are Hermitian and obey commutation relations of the form (A.4). The similarity is purely mathematical; mechanical angular momentum and nucleon isospin are physically completely different things. Still all results of angular-momentum theory, are directly applicable to isospin.

The algebraic similarity between  $\vec{t}$  and  $\vec{J}$  can be expressed in terms of group theory. The vector operator  $\vec{J}$  is the generator of infinitesimal rotations in physical coordinate space. Such transformations are orthogonal transformations in three dimensions and thus form the group  $O(3)$ . The technical statement of the similarity is that  $O(3)$  and  $SU(2)$  are homomorphic

$$O(3) \simeq SU(2) \quad . \quad (A.7)$$

The generators (A.2), or (A.3), provide a realization of  $SU(2)$ . An example of another realization are the familiar operators of one-particle orbital angular momentum :  $L_x = -i(y\partial/\partial z - z\partial/\partial y)$  etc.

To proceed with the example, we may now write angular-momentum relations equivalently to those of isospin  $SU(2)$ . Basic relations, resulting from the algebra of eq. (A.4), are

$$\left. \begin{aligned} \vec{J}^2 |jm\rangle &= j(j+1) |jm\rangle \quad , \\ J_z |jm\rangle &= m |jm\rangle \quad , \\ J_{\pm} |jm\rangle &= \sqrt{(j \pm m + 1)(j \mp m)} |j, m \pm 1\rangle \end{aligned} \right\} \quad (A.8)$$

with  $j = 0, 1/2, 1, \dots$  and  $m = j, j-1, \dots, -j$ . The basis  $|jm\rangle$ , with fixed  $j$  and all  $m$ , provides a representation of the generators, i.e. of the group. The representation is thus labelled by  $j$ , and  $m$  labels the basis states within the representation.

Generally a Lie algebra has several commuting generators, whose quantum numbers label the basis states. There are then equally many commuting Casimir operators, whose eigenvalues give rise to representation labels and the basis states are like  $|j_1 j_2 \dots j_n, m_1 m_2 \dots m_n\rangle$ . The number  $n$  is called the rank of the algebra or group. Thus  $SU(2)$  or  $O(3)$  is of rank 1. Sometimes additional labels are needed for a complete specification of basis states.

A representation can be spelled out in terms of matrices. Returning to the simple example, from eqs. (A.8) result the general matrix elements

$$\left. \begin{aligned}
 \langle j'm' | \vec{J}^2 | jm \rangle &= j(j+1) \delta_{j,j} \delta_{m'm} \quad , \\
 \langle j'm' | J_z | jm \rangle &= m \delta_{j,j} \delta_{m'm} \quad , \\
 \langle j'm' | J_{\pm} | jm \rangle &= \sqrt{(j \pm m + 1)(j \mp m)} \delta_{j,j} \delta_{m', m \pm 1} \quad .
 \end{aligned} \right\} \quad (A.9)$$

Clearly the generators  $J_{\pm}$  and  $J_z$  do not connect different representations : such representations are said to be irreducible. The Casimir operator  $\vec{J}^2$  is diagonal.

As a detailed example, the SU(2) representation matrices for  $j = 1$  look like

$$\begin{aligned}
 (J_+) &= \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad , \quad (J_-) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{bmatrix} \quad , \\
 (J_z) &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \quad , \quad (\vec{J}^2) = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix} \quad .
 \end{aligned} \quad (A.10)$$

This is the three-dimensional representation of SU(2), or equivalently of O(3). The same matrices could be written for the abstract vector  $\vec{t}$ . However, for  $\vec{t}$  this example would not mean the original proton-neutron states of isospin  $T = 1/2$  but an isospin triplet,  $T = 1$ , such as the charge states of the pion :  $\pi^+, \pi^-, \pi^0$ . The two-dimensional representation of SU(2) is called the fundamental representation of the group. Similarly the matrices (A.10) contain the fundamental representation of O(3).

A key problem in quantum mechanics is that of finding the energy eigenvalues,  $E_i$ . Group theory can be quite useful in solving this problem in, at least, two respects. Suppose, in fact, that we write down the Hamiltonian describing the system in terms of generators  $G_i$  of a group G

$$H = \sum_i \alpha_i G_i + \sum_{i,j} \beta_{i,j} G_i G_j + \dots \quad (A.11)$$

The expansion of H may stop at quadratic, cubic, ... terms. In general, in order to find the eigenvalues of H one must solve the problem numerical. Group theory helps here in that it provides a

basis in which H can be diagonalized. This basis is provided by the irreducible representations of a complete group chain that starts from G

$$G \supset G' \supset \dots \tag{A.12}$$

Since there are, in general, several chains, one can choose any of them and relate one another by an appropriate transformation.

The second way in which group theory is useful is in the case in which H can be written in terms only of Casimir operators of a complete chain of groups starting from G. This is a special case of (A.11), since now the coefficients in (A.11) must have special values. In this case, the eigenvalue problem for H can be solved analytically and all properties of the system can be calculated without the recourse to numerical studies. These situations are called dynamic symmetries.

As an example, consider the case of SU(2) discussed above. The most general Hamiltonian including up to quadratic terms is

$$H = \sum_i \alpha_i J_i + \sum_{i,j} \beta_{i,j} J_i J_j \tag{A.13}$$

This Hamiltonian can be diagonalized in the basis provided by the group chain

$$SU(2) \supset SO(2) \tag{A.14}$$

and labelled by j and m. In order to calculate the matrix elements of H, we need the matrix elements of the generators  $J_i$ . These have been obtained in eqs. (A.9).

Consider now, as a special case, the Hamiltonian

$$H = -G J_+ J_- \tag{A.15}$$

Then, since

$$J_+ J_- = J^2 - J_2 (J_2 - 1) \tag{A.16}$$

this Hamiltonian can be written in terms of Casimir invariants of the group chain (A.14). The corresponding problem is analytically soluble and the eigenvalues are obviously

$$E_m = - G[j(j+1) - m(m-1)] \quad ; \quad -j \leq m \leq j \quad . \quad (A.17)$$

The eigenfunctions are the basis states  $|j,m\rangle$ . Models of the type (A.13), based on the group  $SU(2)$  are usually called Lipkin models.

A very well-known example of this type of symmetry considerations to problems of physics (other than nuclear physics) is given by Gell-Mann-Ne'eman's  $SU(3)$ <sup>40)</sup> where one has

$$SU(3) \supset SU(2) \otimes U(1) \supset SO(2) \otimes U(1) \quad , \quad (A.18)$$

and the corresponding mass formula is the Gell-Mann-Okubo -formula<sup>41)</sup>

$$E(I, I_3, Y) = a + bY + c \left[ \frac{Y^2}{4} - I(I+1) \right]. \quad (A.19)$$

Further and more precise knowledge can be found in texts on group theory such as Hamermesh<sup>42)</sup>, Parikh<sup>43)</sup> and Gilmore<sup>44)</sup>.

In these lecture notes, the line of development concentrated on how to bridge the gap from the nuclear shell-model to the study of nuclear low-lying quadrupole motion. For more details, the present reference list (which is far from complete) is a good help. It is good to consult the existing lecture series as quoted, for more detailed references. Moreover, I have not discussed the possibilities of extending the idea of symmetry to the study of odd-A and odd-odd nuclei (Ph.D.Thesis of J.Jolie, RUGent), nor the fast growing field on the study of mixed-symmetry states in the IBM-2 (a recent Ann. of Phys. (N.Y.) paper will be published on this subject recently from the Gent-group ; see also Nucl.Phys. A438 (1985), 41-77).

In the third lecture I have followed closely the very nice lecture notes of Lipas (ref. 27) in discussing the different symmetries of the IBM-1. A large amount of results on the interacting boson model can be found in the Erice Proceedings<sup>45</sup>).

## References

1. M.G.Mayer, Phys.Rev. 78 (1950), 16
2. O.Haxel, J.H.D.Jensen and H.E.Suess, Z.Phys. 128 (1950), 295
3. P.J.Brussaard and P.W.M.Glaudemans, Shell-model applications in nuclear spectroscopy, (North-Holland Publ. Co; Amsterdam, 1977)
4. P.Ring and P.Schuck, The Nuclear Many-Body Problem (Springer-Verlag, 1980)
5. T.T.S.Kuo and G.E.Brown, Nucl.Phys. 85 (1966), 40
6. W.Greiner and J.M.Eisenberg, Nuclear Theory, Vol.III (North-Holland Publ.Co, Amsterdam, 1976)
7. A.Bohr, Mat.Fys.Medd.Dan.Vid.Sel. 26, n° 14 (1952) A.Bohr and B.Mottelson, Mat.Fys.Medd.Dan.Vid.Selsk. 27, n° 16 (1953)
8. A.Bohr and B.Mottelson, Nuclear Structure, Vol.2 (Benjamin, New-York, 1975)
9. W.Greiner and J.M.Eisenberg, Nuclear Theory I (North-Holland Publ.Co; Amsterdam, 1975)
10. S.G.Nilsson, Dan.Mat.Fys.Medd. 29, n° 16 (1955)
11. G.Gneuss and W.Greiner, Nucl.Phys. A171 (1971), 449
12. P.O.Hess, M.Seiwert, J.Maruhn and W.Greiner, Z.Phys. A296 (1980), 147
13. K.Kumar and M.Baranger, Nucl.Phys. A92 (1967), 608 ; Nucl.Phys. A110 (1968), 490 ; Nucl.Phys. A122 (1968), 241
14. K.Kumar et al., Phys.Rev. C16 (1977), 1235
15. M.Waroquier, Hoger Aggregaatsthesis, University of Gent, (1982) unpublished
16. M.Waroquier, K.Heyde and G.Wenes, Nucl.Phys. A404 (1983), 269 and 298
17. M.Waroquier, J.Ryckebusch, J.Moreau, K.Heyde, N.Blasi, S.Y.van der Werf and G.Wenes, Physics Reports, to be publ.
18. K.Heyde and J.Sau, Phys.Rev. C33 (1986), 1050
19. A.de-Shalit and I.Talmi, Nuclear Shell Theory (Academic Press, New-York, 1963)
20. R.F.Casten, Nucl.Phys. A443 (1985), 1 ; R.F.Casten, W.Frank and P.von Brentano, Nucl.Phys. A444 (1985), 133 ; R.F.Casten, Phys.Rev.Lett. 54 (1985), 1991 ; R.F.Casten, Phys.Lett. 152B (1985), 145
21. T.Otsuka, A.Arima and F.Iachello, Nucl.Phys. A309 (1978), 1



22. P.D.Duval and B.R.Barrett, Phys.Rev.Lett. 46 (1981), 1504 and Phys.Rev. C24 (1981), 1272
23. S.Pittel, P.D.Duval and B.R.Barrett, Ann.Phys. (NY) 144 (1982), 168
24. T.Otsuka, Computer package NPBOS, unpublished
25. O.Scholten, Ph.D.Thesis, University of Groningen (1980), unpublished
26. T.Otsuka, Ph.D.Thesis, University of Tokyo (1978) unpublished
27. P.Lipas in International Review on Nuclear Physics, vol 2, (1984), 33
28. P.Van Isacker, A.Frank and H-Z Sun, Ann.Phys. (NY) 157 (1984), 183
29. A.Bohr and B.Mottelson, Nuclear Structure, Vol.I (Benjamin, Reading Mass., 1969), 104
30. F.Iachello, in Nuclear Spectroscopy, eds. G.Bertsch and D.Kurath (Springer, Berlin, 1980) ; in Nuclear Structure, eds. K.Abrahams, K.Allaart and A.E.L.Dieperink (Plenum Press, N-Y, 1981) and Lie groups, Lie algebras and some applications, Trento Lecture Notes, U.T.F.97 (1983)
31. A.Arima and F.Iachello, Ann. of Phys. 99 (1976), 253
32. J.P.Elliott, Proc.Roy.Soc. A245 (1958), 128, 562 ; J.P.Elliott and M.Harvey, Proc.Roy.Soc. A272 (1963), 557
33. J.Vergados, Nucl.Phys. A111 (1968), 681
34. A.Arima and F.Iachello, Ann. of Phys. 111 (1978), 201
35. A.Arima and F.Iachello, Ann. of Phys. 123 (1979), 468
36. B.F.Bayman and A.Landé, Nucl.Phys. 77 (1966), 1
37. O.Scholten, Computer package PHINT, unpublished
38. R.F.Casten, D.D.Warner and A.Aprahamian, Phys.Rev. C28 (1983), 894
39. H.Lipkin, Lie groups for pedestrians (North-Holland Publ.Co., Amsterdam, 1965)
40. M.Gell-Mann, Phys.Rev. C25 (1962), 1067 ; Y.Ne'eman, Nucl.Phys. 26 (1961), 222
41. S.Okubo, Progr.Theor.Phys. 27 (1962), 949
42. M.Hamermesh, Group Theory (Addison-Wesley, Reading Mass. 1962)
43. J.C.Parikh, Group symmetries in nuclear structure (Plenum Press, New-York, 1978).
44. B.Gilmore, Lie groups, Lie algebras and some of Their Applications (Wiley Interscience, 1974)

45. Interacting bosons in nuclear physics, ed. F.Iachello (Plenum Press, N.Y., 1979) ; Interacting Bose-Fermi systems in nuclei, ed. F.Iachello (Plenum Press, N.Y., 1981) ; Progress in Part. and Nucl. Phys. Vol.9, ed. D.Wilkinson (Pergamon, Oxford, 1983) ; Interacting Boson-Boson and Boson-Fermion Systems, ed. O.Scholten (World Scientific Publ. Co., 1985)



## Multicompteurs $4\pi\gamma$ de grande résolution en énergie

B.HAAS

Centre de Recherches Nucléaires, IN2P3-CNRS/Université Louis Pasteur -  
BP 20 , F-67037 Strasbourg Cedex, France

### Résumé

Les propriétés et performances des spectromètres  $4\pi$  gamma de grande résolution en énergie sont discutées. Ces multicompteurs ont révolutionné le domaine de la spectroscopie  $\gamma$  grâce à l'amélioration considérable de l'efficacité et du rapport signal sur bruit qui ont permis de mettre en évidence des rayonnements  $\gamma$  de très faible intensité. Pour répondre aux questions posées par les résultats obtenus avec les multicompteurs actuels, un nouveau spectromètre, EUROGAM, est en cours de construction, le but étant d'abaisser la limite de sensibilité d'un facteur 100.

### Abstract

The design and performance of high-energy resolution  $4\pi$  gamma-ray spectrometers are described. These arrays have revolutionised the field of  $\gamma$ -ray spectroscopy with their significant improvement in efficiency and signal to background ratios enabling very weak photon lines to be detected in the presence of many stronger  $\gamma$  rays. To answer the new questions posed by results from the current generation spectrometers, a new array EUROGAM is being built with the aim of increasing the sensitivity by a factor of 100.

## I. INTRODUCTION

Les multicompteurs  $\gamma$  se sont développés initialement dans le but d'étudier les mécanismes de réaction : par exemple étude du plan  $(E^*, I)$  où  $E^*$  et  $I$  représentent respectivement l'énergie totale et le moment angulaire disponibles en voie de sortie après émission de particules, mesures de distributions de moment angulaire du noyau composé dans le cas de réactions de fusion... Pour cela, il fallait donc pouvoir disposer, autour de la cible, d'un grand nombre de détecteurs, ceux-ci étant aussi efficaces que possible. C'est pourquoi tous les multicompteurs furent construits à l'aide de scintillateurs comme l'iodure de sodium (NaI), le germanate de bismuth ( $\text{BiGe}_3\text{O}_{12}$  noté BGO) ou le fluorure de baryum ( $\text{BaF}_2$ ). C'est sur ce modèle que se sont construits les premières "boules" multicompteurs dans les années 1980 à Heidelberg<sup>1)</sup> ou Oak Ridge<sup>2)</sup> couvrant un angle solide proche de  $4\pi$  stéradian. C'est également dans cette optique qu'a été construit l'équipement national français le "château de cristal"<sup>3)</sup>. Dans tous ces multidétecteurs, l'information de spectroscopie fine (haute résolution en énergie) était obtenue par l'adjonction de quelques détecteurs germanium (Ge).

Les résultats des premières mesures (énormes difficultés d'extraire une information de qualité concernant le plan  $(E^*, I)$  à cause des résolutions expérimentales) jointes à la moisson de résultats originaux obtenus avec un ensemble de 6 détecteurs Ge avec système anti-Compton<sup>4)</sup> a conduit à une profonde évolution de la nature de ces multicompteurs.

Dans les nouveaux systèmes, le spectromètre central (de grande efficacité) est utilisé pour sélectionner une région d'entrée dans le plan  $(E^*, I)$  et l'accent est mis sur la qualité et le nombre de détecteurs Ge entourés de blindages anti-Compton.

Sur les multicompteurs déjà existants, on essaya alors d'adapter des ensembles détecteurs Ge-systèmes anti-Compton et d'utiliser les scintillateurs comme filtre de réaction. En effet en sélectionnant une région du plan ( $E^*, I$ ) on peut privilégier telle ou telle voie de sortie. C'est ainsi qu'avec le château de cristal il a été possible d'étudier en détail, et pour la première fois, un noyau de la région des actinides ( $^{218}\text{Ra}$ ) et de démontrer la présence dans ce noyau de déformations d'ordre multipolaire impair. Il est à noter sur la Fig.1 qu'il existe dans le schéma de niveaux de ce noyau 5 transitions  $\gamma$  dont l'énergie est comprise entre 429 et 435 keV. Pour ce type d'étude de spectroscopie fine, les scintillateurs mentionnés précédemment, dont les résolutions en énergie varient entre 5-15%, ne sont plus adéquats et ceci impose donc l'utilisation de détecteurs semi-conducteurs Ge.

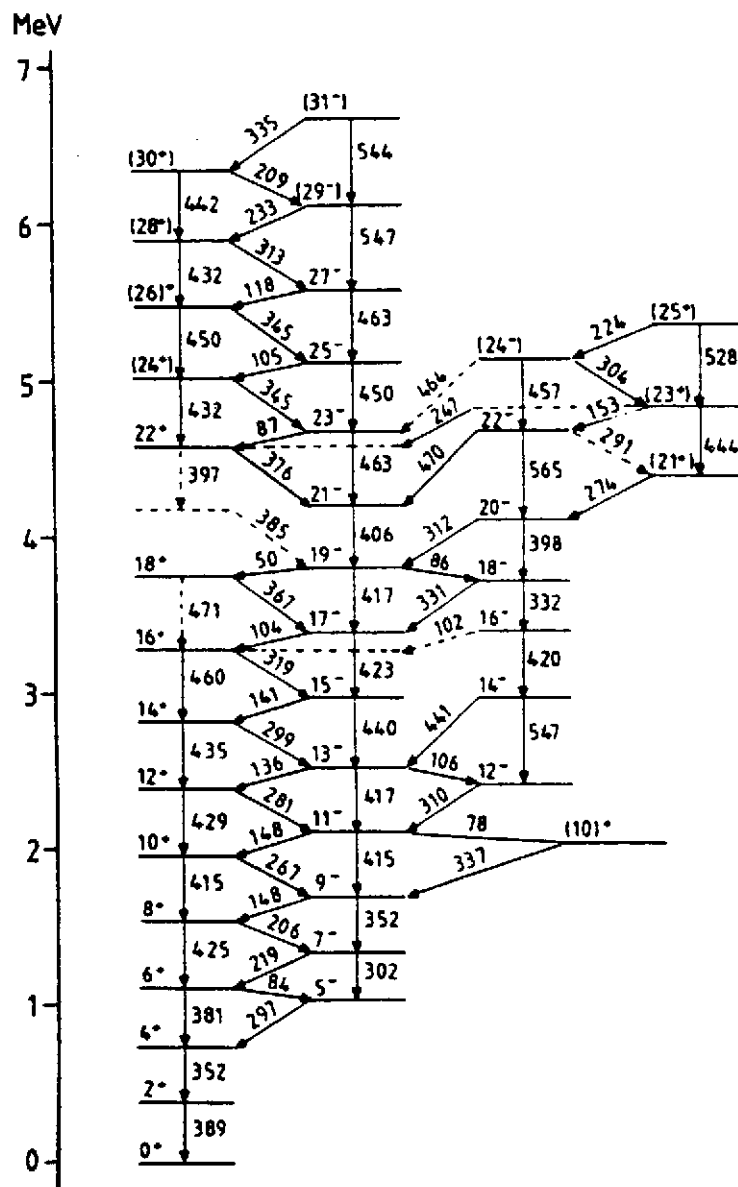


Figure 1: Schéma de niveaux du noyau  $^{218}\text{Ra}$  étudié avec le château de cristal<sup>5)</sup>

Dans la suite de cet exposé nous discuterons donc des propriétés de multidétecteurs  $\gamma$  de grande résolution en énergie composés de détecteurs Ge puisque c'est à l'aide de tels systèmes qu'ont été obtenus les principales informations concernant la forme de noyaux très excités et en rotation rapide. Le dernier chapitre sera consacré à la définition d'un spectromètre  $\gamma$  de nouvelle génération, EUROGAM, actuellement construit et mis au point par une collaboration franco-britannique de spectroscopistes gamma.

## II. CARACTERISTIQUES GENERALES DES DETECTEURS GERMANIUM

### 1) Résolution en énergie intrinsèque

Pour les détecteurs Ge aujourd'hui disponibles, on atteint des résolutions de l'ordre de 2 keV pour la raie de 1,33 MeV du  $^{60}\text{Co}$ . Mais à cette résolution intrinsèque, il faut ajouter, dans le cas des réactions nucléaires où les noyaux de recul peuvent avoir des vitesses relativement élevées, l'élargissement Doppler des pics (sera discuté au chapitre IV).

### 2) Efficacité

L'efficacité photopic ( $\epsilon_p$ ) d'un détecteur est sa caractéristique principale car elle quantifie le nombre d'événements ayant déposé toute leur énergie dans le compteur. De plus, si on mesure une coïncidence d'ordre  $n$ , ce nombre d'événements sera proportionnel à  $(\epsilon_p)^n$ .

Si on appelle :

- $N_{\text{émis}}$  le nombre de rayonnements gamma émis par une source calibrée
- $N_{\text{dét}}$  le nombre de rayonnements gamma détectés
- $N_{\text{pic}}$  le nombre d'événements dans le pic de pleine énergie

On définira l'efficacité absolue et l'efficacité photopic comme :

$$\epsilon_{\text{abs}} = \frac{N_{\text{dét}}}{N_{\text{émis}}} \quad \epsilon_{\text{ph}} = \frac{N_{\text{pic}}}{N_{\text{émis}}}$$

Si on appelle  $\Omega$  la fraction de l'angle solide total sous-tendu par le détecteur, les efficacités absolues et photopic **intrinsèques** s'écrivent :

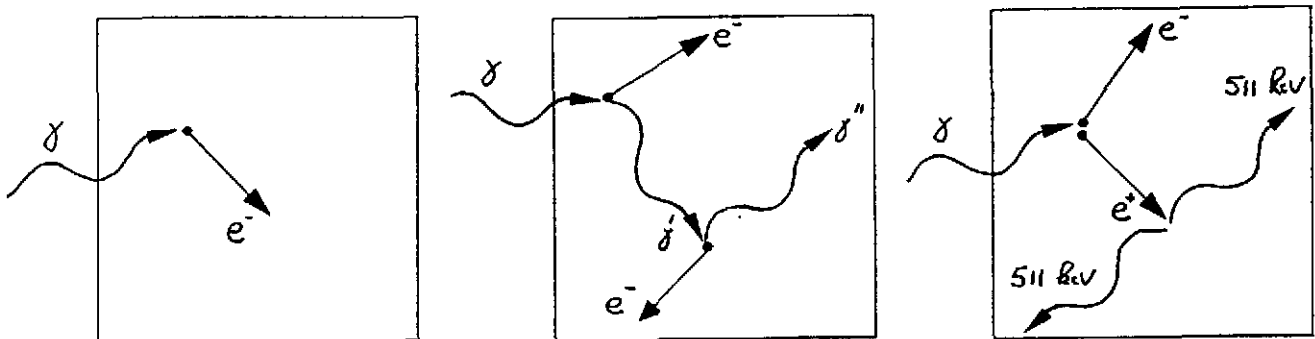
$$\epsilon_a = \frac{N_{\text{dét}}}{N_{\text{émis}}\Omega} \quad (1) \quad \epsilon_p = \frac{N_{\text{pic}}}{N_{\text{émis}}\Omega} \quad (2)$$

La donnée d'une efficacité relative par rapport à un détecteur NaI (diamètre 7,6 cm et longueur 7,6 cm) placé à une distance de 25 cm de la source est aussi très souvent utilisée. Celle-ci sera alors définie comme le rapport des efficacités photopic du détecteur germanium (noté X) et celle du détecteur NaI pris comme référence (généralement à  $E_\gamma = 1.33$  MeV) :

$$\epsilon_r = \frac{(\epsilon_{\text{ph}})_X}{(\epsilon_{\text{ph}})_{\text{NaI}}}$$

### 3) Fonction de réponse

Dans le domaine d'énergie qui intéresse les spectroscopistes nucléaires (quelques dizaines de keV à quelques MeV), les interactions rayonnement  $\gamma$ -matière peuvent être de trois types: effet photoélectrique, diffusion Compton et création de paires (pour des énergies incidentes supérieures à 1,022 MeV). L'information intéressante en spectroscopie fine est le pic de pleine énergie. Un tel événement peut avoir plusieurs origines comme le montrent, par exemple les schémas ci-dessous:



Dans le cas où les rayonnements  $\gamma$  diffusés ne sont pas réabsorbés par le détecteur, une partie de l'énergie sortira du cristal créant un événement qui contribuera au bruit de fond. On a donc perdu l'information concernant l'énergie du rayonnement  $\gamma$  incident.

On définit une grandeur qui mesure la qualité de l'information recueillie : le rapport Pic sur Total (PT). Celui-ci est simplement donné par :

$$PT = \frac{N_{pic}}{N_{det}} \quad (3)$$

Pour des détecteurs Ge d'efficacité  $\epsilon_r \simeq 20\%$  on a mesuré  $PT \simeq 0,19$ , valeur qui passe à  $PT \simeq 0,29$  pour des détecteurs d'efficacité  $\epsilon_r \simeq 70\%$ . Comme déjà mentionné auparavant, la nécessité d'une excellente résolution en énergie impose le choix de détecteurs germanium. Malheureusement, les dimensions réduites des cristaux disponibles (le diamètre et la longueur des plus gros détecteurs aujourd'hui sur le marché sont de l'ordre de 70-80 mm) rendent très probables les échappements donc les pertes d'énergie.

Les valeurs mesurées pour le rapport Pic sur Total ont été comparées aux résultats de calculs de simulation réalisés par G.de France <sup>6)</sup> en utilisant le logiciel GEANT, conçu au CERN pour calculer la réponse de détecteurs dans le domaine de la physique des particules. Ce programme permet de définir une géométrie composée de formes plus ou moins complexes que l'on assemble après en avoir défini les matériaux. Une fois la géométrie générée, il faut définir les conditions cinématiques initiales du rayonnement  $\gamma$  incident. C'est ensuite le logiciel qui, à l'aide d'un calcul de type Monte-Carlo, gère l'ensemble des interactions possibles entre ce photon et la matière qu'il rencontre.

Ce logiciel a été testé sur des détecteurs dont les caractéristiques étaient bien connues. Dans le tableau 1 sont comparées les valeurs mesurées et calculées d'efficacité et de rapport PT pour deux détecteurs germanium coaxiaux classiques (petit et gros volume respectivement noté PV et GV), l'énergie des rayonnements  $\gamma$  étant 1,33 MeV.

		$\epsilon_r(\%)$	$\epsilon_p$	$(P/T)_{100}(\%)$
PV	L=6.4 cm	19.3	0.11	19.3
	$\varnothing = 4.6$ cm	(19.0)	(0.11)	(19.2)
GV	L = 7.8 cm	74.2	0.20	29.7
	$\varnothing = 6.9$ cm	(74.0)	(0.20)	(29.5)

**Tableau 1 :** Comparaison calculs/mesures pour des détecteurs coaxiaux classiques. Les valeurs mesurées figurent entre parenthèses. On note  $(P/T)_{100}$  le rapport Pic sur Total avec un seuil en énergie fixé à 100 keV.

Par ailleurs, les détecteurs Ge coaxiaux étant très répandus, une compilation sur un grand nombre de ces compteurs a pu être faite. Sur les courbes suivantes (Fig.2 et 3) sont reportées les valeurs expérimentales de l'efficacité photopic intrinsèque ( $\epsilon_p$ ) et le rapport PT (sans seuil en énergie) pour ces détecteurs à une énergie incidente  $E_\gamma = 1,33$  MeV. Les valeurs calculées ont été placées sur ces graphiques et la comparaison démontre le bon accord entre calculs et mesures, les différences restant toujours inférieures à  $\pm 5\%$ . On peut donc dire que ce logiciel a été testé avec succès <sup>6)</sup> pour des photons de l'ordre du MeV et il est clair qu'il sera utilisé par la suite dans un but d'analyse et de solution de problèmes dans lesquels les paramètres ne sont pas accessibles de façon individuelle expérimentalement (définition du nouveau multicompteur EUROGAM par exemple).

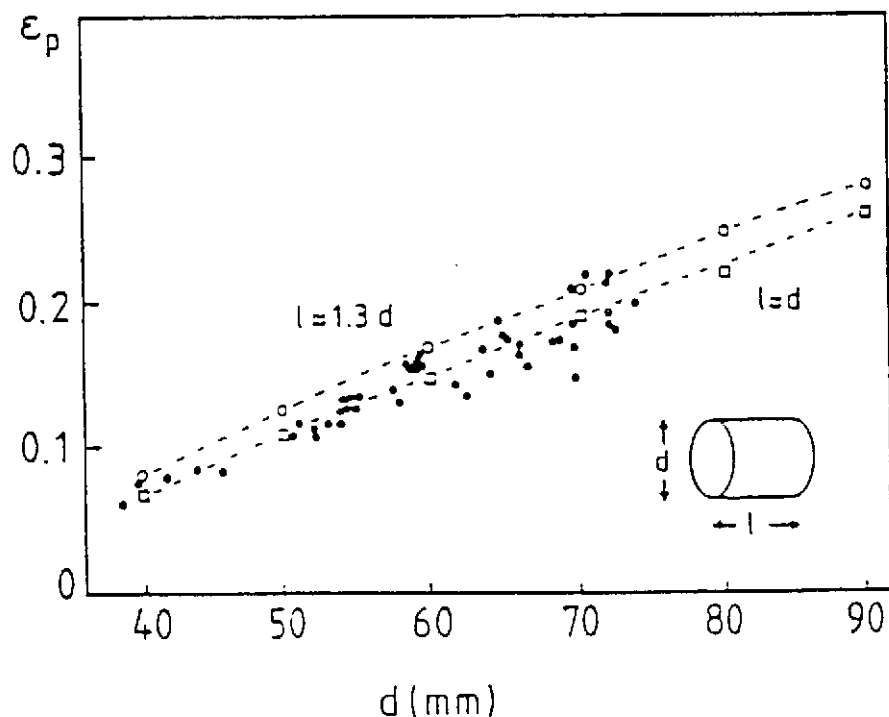
A partir des relations (1), (2) et (3) nous pouvons donc définir une efficacité de détection pour un pic de pleine énergie, le détecteur sous-tendant un angle solide  $\Omega$  :

$$\epsilon_p \Omega = PT \times \epsilon_a \Omega \quad (4)$$

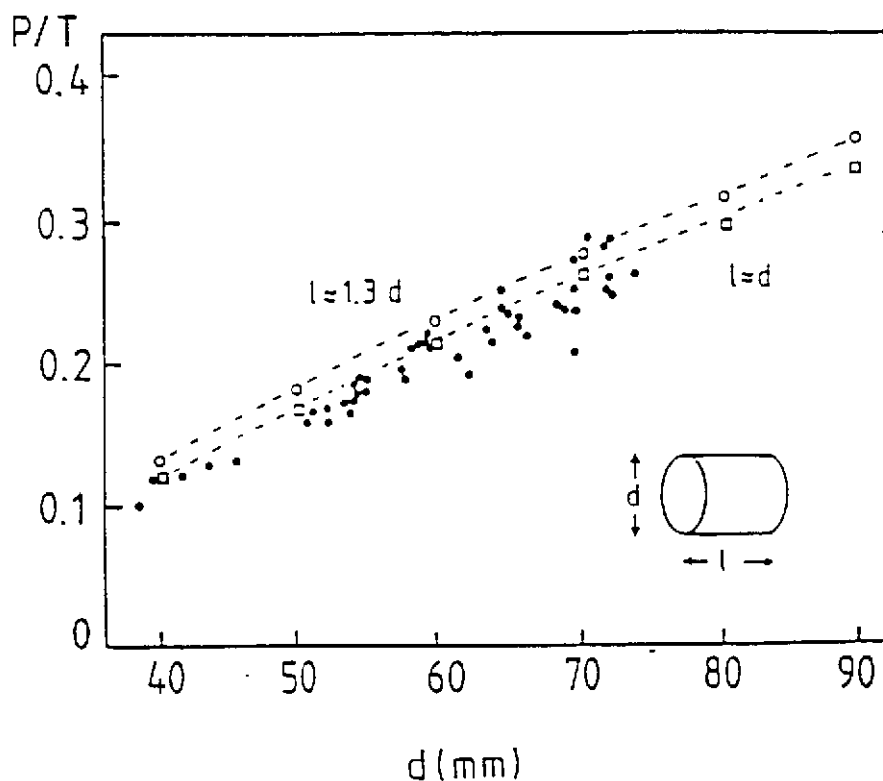
Pour un détecteur  $\epsilon_r = 20\%$ ,  $PT \simeq 0.19$  (Tableau 1). Ceci veut dire que seulement 19 % des événements détectés sont de "bons" événements, c'est-à-dire utiles aux physiciens puisque ce sont des événements (pleine énergie) qui renferment l'information de l'énergie du rayonnement  $\gamma$  incident.

La probabilité de détecter deux rayonnements  $\gamma$  avec deux compteurs identiques est alors donnée par l'expression :  $(\epsilon_p \Omega)^2 = (PT)^2 \times (\epsilon_a \Omega)^2$





**Figure 2 :** Efficacités photopic intrinsèques pour  $E_\gamma = 1332$  keV. Le diamètre du cristal est  $d$ , sa longueur  $\ell$ . Les points correspondent à des valeurs expérimentales tandis que les courbes sont issues des calculs faits avec GEANT.



**Figure 3 :** Rapports Pic sur Total pour  $E_\gamma = 1332$  keV, sans seuil en énergie. Les points correspondent à des valeurs expérimentales tandis que les courbes sont issues de calculs faits avec GEANT.

Ceci implique que seulement 3,6% des événements  $\gamma$ - $\gamma$  (coïncidences doubles) enregistrés sont des événements utiles. Il est à noter qu'en utilisant deux détecteurs  $\epsilon_r \simeq 70\%$ , le rapport PT pour ce détecteur étant  $\simeq 0,29$ , le gain dans le rapport signal sur bruit est de 2,3 pour les coïncidences doubles  $\gamma$ - $\gamma$  comparé à deux détecteurs  $\epsilon_r = 20\%$ . Bien qu'appréciable ce gain n'est cependant pas suffisant pour rechercher des phénomènes de très faible intensité.

Pour améliorer le paramètre Pic sur Total, on cherche à détecter les rayonnements  $\gamma$  qui échappent du cristal de germanium en l'entourant par un matériau de grande efficacité. C'est le but de l'enceinte anti-Compton (AC). L'efficacité de détection étant proportionnelle au numéro atomique et à la densité du matériau, ces enceintes ont été réalisées à l'aide de scintillateurs inorganiques : des cristaux de NaI ( $d = 3,67$ ) dans un premier temps, puis de  $BaF_2$  ( $d = 4,88$ ) et BGO ( $d = 7,13$ ) actuellement. Chaque fois qu'un photon interagit dans l'enceinte AC, l'événement détecté en coïncidence dans le détecteur Ge est supprimé par le circuit électronique d'anti-coïncidences. Cette technique permet d'améliorer le rapport PT d'un facteur important mais elle est cependant limitée par l'efficacité du scintillateur AC, par l'absorption des photons sortant du cristal, par un matériau non actif (capot détecteur par exemple) et par les angles morts. Un dispositif AC, entourant le cristal de germanium, est présenté en Fig.4. Le blindage de tungstène, positionné devant le scintillateur BGO, empêche ce dernier de détecter des rayonnements  $\gamma$  émis directement de la cible, sans avoir interagi avec le détecteur Ge.

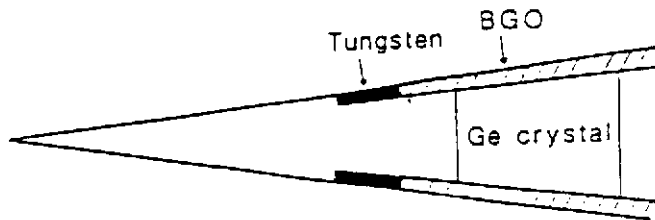


Figure 4: Exemple de dispositif anti-Compton

On peut maintenant définir un nouveau rapport Pic sur Total, le système anti-Compton étant mis en place

$$PT_{AC} = \frac{N_{pic}}{N_{dét.AC}} \quad (5)$$

où  $N_{dét.AC}$  est le nombre de rayonnements  $\gamma$  détectés dans le détecteur Ge après anti-coïncidence avec son enceinte et l'on a alors la relation :

$$PT_{AC} = PT \times x \quad (6)$$

où  $x$  est appelé facteur de suppression Compton. Plus la valeur de  $x$  sera grande, meilleure sera la qualité du spectre gamma.

L'efficacité de détection absolue intrinsèque, après anti-coïncidence avec l'enceinte anti-Compton, est alors donnée par l'expression :

$$\epsilon_{AC} = \frac{N_{dét.AC}}{N_{émis}\Omega} \quad (7)$$

d'où l'on tire à partir de l'expression (5) :

$$\epsilon_p \Omega = PT_{AC} \times \epsilon_{AC} \Omega \quad (8)$$

relation comparable à (4) lorsque le détecteur n'est pas entouré de son enceinte. Avec les blindages anti-Compton utilisés actuellement, on atteint des valeurs  $PT_{AC} \simeq 0,55$  pour un rayonnement  $\gamma$  incident d'énergie  $E_\gamma = 1332$  keV.

Ceci représente une amélioration considérable du rapport signal sur bruit par les événements de coïncidences doubles. La majorité des multicompteurs actuels sont composés de détecteurs Ge d'efficacité relative  $\epsilon_r \simeq 20$  % entouré de blindage BGO. L'amélioration de la qualité des spectres (réduction du fond) déduits de coïncidences  $\gamma$ - $\gamma$  est donc  $\sim 10$ . Ceci est une des raisons qui ont permis la découverte de bandes superdéformées SD<sup>7,8,9,10</sup>.

#### 4) Effet d'empilement

Si l'angle solide d'éclairage  $\Omega$  sous-tendu par un détecteur Ge est grand, la probabilité de détecter **simultanément** plusieurs rayonnements  $\gamma$  d'une même cascade (où d'un même événement) est élevée. Soit  $M$  la multiplicité  $\gamma$  d'une cascade de transitions  $\gamma$ . Cette valeur  $M$  représente par exemple le nombre de transitions  $\gamma$  dans une bande rotationnelle bâtie sur l'état fondamental d'un noyau. Pour aboutir à des expressions mathématiques simples nous allons supposer que les  $M$  transitions  $\gamma$  aient toutes la même énergie, c'est-à-dire que l'efficacité de détection de n'importe quelle transition parmi les  $M$  est la même. Soit  $\epsilon_a \Omega$  cette efficacité de détection absolue.

La probabilité de détecter une transition est égale à  $\epsilon_a \Omega$ , alors que la probabilité de ne pas la détecter est  $(1 - \epsilon_a \Omega)$ . En supposant que nous avons déjà détecté dans le compteur Ge une transition de la cascade, la probabilité de ne détecter aucune des  $(M-1)$  transitions  $\gamma$  restantes de cette cascade est appelée probabilité anti-empilement  $P_\gamma$  :

$$P_\gamma = (1 - \epsilon_a \Omega)^{M-1} \quad (9)$$

En supposant les valeurs numériques suivantes :  $\epsilon_a = 0.8$  (valeur en accord avec des détecteurs  $\epsilon_r \simeq 70\%$ ),  $M = 30$  (multiplicité d'une bande SD),  $\Omega = 5 \times 10^{-3}$ , on trouve  $P_\gamma = 90$  %, ce qui revient à dire que la probabilité de détecter une autre transition  $\gamma$  de la même cascade dans le détecteur (empilement) est de 10%. L'effet d'empilement génère des événements qui contribuent au fond gamma et il est aussi à l'origine d'une perte de coups dans les photopics.

### III. PROBABILITE DE DETECTION AVEC UN MULTICOMPTEUR

#### 1) Efficacité de détection photopic d'un multicompteur composé de $N$ détecteurs Ge identiques, chacun d'efficacité $\epsilon_p \Omega$ .

L'efficacité de détection photopic  $E_p$  est donnée par l'expression :

$$E_p = \epsilon_p \Omega \times N \times P_\gamma \quad (10)$$

Pour avoir la plus grande efficacité possible pour le multicompteur, il faut bien sûr que l'angle solide total  $N\Omega$  soit le plus grand possible (mais  $\Omega$  petit pour minimiser les effets d'empilement et donc maximiser  $P_\gamma$ ) et que l'efficacité de détection photopique intrinsèque soit grande (choix de détecteurs Ge les plus volumineux possibles).

**2) Probabilité de détecter  $n$  rayonnements gamma (photopiques) parmi les  $M$  d'une cascade avec un multicompteur composé de  $N$  détecteurs Ge identiques.**

$$\begin{aligned} n = 1 & \quad P_1 = M \times N\Omega \times \epsilon_p \times P_\gamma & (11) \\ n = 2 & \quad P_2 = C_2^M \times N\Omega\epsilon_p P_\gamma \times (N-1)\Omega\epsilon_p P_\gamma & (12) \end{aligned}$$

- $C_2^M$ : nombre de combinaisons de 2 transitions  $\gamma$  parmi  $M$
- $N\Omega\epsilon_p P_\gamma$ : probabilité de détecter le pic pleine énergie correspondant à la première transition dans un compteur
- $(N-1)\Omega\epsilon_p P_\gamma$ : probabilité de détecter le pic pleine énergie correspondant à la seconde transition dans n'importe lequel des  $(N-1)$  compteurs restants

$$P_2 = \frac{M(M-1)}{2} \times N(N-1)(\Omega\epsilon_p P_\gamma)^2$$

Pour un multidétecteur composé d'un grand nombre de détecteurs Ge ( $N$  grand) on aura alors l'expression simplifiée suivante :

$$\begin{aligned} P_2 & \simeq \frac{M(M-1)}{2} \times (N\Omega\epsilon_p P_\gamma)^2 \\ & \simeq \frac{M(M-1)}{2} (E_p)^2 & (13) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} n = 3 & \quad P_3 = C_3^M N(N-1)(N-2)(\Omega\epsilon_p P_\gamma)^3 \\ & \quad P_3 \simeq \frac{M(M-1)(M-2)}{3!} \times E_p^3 \\ & \quad P_3 \simeq \frac{M^3}{3!} \times E_p^3 & (14) \end{aligned}$$

(expression valable quand  $N$  et  $M$  sont grands)

**Exemple numérique** : nous allons calculer les probabilités  $P_1$ ,  $P_2$  et  $P_3$  pour le multidétecteur canadien  $8\pi$  composé de 20 détecteurs Ge identiques d'efficacité relative  $\epsilon_r \simeq 25\%$  et installé au laboratoire de Chalk River<sup>(1)</sup>

$$\left. \begin{aligned} N &= 20 \\ \epsilon_p &= 0,12 \\ \Omega &= 2,5 \times 10^{-3} \\ M &= 25 \end{aligned} \right\} P_\gamma = 0,96 \text{ et } E_p = 6 \times 10^{-3}$$

Nous obtenons alors les valeurs suivantes pour les différentes probabilités :

$$\begin{array}{ll} \gamma^1 & P_1 = 14,4 \times 10^{-2} \\ \gamma^2 & P_2 = 9,4 \times 10^{-3} \\ \gamma^3 & P_3 = 3,8 \times 10^{-4} \end{array}$$

La probabilité de détecter avec ce multicompteur, 2 transitions  $\gamma$  d'une cascade de multiplicité 25 est donc  $\sim 1\%$ , la probabilité de coïncidences triples étant environ 25 fois plus faible. C'est la raison pour laquelle il est extrêmement difficile, avec les systèmes de détection actuels, d'envisager des mesures de coïncidences  $\gamma^3$  avec une bonne statistique.

### 3) Conclusions

- la probabilité de détecter une, deux, trois ... n transitions  $\gamma$  (photopics) parmi les M d'une cascade, est proportionnelle à  $E_p, E_p^2, E_p^3 \dots E_p^n$  avec  $E_p = N\Omega\epsilon_p P_\gamma$

En augmentant le nombre de compteurs N, les différentes probabilités vont croître très rapidement. Alors qu'il y a une dizaine d'années, les systèmes de détection  $\gamma$  étaient composés de 3-4 compteurs Ge, les nouveaux spectromètres comprennent entre 12 et 21 détecteurs Ge. Cette augmentation de l'angle solide total et l'utilisation de ceintures AC pour diminuer le bruit de fond sont les deux causes qui ont permis la découverte de bandes SD<sup>7-10</sup>.

- la probabilité de détecter n transitions  $\gamma$  d'une cascade de multiplicité M est ainsi proportionnelle à  $\frac{M^n}{n!}$  (voir expression 14). Dans le tableau 2 sont données les valeurs correspondantes pour des cascades de multiplicité M = 15 et 30 et pour des "folds" n = 2,3 et 4.

	n = 2	n = 3	n = 4
M = 30	450	4500	33750
M = 15	112	562	2110

**Tableau 2** : Valeurs numériques correspondant à la quantité  $\frac{M^n}{n!}$  pour différentes valeurs de n (nombre de transitions  $\gamma$  détectées ou nombre de compteurs Ge touchés appelé souvent fold) et M (multiplicité  $\gamma$ )

Le gain en efficacité de détection, passant de la multiplicité M = 15 à M = 30, est de 4 pour les coïncidences  $\gamma^2$ , 8 pour les coïncidences  $\gamma^3$  et 16 pour les coïncidences  $\gamma^4$ . Il est donc clair qu'en demandant un grand nombre de détecteurs Ge touchés, le multicompteur favorisera la sélection de cascades de multiplicité  $\gamma$  élevée.

	Boule interne		DéTECTEURS Ge				$N\Omega\epsilon_p P_\gamma$
	Matériau	$N_{dét}$	N	$\epsilon_p$	$\Omega$	$P_\gamma$	
OSIRIS Allemagne	BGO	38	12	0.12	$5.5 \cdot 10^{-3}$	0.91	$0.72 \cdot 10^{-2}$
TESSA3 Daresbury	BGO	50	16	0.11	$2.3 \cdot 10^{-3}$	0.96	$0.39 \cdot 10^{-2}$
CHATEAU Strasbourg	BaF <sub>2</sub>	26	12	0.21	$1.4 \cdot 10^{-3}$	0.97	$0.35 \cdot 10^{-2}$
NORDBALL Copenhague	BaF <sub>2</sub>	60	20	0.13	$6.0 \cdot 10^{-3}$	0.90	$1.40 \cdot 10^{-2}$
8 $\pi$ Chalk River	BGO	72	20	0.13	$2.5 \cdot 10^{-3}$	0.95	$0.62 \cdot 10^{-2}$
HERA Berkeley	BGO	44	21	0.12	$6.6 \cdot 10^{-3}$	0.89	$1.48 \cdot 10^{-2}$

**Tableau 3** : Caractéristiques de quelques multidétecteurs Ge avec systèmes anti-Compton existant actuellement ( $N$  = nombre de détecteurs,  $\epsilon_p$  = efficacité photopie intrinsèque pour un rayonnement  $\gamma$  de 1332 keV,  $\Omega$  = angle solide individuel des détecteurs Ge)<sup>12,4,13,3,15,11,14</sup>.

## IV. EUROGAM

### 1) Introduction

Le projet EUROGAM (European Gamma-Ray Microscope) est né de la nécessité, pour les physiciens nucléaires, d'imaginer des systèmes de détection beaucoup plus performants que ceux dont ils disposent à l'heure actuelle. Les phénomènes recherchés nécessitent en effet une sensibilité de mesure accrue. Par exemple, nous savons que les bandes SD sont peuplées avec une intensité de l'ordre de 0,5 % de la section efficace totale de fusion. L'étude expérimentale de ces bandes de très faible intensité ne peut donc se faire de façon approfondie avec les multidétecteurs actuels et c'est la raison pour laquelle, l'alimentation et la désexcitation de ces bandes ne sont pas comprises pour le moment (voir cours R.Janssens). Dans la région des terres rares obtenir des informations expérimentales sur ces processus est, par exemple, primordial pour la compréhension du phénomène de fission à très haut moment angulaire ou encore pour établir le passage du second puit de potentiel vers le premier pour des moments angulaires  $I \sim 20 - 30\hbar$  et des énergies d'excitation intrinsèque de l'ordre de quelques MeV. La limite de détection actuelle pour une transition  $\gamma$  appartenant à une bande SD est la transition  $135/2 \rightarrow 131/2$  observée dans le noyau  $^{149}\text{Gd}$ , l'intensité de cette transition étant  $\sim 3,6 \times 10^{-4}$  de la section efficace totale de fusion<sup>16)</sup>. Pour aller plus loin et atteindre des intensités de  $10^{-5}$ - $10^{-6}$ , il fallait donc construire un système beaucoup plus puissant. C'est ainsi qu'aux Etats Unis, la communauté de spectroscopistes  $\gamma$  a défini le projet GAMMASPHERE<sup>17)</sup> alors qu'en Europe les physiciens franco-britanniques ont décidé la construction de EUROGAM.

Les critères de base, pour une hausse substantielle de la sensibilité du futur multidétecteur, consisteront en des augmentations de l'angle solide couvert ( $N\Omega$ ), de l'efficacité de détection photopic intrinsèque  $\epsilon_p$ , de la résolution en énergie (lutte contre l'élargissement Doppler) et du rapport Pic sur Total PT (systèmes anti-Compton). Comme nous l'avons déjà mentionné à la fin du chapitre précédent, si l'on augmente l'efficacité de détection photopic totale  $E_p$ , on pourra alors aussi améliorer la qualité des informations en utilisant des critères de sélectivité directement reliés à l'ordre de coïncidence. Cette technique, on le conçoit facilement, permet d'éliminer une grande part du bruit de fond, constitué en partie de coïncidences  $\gamma$  de faible multiplicité mais aussi d'isoler les événements corrélés de haute multiplicité.

L'efficacité de détection photopic totale  $E_p$  est égale à  $N\Omega\epsilon_p P_\gamma$ . L'angle solide total  $N\Omega$  couvert par les détecteurs devra être le plus grand possible en tenant compte de l'espace "mort" occupé par les matériaux inactifs (capots des détecteurs Ge par exemple) et les enceintes AC. Un nombre  $N$  de détecteurs, très grand, est souhaitable pour minimiser d'une part, la détection des radiations empilées liées à la grande multiplicité ( $M \sim 25-30$ ) et d'autre part l'élargissement Doppler (angle d'ouverture des détecteurs Ge); des raisons de coût conduisent toutefois à limiter ce nombre. L'efficacité photopic  $\epsilon_p$  est limitée par la taille actuelle des cristaux de germanium ( $\epsilon_p \simeq 0,23$  pour les plus gros volumes). Dans la suite nous présenterons un assemblage conduisant à de nouveaux détecteurs qui ont été imaginés et simulés<sup>6)</sup>, pour essayer de dépasser cette limite.

### 2) Angle solide sous-tendu par un détecteur

La probabilité de détecter un et un seul rayonnement  $\gamma$  dans un détecteur est donnée par la relation (9) :

$$P_\gamma = (1 - \epsilon_a \Omega)^{M-1}$$

d'où l'on peut déduire l'angle solide  $\Omega$  :

$$\Omega = \frac{1}{\epsilon_a} \left[ 1 - \exp \left( \frac{\text{Log } P_\gamma}{M - 1} \right) \right] \quad (15)$$

En exigeant moins de 10 % d'événements empilés et en supposant  $\epsilon_a \simeq 0,8$  et une multiplicité  $M = 30$ , on obtient un angle solide maximum par détecteur de  $\sim 5 \times 10^{-3}$  ce qui revient à dire qu'un détecteur cylindrique ayant un diamètre de  $\sim 7$ cm devra se trouver à environ 25 cm de la cible.

### 3) Efficacité de détection $\epsilon_p$ et rapport $PT_{AC}$

L'idée des détecteurs germanium coniques s'est imposée lorsque l'on a cherché la meilleure géométrie conciliant angle solide couvert et efficacité de détection. En effet, en supprimant la partie frontale périphérique des détecteurs germanium on n'enlève qu'une région peu efficace pour l'effet photoélectrique (l'épaisseur de germanium rencontrée par un photon n'est alors pas suffisamment importante pour l'absorber totalement dans le cas de diffusions Compton multiples). Les dimensions les plus grandes disponibles aujourd'hui pour les cristaux de germanium (diamètre  $\simeq 70$  mm, longueur  $\simeq 70$  mm) ont été utilisées pour atteindre des efficacités relatives supérieures à 70 %.

Le compteur au germanium est placé dans une enceinte anti-Compton en BGO dont la géométrie réelle (Fig.5) essaye de concilier efficacité de détection et faible encombrement (matériau non actif). Le détecteur est placé à 20,5 cm de la source et la face frontale du BGO est à 16,5 cm de celle-ci. Un collimateur en tungstène d'épaisseur 3,65 cm définit l'angle solide d'éclairage du détecteur germanium à  $\Omega = 5,1 \cdot 10^{-3}$  et protège l'enceinte anti-Compton d'une vision directe de la cible. Les simulations des principales caractéristiques ( $\epsilon_p$ , P/T) ont donné les résultats encourageants reportés dans le tableau 4.

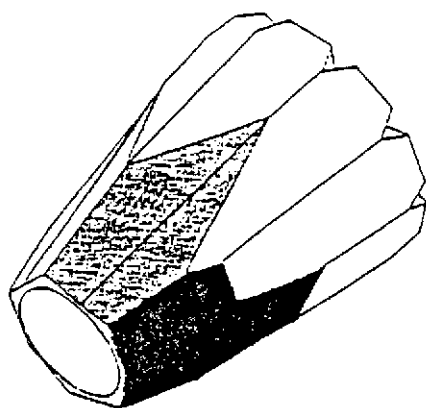


Figure 5 : Géométrie de l'enceinte anti-Compton BGO prévu pour EUROGAM



$E_\gamma$ keV	$\epsilon_a$	$\epsilon_p$	$\left( \frac{P}{T} \right)_{100}$	$\left( \frac{P}{T} \right)_{100}^{AC}$
200	0.91	0.72	0.98	0.98
1332	0.88	0.23	0.27	0.58
10000	0.79	0.04	0.05	0.20

**Tableau 4 :** Simulation des principales caractéristiques d'un détecteur conique dans son enceinte anti-Compton

Ces simulations indiquent des performances individuelles excellentes pour ce choix de géométrie tant pour les détecteurs Ge (efficacité) que pour la réjection Compton. Celles-ci ont été vérifiées sur les premiers détecteurs de ce type qui ont été livrés et dans le tableau 5 sont données quelques caractéristiques mesurées pour une énergie  $E_\gamma = 1332$  keV.

$\epsilon_r(\%)$	$\epsilon_a$	$\epsilon_p$	$(PT)_{100}$	$PT_{AC}$
73,4	0,84	0,23	0,28	0,55

**Tableau 5 :** Valeurs mesurées pour un détecteur conique placé dans son enceinte AC.

#### 4) Nombre de détecteurs Ge

L'idéal serait de détecter, pour chaque réaction nucléaire, l'ensemble des  $M$  transitions  $\gamma$  d'une cascade de multiplicité  $M$  (exemple : pour une bande SD dans la région des terres rares :  $M \simeq 25$ ). Cela nécessiterait cependant une efficacité de détection photopie totale  $E_p = 1$ . Les meilleures valeurs actuelles atteintes pour  $E_p$  sont  $\sim 1,5$  % donc loin de la valeur idéale et de ce fait la probabilité de détecter  $f$  transitions  $\gamma$  parmi  $M$  avec un multicompteur composé de  $N$  détecteurs identiques, notée  $P_f^N(M)$ , diminuera très vite avec  $f$  (fold).

##### - Calcul de $P_f^N(M)$

La probabilité de détecter  $f$  transitions  $\gamma$  (**pas forcément photopics**) parmi les  $M$  rayonnements  $\gamma$  de la cascade est égal à :

$$C_f^M N(N-1)(N-2)\dots(N-f+1)\Omega^f \epsilon_{AC}^f \quad (16)$$

Cette expression a la même forme mathématique que les relations (11) et (12) à part que  $\epsilon_p P_\gamma$  est remplacé par  $\epsilon_{AC}$ .

Pour obtenir la probabilité  $P_f^N(M)$  de ne détecter que  $f$  transitions (et **uniquement**  $f$ ) de la cascade, il faut multiplier la quantité précédente par la probabilité de ne détecter aucune des  $(M-f)$  transitions  $\gamma$  disponibles de cette cascade.

L'expression finale de  $P_f^N(M)$  sera alors :

$$P_f^N(M) = \frac{M!}{f!(M-f)!} N(N-1)(N-2)\dots(N-f+1) \Omega^f \epsilon_{AC}^f (1 - N\Omega\epsilon_{AC})^{M-f} \quad (17)$$

Il est maintenant aisé de calculer la probabilité de détecter  $f$  transitions  $\gamma$  (**pics de pleine énergie**) et uniquement  $f$  de la cascade de multiplicité  $M$  :

$$P_f^N(M) = \frac{M!}{f!(M-f)!} N(N-1)(N-2)\dots(N-f+1) \Omega^f \epsilon_p^f P_\gamma^f (1 - N\Omega\epsilon_p)^{M-f} \quad (18)$$

Il faut noter que les expressions (17) et (18) ne sont valables que dans le cas où les  $M$  transitions  $\gamma$  de la cascade ont les mêmes énergies et dans le cas où les  $N$  détecteurs du multicompteur sous-tendent tous le même angle solide et ont tous les mêmes efficacités absolue ou photopic.

Dans la figure 6 sont reportées les valeurs de probabilité  $P_f^N(30)$  pour une cascade de multiplicité  $M = 30$ , en fonction de l'efficacité de détection photopic totale et pour différents valeurs du fold  $f$ .

Cette figure montre clairement que pour des valeurs de  $E_p \sim 0,01$  la probabilité de détection d'un fold 2 (coïncidences  $\gamma\gamma$ ) n'est que de  $\sim 3\%$  et celle d'un fold 3 de  $\sim 0,3\%$ . Une augmentation de la quantité  $E_p$  permettra donc d'augmenter considérablement ces probabilités. En se fixant comme objectif de réaliser avec EUROGAM des mesures de coïncidences  $\gamma$  d'ordre  $f = 6$  avec des statistiques de comptage similaires aux mesures de coïncidences doubles effectuées avec les multicompteurs actuels, on peut déduire, à partir de la figure 6, une efficacité de détection photopic totale pour ce nouveau multidétecteur :

$$N\Omega\epsilon_p P_\gamma \simeq 7,5 \times 10^{-2}$$

Au paragraphe 2 nous avons défini des limites supérieures pour  $\Omega$  ( $\sim 5 \times 10^{-3}$ ) et inférieure pour  $P_\gamma$  ( $\sim 90\%$ ). Au paragraphe 3 nous avons montré que les valeurs d'efficacité photopic intrinsèque  $\epsilon_p$  pour les détecteurs actuels ne dépassent pas  $\sim 0,23$ . A partir de ces valeurs on peut donc en déduire une valeur pour le nombre de détecteurs Ge :  $N \simeq 72$ . Ce nombre a donc été retenu pour la construction de EUROGAM.

#### - Taux de coïncidences $\gamma^n$ déduits de $P_f^N(M)$

Une autre façon de regarder l'influence de l'efficacité de détection  $E_p$  est de considérer le taux de coïncidences  $\gamma^n$  qui peut être déduit de l'ensemble des folds.

Par exemple pour un événement  $f = 4$  (4 compteurs touchés) on aura : 6 ( $C_2^4$ ) coïncidences  $\gamma^2$ , 4 ( $C_3^4$ ) coïncidences  $\gamma^3$  et 1 coïncidence  $\gamma^4$ .

Le taux de coïncidence  $\gamma^n$  qui peut être déduit de l'ensemble des folds pourra donc s'écrire :

$$\gamma^n = \sum_{f=n}^M C_n^f P_f^N(M) \quad (19)$$

Ces taux sont représentés sur la figure 7 en fonction de l'efficacité de détection photopic totale  $E_p$ .

### 5) Résolution en énergie, sous faisceau, des détecteurs Ge

La résolution en énergie des détecteurs Ge coniques discutés au paragraphe 3 est de  $\sim 2,2$  keV pour un rayonnement  $\gamma$  de 1332 keV. Mais à cette résolution intrinsèque, il faut ajouter l'élargissement Doppler des pics dans les spectres de rayonnements  $\gamma$ .

L'énergie moyenne mesurée d'un rayonnement  $\gamma$  émis dans le vide par un noyau de recul formé dans une réaction de fusion évaporation est donnée par la relation :

$$E_\gamma(\theta) = E_0(1 + \beta \cos\theta) \quad (20)$$

où  $\theta$  est la position angulaire du détecteur par rapport à l'axe du faisceau,  $E_0$  est l'énergie réelle de ce rayonnement et  $\beta$  la vitesse du noyau de recul émettant le photon ( $\beta = v/c$ ).

D'après l'expression (20) il est clair que pour des angles voisins de  $0^\circ$ , la perte d'énergie du faisceau incident dans la cible ainsi que la perte de vitesse des noyaux de recul dans la cible vont entraîner une incertitude sur la vitesse  $\beta$  des noyaux de recul et donc un élargissement des pics  $\gamma$ .

La contribution de l'ouverture angulaire à l'élargissement Doppler peut être calculée par l'expression :

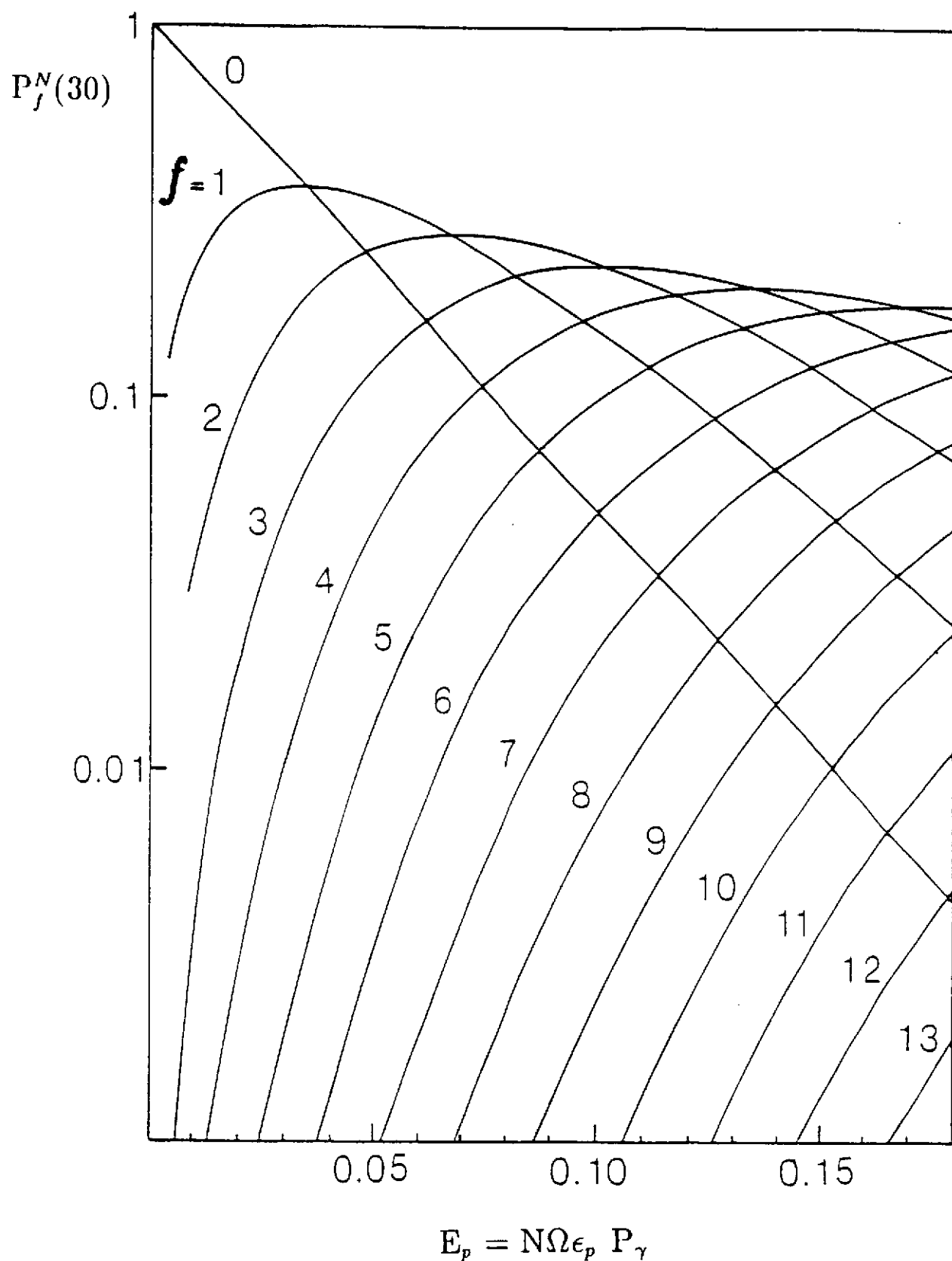
$$\Delta E_\gamma = E_0 \beta \int_{\theta-\Delta\theta}^{\theta+\Delta\theta} \sin\theta d\theta \quad (21)$$

où  $\Delta\theta$  est le demi-angle d'ouverture du détecteur. Cet effet est donc tout particulièrement important pour des angles voisins de  $90^\circ$  et pour des vitesses de recul élevées.

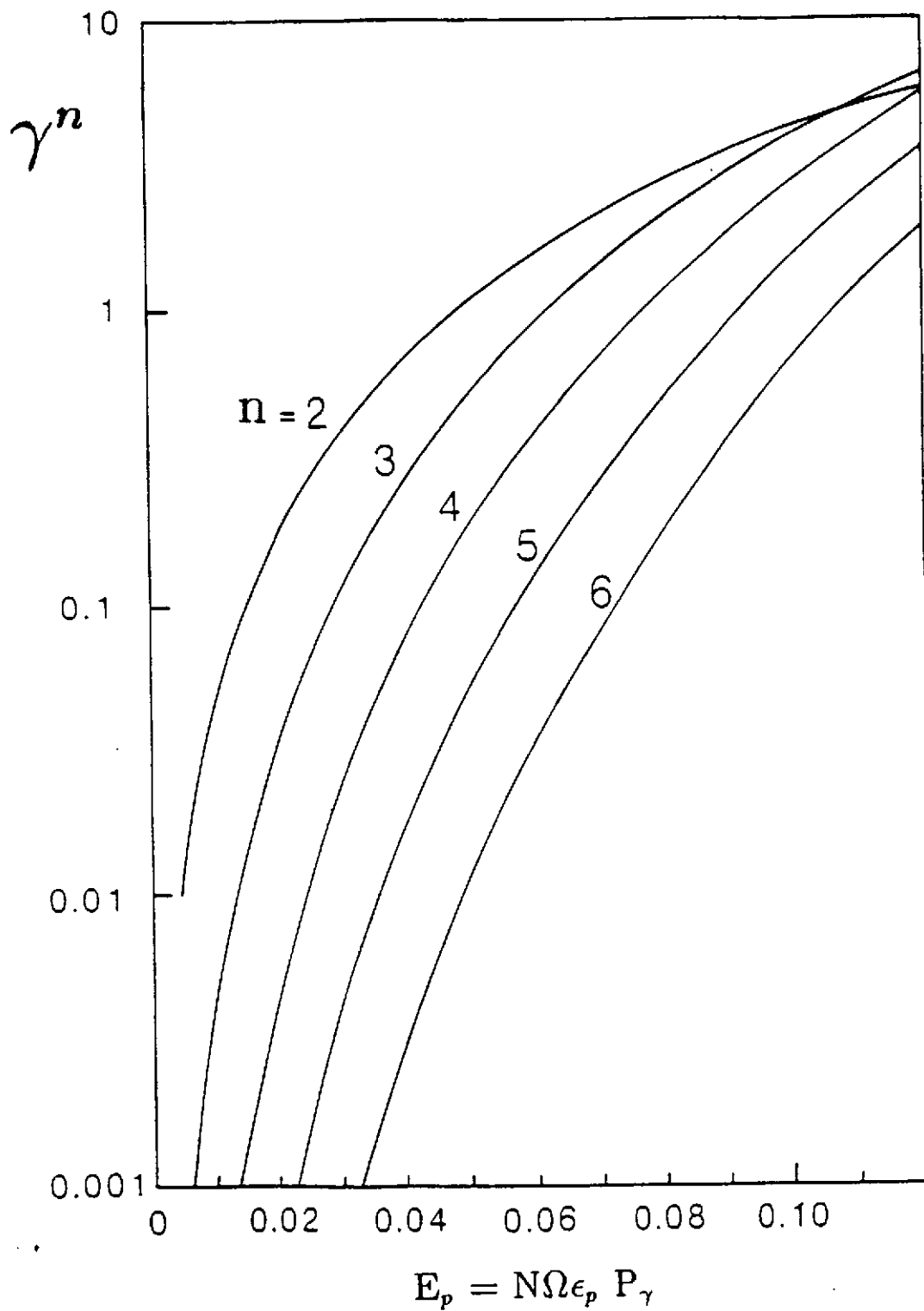
L'utilisation des techniques de simulation discutées précédemment<sup>6)</sup> appliquées au calcul de l'élargissement Doppler a permis d'évaluer l'élargissement des pics que l'on peut atteindre dans différentes conditions expérimentales. Dans le tableau 6, sont reportées les largeurs à mi-hauteur calculées pour un pic correspondant à une transition  $\gamma$  d'énergie  $E_\gamma = 1332$  keV produite dans deux réactions, les vitesses de recul initiales  $\beta$  étant très différentes : la réaction  $^{124}\text{Sn}(^{30}\text{Si},5n)^{149}\text{Gd}$  (notée R1) à une énergie de bombardement de 155 MeV ( $\beta \simeq 2,0\%$ ), les deux cibles auto-portées ayant une épaisseur de  $0,4$  mg/cm<sup>2</sup> chacune et la réaction symétrique en masse en voie d'entrée  $^{74}\text{Ge}(^{82}\text{Se},4n)^{152}\text{Dy}$  (notée R2) à une énergie de bombardement de 335 MeV ( $\beta \simeq 4,9\%$ ), les deux cibles auto-portées ayant une épaisseur de  $0,25$  et  $0,35$  mg/cm<sup>2</sup>.

Réaction	0°	30°	60°	90°
R1	2,8	3,7	5,3	6,1
R2	4,5	7,1	11,9	14,0

**Tableau 6 :** Elargissements Doppler calculés dans la géométrie EUROGAM initiale pour les réactions R1 et R2 ; les valeurs reportées correspondent aux largeurs à mi-hauteur (keV) d'une raie  $\gamma$  d'énergie  $E_\gamma = 1332$  keV, observée à différents angles.



**Figure 6 :** Probabilité  $P_f^N(30)$  de détecter exactement  $f$  transitions  $\gamma$  (événements photopics) parmi une cascade de multiplicité  $M = 30$  à l'aide de  $N$  compteurs identiques, en fonction de l'efficacité de détection photopic totale  $E_p = N\Omega\epsilon_p P_\gamma$



**Figure 7 :** Nombre de coïncidences d'ordre  $n$ ,  $\gamma^n$ , détectés par cascade de  $M = 30$  transitions, en tenant compte des folds d'ordre supérieur à  $n$ , en fonction de l'efficacité de détection photopic totale  $E_p = N\Omega\epsilon_p P_\gamma$

La seule manière de réduire l'élargissement Doppler aux angles proches de  $0^\circ$  est de jouer sur l'épaisseur de cible et le type de réaction (faisceau plutôt léger). Par contre aux angles voisins de  $90^\circ$ , la contribution essentielle à l'élargissement provient de l'ouverture angulaire du détecteur. Pour diminuer l'angle solide d'éclairage des détecteurs Ge, il y a deux moyens : soit resserrer la collimation soit augmenter la granulométrie des détecteurs. La technique qui consiste à collimater a l'avantage d'être simple à mettre en oeuvre mais présente le désavantage de réduire l'efficacité de détection d'une façon parfois prohibitive. L'augmentation de granulométrie la plus simple consisterait à diviser le détecteur et cette idée a été étudiée en détails à l'aide de calculs de simulation<sup>6)</sup> et a donné lieu au détecteur "trèfle" discuté un peu plus loin.

## 6) Pouvoir de résolution

Pour essayer de situer la "qualité" d'un détecteur ou d'un multidétecteur, on définit une nouvelle quantité : le pouvoir de résolution  $R$ .

Considérons une bande rotationnelle comportant des transitions  $\gamma$  dont l'espacement en énergie est en moyenne  $SE_\gamma$  et soient  $\Delta E_\gamma$  la résolution pour un pic d'énergie  $E_\gamma$  donnée (résolution sous faisceau) et  $PT_{AC}$  le rapport Pic sur Total mesuré en source, le détecteur étant dans son enceinte anti-Compton. On définit alors :

$$R = \frac{SE_\gamma}{\Delta E_\gamma} \times PT_{AC} \quad (22)$$

L'espacement  $SE_\gamma$  est un paramètre purement physique sur lequel on ne peut pas intervenir. Il vaut environ 50 keV pour une bande SD dans la région des terres rares. Par contre, comme nous l'avons montré précédemment le rapport  $PT_{AC}$  et la résolution en énergie  $\Delta E_\gamma$  sont deux grandeurs qui dépendent directement de la géométrie de détection.

En passant de coïncidences d'ordre  $n$  ( $\gamma^n$ ), à des coïncidences d'ordre  $n+k$  ( $\gamma^{n+k}$ ) le gain en sélectivité est de  $R^k$ , ce qui veut dire que le rapport signal sur bruit va être amélioré d'un facteur  $R^k$ . Il est donc primordial d'avoir  $\Delta E_\gamma$  le plus petit possible et  $PT_{AC}$  le plus grand possible.

Par exemple dans le cas de l'étude, à l'aide du système  $8\pi$  canadien, des transitions de plus haut spin appartenant à la bande SD du noyau  $^{149}\text{Gd}^{16)}$ , le rapport pic sur fond dans les spectres  $\gamma$  de coïncidences triples a augmenté d'un facteur 6 par rapport aux spectres  $\gamma$  obtenus à partir de coïncidences doubles. Pour ce multidétecteur  $\Delta E_\gamma = 4,0$  keV et  $PT_{AC} = 0,50$  ce qui donne en effet pour le pouvoir de résolution d'une bande SD  $R \simeq 6.25$ .

## 7) Géométrie adoptée

La figure 8 montre de façon schématique la structure géométrique générale retenue pour la définition d'EUROGAM. Les douze faces pentagonales du dodécaèdre comprennent chacune six sous-structures (5 pentagones ayant même géométrie et 1 pentagone central plus petit). Cela conduit à 60 unités identiques (même enceinte anti-Compton BGO) et 12 cavités à angle solide réduit entraînant un éloignement des détecteurs. Si on considère que l'on perd deux détecteurs

pour l'entrée et la sortie de faisceau, cette géométrie permettra 70 détecteurs.

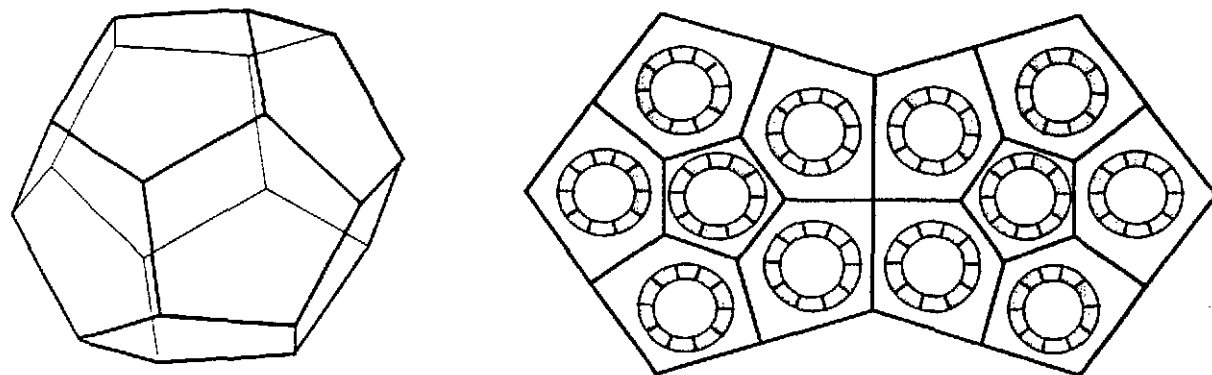


Figure 8 : Représentation schématique de la structure géométrie générale d'EUROGAM.

Dans la première phase d'exploitation auprès de l'accélérateur électrostatique de Daresbury, EUROGAM comprendra 45 détecteurs Ge coniques dont les propriétés ont été discutées aux cours des paragraphes précédents. La partie avant restant libre, le multidétecteur pourra être utilisé en coïncidence avec d'autres compteurs et en particulier avec le spectromètre de recul placé à  $0^\circ$  par rapport à l'axe du faisceau incident [Fig.9].

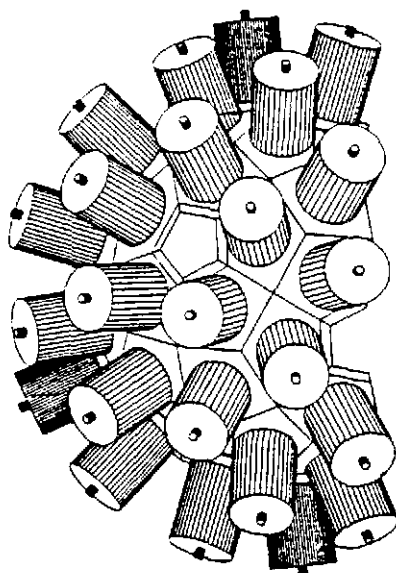


Figure 9 : Représentation schématique de EUROGAM dans la phase 1.

Pour la phase 2 auprès de l'accélérateur VIVITRON, la solution la plus simple consisterait à compléter la structure à 70 détecteurs Ge de même type. Malheureusement la très grande augmentation de l'efficacité ne jouerait pas pleinement son effet par suite de l'impossibilité de corriger les élargissements Doppler et donc d'augmenter de façon dramatique le pouvoir de résolution. Un nouveau type de détecteurs Ge a ainsi été proposé : le détecteur trèfle<sup>6)</sup>.

Ce détecteur est constitué de quatre diodes d'efficacité  $\epsilon_r \simeq 20\%$  taillées de façon à pouvoir être placées très proche dans un même cryostat mais découplées électriquement. Son fonctionnement suppose l'utilisation de quatre préamplificateurs indépendants dont les signaux pourront être sommés, après codage et correction, en cas de déclenchement simultané. Intrinsèquement ce détecteur présente plusieurs avantages :

- les diodes d'efficacité  $\epsilon_r \simeq 20\%$  sont moins sensibles aux dommages neutrons que les détecteurs de gros volume atteignant  $\epsilon_r \simeq 70\%$ .
- la géométrie "trèfle" est une géométrie idéale pour mesurer des polarisations planes (voir figure 10)
- l'efficacité de détection  $\epsilon_p = 0,27$  supérieure à celle du détecteur coaxial conique, permettra une augmentation de l'efficacité de détection globale
- l'angle solide total sous-tendu par le détecteur étant  $\Omega = 4,6 \times 10^{-3}$ , ceci implique que l'ouverture angulaire de chaque détecteur individuel sera beaucoup plus faible que pour les gros détecteurs coniques. Il en résultera une amélioration considérable de la résolution en énergie  $\Delta E$ , sous faisceau et donc du pouvoir de résolution R.

Si on regarde plus en détail la structure de EUROGAM, on s'aperçoit d'autres sous-structures qui permettent de le décomposer en deux calottes et une structure centrale (autre 60° et 120°). C'est précisément cette dernière zone qui est la plus sensible aux problèmes d'élargissement Doppler et que l'on se propose de remplacer par des détecteurs "trèfle" (Fig.11). Le multicompteur EUROGAM comprendrait alors pour la phase 2 :

- à l'avant et à l'arrière 15 détecteurs monolithiques coniques
- entre 60° et 120° un nombre N de détecteurs "trèfle"

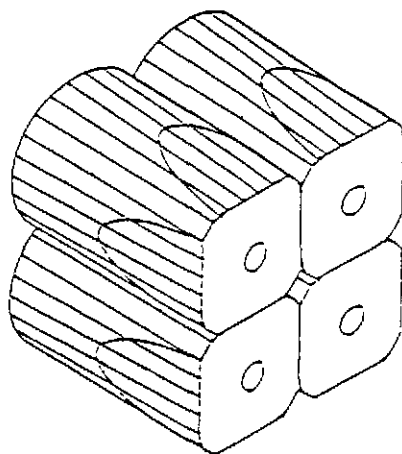


Figure 10 : Représentation schématique du détecteur "trèfle".



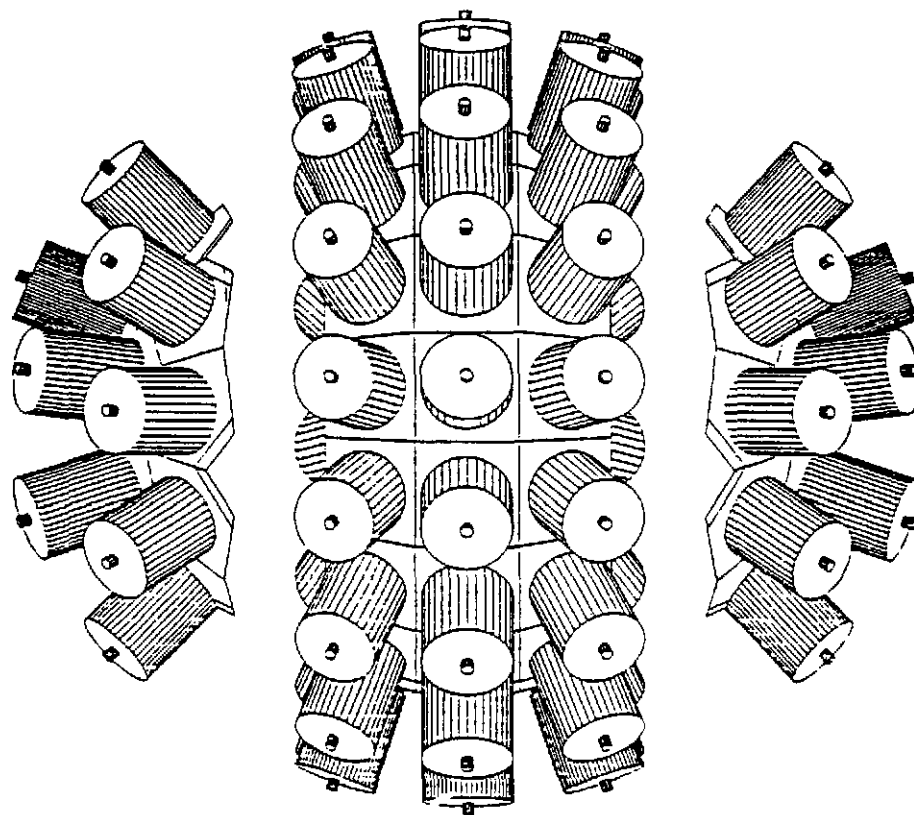


Figure 11 : Structure de EUROGAM pour la phase 2. La structure centrale (angles compris entre  $60^\circ$  et  $120^\circ$ ) pourrait être remplie par 3 couronnes de 16 détecteurs "trèfle".

La structure de la bande entre  $60^\circ$  et  $120^\circ$  montre clairement que la façon la plus efficace (en ne perdant pas d'angle solide) de remplir cette zone est d'utiliser des détecteurs ayant une structure parallélépipédique, ce qui est précisément le cas de ces nouveaux détecteurs. On peut ainsi imaginer de remplir cette zone par trois couronnes de 16 compteurs entourés d'unités anti-Compton. On aurait alors au total 78 compteurs (30 détecteurs coniques, 48 détecteurs "trèfle") pour EUROGAM, le gain en taux de comptage pour les coïncidences d'ordre 4,5,6 étant respectivement de 12, 23 et 43 comparé à la phase I.

## V. CONCLUSIONS

La limite de détection pour les multicompteurs actuels est de l'ordre de  $10^{-4}$  par rapport aux sections efficaces totales des réactions de fusion-évaporation principalement utilisées dans

les études de spectroscopie gamma. L'objectif du projet EUROGAM est d'abaisser cette limite à  $10^{-5}$  (phase 1) puis à  $10^{-6}$  (phase 2) et ce nouveau multidétecteur permettra sans nul doute de mettre en évidence une très grande variété de phénomènes nouveaux. Dans les études du comportement du noyau à haut moment angulaire, il est très probable que les premières expériences se focaliseront sur : la mesure de l'énergie d'excitation et du moment angulaire des états qui constituent les bandes superdéformées, la mise en évidence des rayonnements  $\gamma$  d'alimentation et de désexcitation des bandes SD, la détermination des connexions entre les différentes bandes SD d'un même noyau, la recherche de bandes hyperdéformées à très haut spin . . . L'ensemble de la communauté franco-britannique des spectroscopistes nucléaires travaille actuellement d'arrachepied pour que EUROGAM soit prêt pour les premières expériences au printemps 1992.

### Références

- [1 ] V.Metag et al., Nucl.Phys.A**409** (1983) 331 c.
- [2 ] M.Jääskeläinen et al., Nucl.Instr. Meth. **204** (1983) 385
- [3 ] F.A.Beck, Proceedings of the Conference on instrumentation for heavy-ion nuclear research, Oak Ridge, 22-24 October 1984.
- [4 ] P.J.Twin, Proceedings of the Conference on instrumentation for heavy-ion nuclear research, Oak Ridge, 22-24 october 1984.
- [5 ] N.Schulz et al., Phys.Rev.Lett **63** (1989) 2645.
- [6 ] G.de France, Thèse ULP Strasbourg (1991).
- [7 ] P.J.Twin et al., Phys.Rev.Lett. **57** (1986) 811.
- [8 ] B.Haas et al., Phys.Rev.Lett. **60** (1988) 503.
- [9 ] E.F.Moore et al., Phys.Rev.Lett. **63** (1989) 360.
- [10 ] K.Zuber et al., Phys.Lett.**B254** (1991) 308.
- [11 ] J.P.Martin et al., Nucl. Inst. Meth. **A257** (1987) 301.
- [12 ] R.M.Lieder et al., Nucl. Inst.Meth. **220** (1984) 363.
- [13 ] J.F.Sharpey-Schafer et J.Simpson, Progress in Part. and Nucl. Phys. **21** (1988) 293.
- [14 ] F.S.Stephens, Proceedings of the Int. Symposium on In-Beam Nucl.Spect., Debrecen, 14-18 May (1984).
- [15 ] B.Herskind, Nucl. Phys. **A447** (1985) 395c
- [16 ] B.Haas et al., Phys.Rev. **C42** (1990) R1817
- [17 ] Rapport GAMMASPHERE édité par M.A.Deleplanque et R.M.Diamond (1988).



SUPERDEFORMED NUCLEI

Robert V. F. Janssens and Teng Lek Khoo

Argonne National Laboratory, Argonne, Illinois 60439, USA

Résumé: Le texte ci-après présente une revue des progrès les plus récents accomplis dans le domaine de l'étude de la superdéformation. L'accent principal est mis sur la présentation des résultats expérimentaux. Parmi les sujets traités on trouvera: (1) la découverte d'une nouvelle région de superdéformation proche de  $A=190$ , (2) la surprenante présence de bandes superdéformées avec des transitions identiques en énergie dans des noyaux voisins proches de  $A=150$  et  $A=190$ , (3) le rôle de la déformation octupolaire dans le potentiel superdéformé et (4) une discussion des propriétés associées avec l'alimentation et la désexcitation des bandes superdéformées. Ce texte apparaîtra comme une contribution à la revue Annual Review of Nuclear and Particle Science, Volume 41.

Abstract: This paper reviews the most recent advances in the understanding of the physics of superdeformed nuclei from the point of view of the experimentalists. It covers among other subjects the following topics: (1) the discovery of a new region of superdeformed nuclei near  $A=190$ , (2) the surprising result of the occurrence of bands with identical transition energies in neighboring superdeformed nuclei near  $A=150$  and  $A=190$ , (3) the importance of octupole degrees of freedom at large deformation and (4) the properties associated with the feeding and the decay of superdeformed bands. The text presented hereafter will appear as a contribution to the Annual Review of Nuclear and Particle Science, Volume 41.

## 1. INTRODUCTION

The ever increasing accuracy with which nuclear structure studies can be performed experimentally and theoretically has yielded a wealth of fascinating new results. It is by now well known that throughout the periodic table, nuclei can adopt a rich variety of shapes, particularly when rotated. This is the result of the interplay between macroscopic (liquid drop) and microscopic (shell correction) contributions to the total energy of the nucleus. The shell correction is a quantal effect arising from the occupation of non-uniformly distributed energy levels. Rotation affects the nuclear shape by modifying both the liquid drop moment of inertia and the nucleonic occupation of specific shape-driving orbitals. Many interesting phenomena have been reported in rapidly rotating nuclei; examples are the alignment of particle spins along the rotation axis (backbending), the transition from prolate collective to oblate aligned-particle structures (band termination), the possible occurrence of triaxial shapes, and the onset of octupole instabilities. The most spectacular experimental result to date is the discovery of superdeformation, where nuclei are trapped in a metastable potential minimum associated with very elongated ellipsoidal shapes corresponding to an axis ratio of roughly 2:1.

Superdeformation was first proposed some twenty years ago to explain the fission isomers observed in some actinide nuclei [1,2]. It was later realized that superdeformed shapes can occur at high angular momentum in lighter nuclei [3-7]. The interest in the mechanisms responsible for these exotic shapes has increased enormously with the discovery of a superdeformed band of nineteen discrete lines in  $^{152}\text{Dy}$  [8]. At about the same time, evidence for highly deformed nuclei (axis ratio 3:2) was also reported near  $^{132}\text{Ce}$  [9]. Striking properties emerged from the first experiments, such as the essentially constant energy spacing between transitions ("picket-fence" spectra), the unexpectedly strong population of superdeformed bands at high spins, and the apparent lack of a link between the superdeformed states and the yrast levels.

These findings were reviewed by Nolan and Twin [10]. The present article follows upon this work and discusses the wealth of new information that has since become available. This includes the discovery of a new "island" of superdeformation near  $A = 190$ , the detailed spectroscopy of "ground" and excited bands in the superdeformed well near  $A = 150$  and  $A = 190$ , the surprising occurrence of superdeformed bands with identical transition

energies in nuclei differing by one or two mass units, and the improved understanding of mechanisms responsible for the feeding into and the decay out of the superdeformed states.

## 2. A NEW REGION OF SUPERDEFORMATION

### 2.1 Calculations of Superdeformed Shapes

As alluded to above, the single-particle energy spectrum plays an essential role in the determination of the nuclear shape. The stability of spherical nuclei at closed shells is related to large gaps in the energy level spectrum of the various orbitals. Shell gaps also occur in the single-particle spectrum for specific deformations. In an axially symmetric harmonic oscillator [11], these shell gaps occur when the lengths of the principal axes form integer ratios and, in particular, when the ratio is 2:1:1, which corresponds to a quadrupole deformation  $\beta_2$  [12] of 0.65. These shell corrections, superimposed on a smooth liquid drop contribution, can generate local minima in the potential energy surface. The cranked-Strutinsky method is often used to calculate potential energy surfaces. In this approach, the total energy of a nucleus is calculated as a sum of liquid drop and shell correction terms. The liquid drop energy is a sum of Coulomb, surface and rotational energies. All of these terms are calculated as a function of nuclear deformation. In the heaviest nuclei, strong Coulomb forces favor large deformations, balancing the surface energy which favors compact shapes. Because of this balancing, shell corrections at large deformations give rise to pronounced potential minima which are responsible for the fission isomers [1]. At high spin in the  $A = 150$  region, it is the rotational energy term that balances out the surface term at large deformation and makes superdeformation possible. Several cranked-Strutinsky calculations, using either an anharmonic oscillator potential [5,13] or a Woods-Saxon potential [6,7], have been quite successful in predicting the existence of an "island" of superdeformation for  $Z \sim 64$  and  $N \sim 86$  as well as the occurrence of "nearly" superdeformed nuclei ( $\beta_2 = 0.4$ ) for  $Z \sim 58$  and  $N \sim 74$ . The calculations indicate that pronounced secondary minima are obtained only when both proton and neutron shell corrections are favorable and this leads to the occurrence of these "islands" in the periodic table.

Superdeformed minima in a great number of nuclei with  $Z \geq 80$  were originally predicted by Tsang and Nilsson [3] at zero spin and later confirmed

in several other calculations. From general expectations (e.g. ref. [5]), these minima survive and come closer to the yrast line with increasing spin. More recent calculations [13-15] have suggested that the superdeformed minimum becomes yrast at spins in excess of  $30\hbar$  in nuclei with  $Z \sim 80$ ,  $N \sim 112$ . Calculated potential energies [15] as a function of quadrupole deformation are presented in fig. 1 for different spin values in the nucleus  $^{191}\text{Hg}$ . From the figure, it is clear that a deep minimum exists at very large deformation ( $\beta_2 \sim 0.5$ , axis ratio  $\sim 1.65:1$ ) and this minimum is calculated to persist down to the lowest spins even though the well depth diminishes. Here, both strong Coulomb and rotational effects play a significant role. The occurrence of a superdeformed minimum at zero spin in the  $A = 190$  region has also been predicted in calculations using static, self-consistent Hartree-Fock and Hartree-Fock-Bogoliubov calculations [16,17].

## 2.2 The First Superdeformed Band in the $A = 190$ Region

First experimental evidence for a new region of superdeformation near  $A = 190$  became available in 1989. As can be seen in figure 2, a weak rotational band of 12 transitions was observed in the nucleus  $^{191}\text{Hg}$  [18]. The measured properties of this band identify it as a superdeformed band; i.e. (1) the average energy spacing is small (37 keV) and corresponds to an average dynamic moment of inertia  $J^{(2)}$  of  $110 \hbar^2 \text{MeV}^{-1}$ , which agrees well with expectations based on cranked-Strutinsky calculations [15], and (2) the measured average quadrupole moment of  $18 \pm 3$  eb implies a large quadrupole deformation ( $\beta_2 \sim 0.5$ ). The band also exhibits other characteristics which are similar to those noted for superdeformed bands in the  $A = 150$  region, such as (1) the small total intensity with which the band is fed (the flow through the band represents  $\sim 2\%$  of the  $^{191}\text{Hg}$  intensity), (2) the intensity pattern (which shows that  $\gamma$ -ray intensity in the band decreases gradually with increasing  $\gamma$ -ray energy, while at the bottom of the cascade it remains constant over the last 3-4 transitions), and (3) the fact that the transitions linking the superdeformed band to the yrast states could not be observed.

Several important questions were raised by the original experimental result. First,  $J^{(2)}$  was found to increase steadily with the rotational frequency  $\hbar\omega$  (defined as  $E_\gamma/2$ ). Mean-field calculations which attempt to reproduce variations in  $J^{(2)}$  have suggested that such a rise may be attributed to three major factors which could contribute separately or cooperatively: (i) shape changes as a function of  $\hbar\omega$  (e.g. centrifugal

ANL-P-19,578

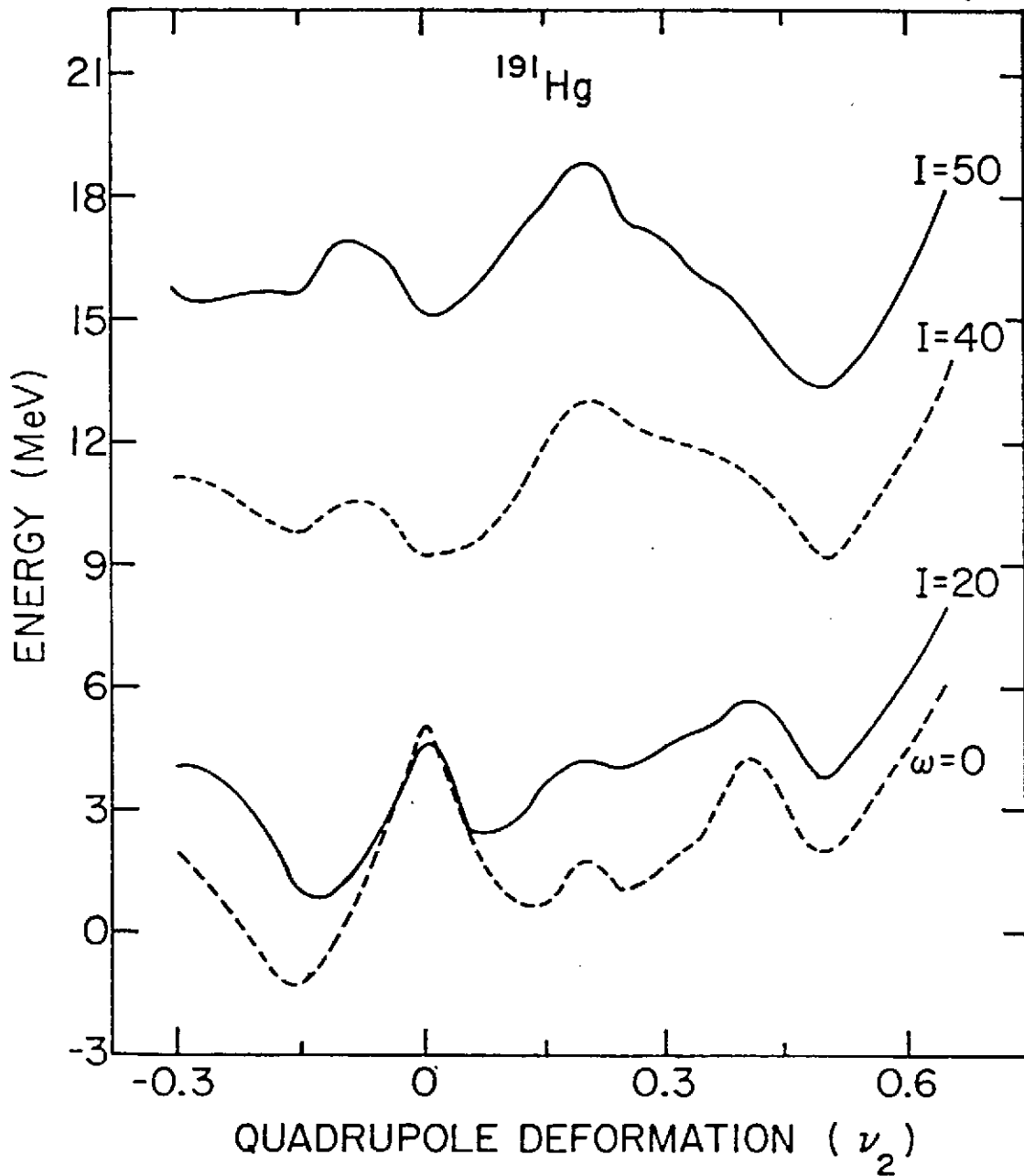


Figure 1: Total energy as a function of quadrupole deformation for different spin values in  $^{191}\text{Hg}$  (from [15]).



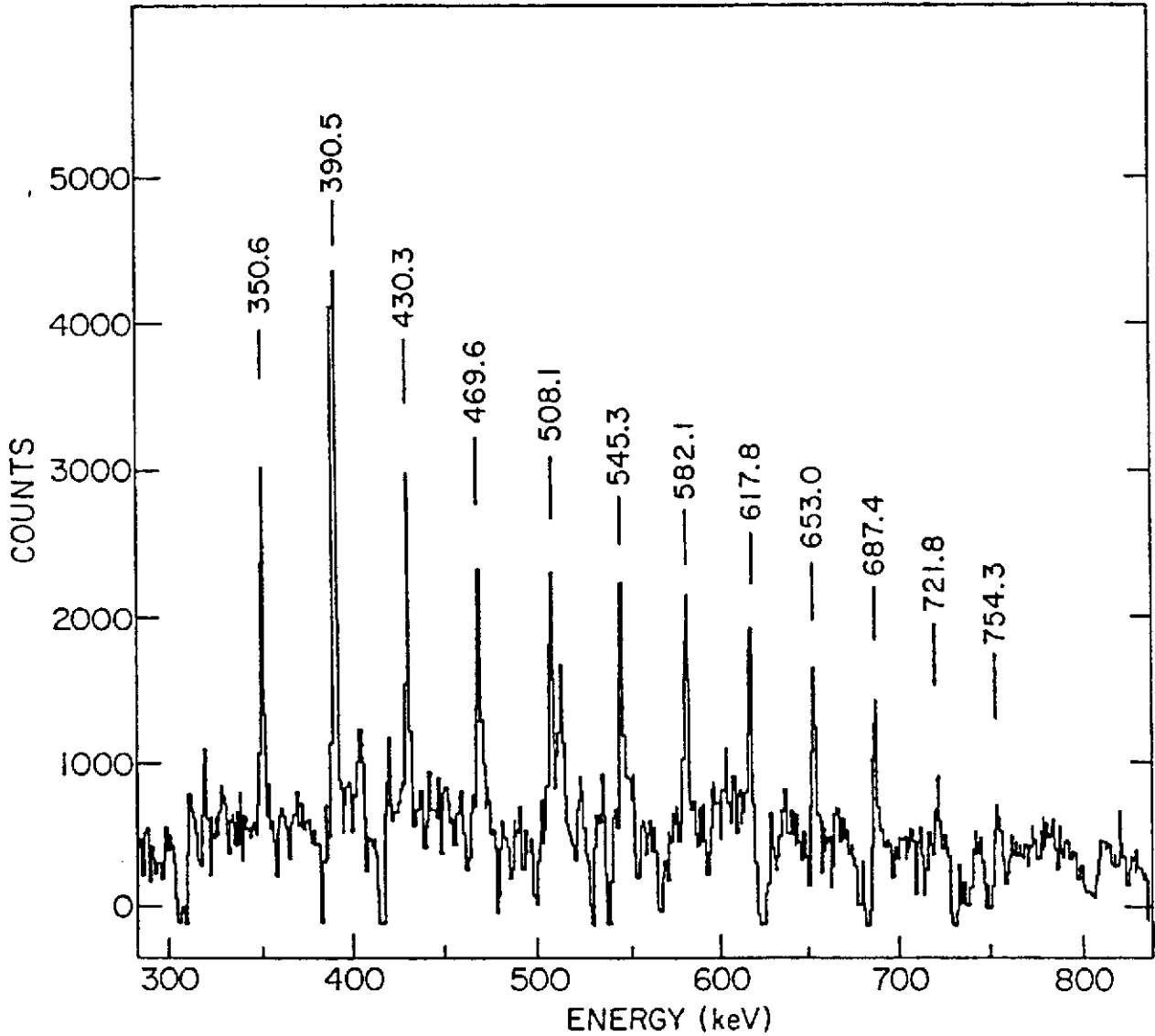


Figure 2:  $\gamma$ -ray spectrum of the first superdeformed band observed in the  $A = 190$  region [18]. The 390 keV transition is an unresolved doublet consisting of a transition in the superdeformed band and the  $17/2^+ - 13/2^+$  groundstate transition in  $^{191}\text{Hg}$ .

stretching), (ii) changes in pairing at large deformations [19], and (iii) occupation of specific high-N orbitals [19,20] (i.e. high-N orbitals from two major shells higher which plunge down as a function of deformation and come towards the Fermi surface at very large deformations, in this case  $i_{13/2}$  protons and  $j_{15/2}$  neutrons). Second, this superdeformed band was found to decay only to the  $17/2^+$  yrast state of  $^{191}\text{Hg}$ , and it was neither possible to obtain a firm indication of the spins of the superdeformed states nor to assess whether the link between superdeformed states and the yrast levels is statistical in nature, as in the  $A = 150$  region [10], or occurs only through a few specific transitions. Finally, questions concerning the existence of other superdeformed nuclei (as predicted by theory [15]) and the limits in  $N$  and  $Z$  of the superdeformed region also needed attention.

### 2.3 Superdeformation in $^{192}\text{Hg}$

An impressive number of new results in the  $A = 190$  region has become available recently. However, before presenting these we shall first summarize the present experimental situation concerning  $^{192}\text{Hg}$ , the nucleus regarded as the analog of  $^{152}\text{Dy}$  for this region in the sense that shell gaps are calculated [15,21] to occur at large deformation for both  $Z=80$  and  $N=112$  (see below). The superdeformed band of  $^{192}\text{Hg}$ , measured with the  $^{160}\text{Gd}(^{36}\text{S},4n)$  reaction at 162 MeV [22], is presented in fig. 3a. (The 16 transitions have also been observed in an independent experiment [23].) The total flow through the band represents 1.9% of all transitions in  $^{192}\text{Hg}$ . From fig. 3a it is clear that the band feeds the known levels up to  $8^+$  in the positive-parity yrast sequence and up to  $9^-$  in the negative parity band. Transitions which link the superdeformed band with known yrast levels could not be found. It is likely that many different decay paths share the intensity and that the link is statistical in nature. This assumption is supported by the observation that the feeding into the yrast states is spread over several states belonging to bands of opposite parity with rather different intrinsic structure [24]. Thus, the mechanism of deexcitation out of the superdeformed bands in this region appears to be similar to that discussed for the  $A = 150$  region [10].

As in the case of  $^{191}\text{Hg}$ , the transition energies in the superdeformed band of  $^{192}\text{Hg}$  extend to much lower energy than in superdeformed bands of the  $A = 150$  region (the lowest transition energy in  $^{152}\text{Dy}$  is 602 keV, as opposed to 257 keV in  $^{192}\text{Hg}$ ). If transition energies (and rotational frequencies) can be related to spin, this result indicates that superdeformation persists to lower

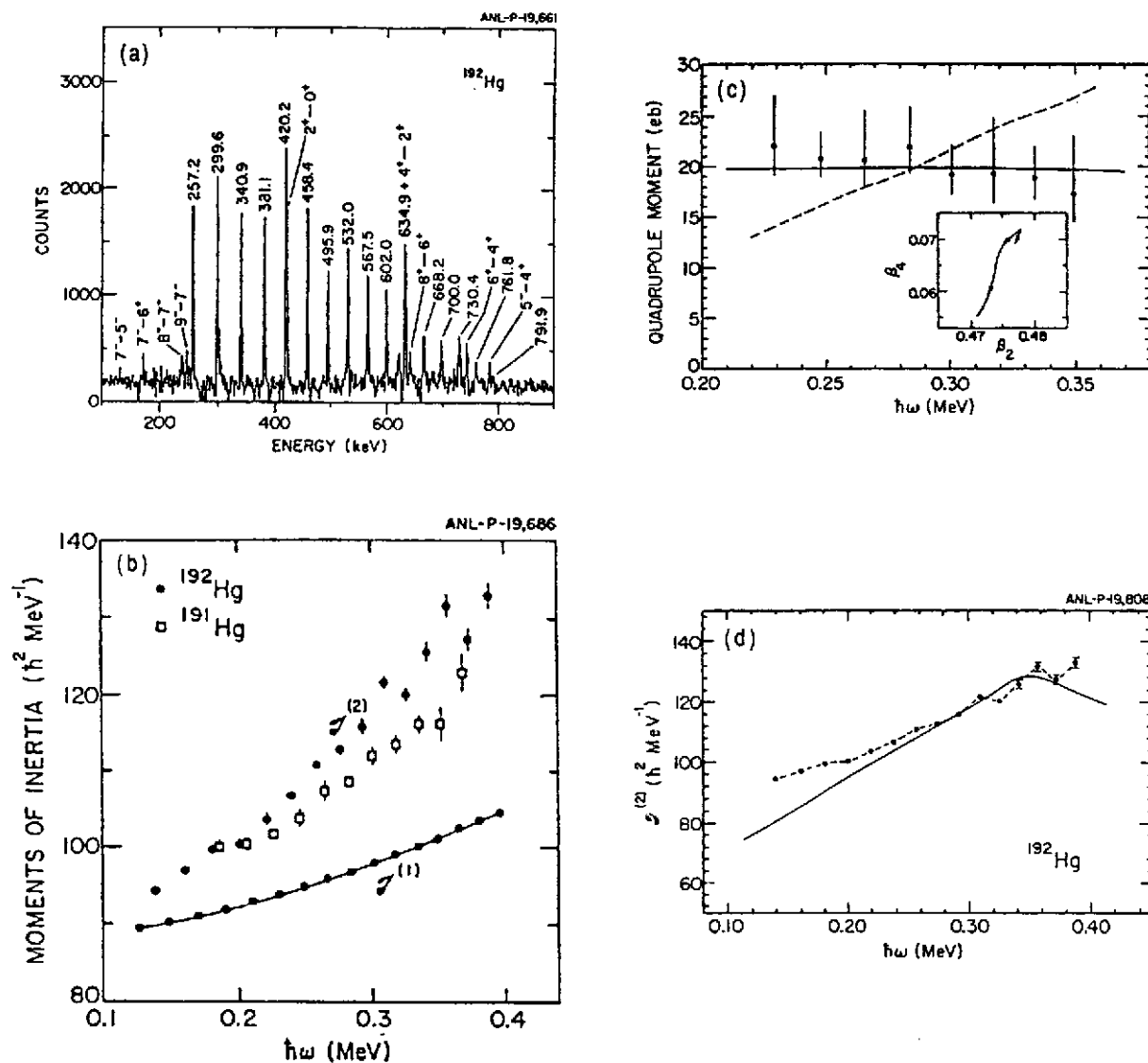


Figure 3: (a): spectrum of the superdeformed band in  $^{192}\text{Hg}$  obtained from the sum of selected coincidence spectra [22]. The energies of the superdeformed transitions are indicated and transitions between yrast states are also given. (b): comparison between the dynamic moments of inertia  $J^{(2)}$  for the superdeformed bands in  $^{191,192}\text{Hg}$ . The static moment of inertia  $J^{(1)}$  is also given for  $^{192}\text{Hg}$  assuming spin values for superdeformed states discussed in the text. (c): comparison between the measured and calculated transition quadrupole moments  $Q_t$  in the superdeformed band of  $^{192}\text{Hg}$  [25]. The dashed line represents a calculation assuming that the rise in  $J^{(2)}$  is due to centrifugal stretching, the solid line is the result of a cranked shell model calculation discussed in the text and the inset shows the calculated change in the deformation parameters over the frequency range of interest (the arrows point towards increasing frequency). (d): comparison between the measured and calculated  $J^{(2)}$  values for the superdeformed band in  $^{192}\text{Hg}$  [25].

spin in the new region. The data on  $^{192}\text{Hg}$  allow for the verification of this assertion. The spin of the lowest level in the superdeformed band was estimated to be  $10\hbar$  from the average entry spin ( $8\hbar$ ) into the yrast states [22,23] and the assumption of a  $\Delta L=2\hbar$  angular momentum removal by the transitions linking the superdeformed states and the yrast line. The same spin value is also obtained [23] from a procedure where  $J^{(2)}$  is fit by a power series expansion in  $\omega^2$ , which is then integrated to give the spin (see section 4.2). With these assumed spin values, a static moment of inertia  $J^{(1)}$  can be derived: the latter is presented as a function of  $\hbar\omega$  together with the values of  $J^{(2)}$  in fig. 3b. It is striking that: (1) there is a large monotonic increase (40%) in  $J^{(2)}$  with  $\hbar\omega$ , (2) the  $J^{(2)}$  values for  $^{192}\text{Hg}$  are similar, but always higher than those for  $^{191}\text{Hg}$  at the same frequency, and (3)  $J^{(2)}$  is significantly larger than  $J^{(1)}$  for all values of  $\hbar\omega$ .

Crucial information regarding the properties of the  $^{192}\text{Hg}$  superdeformed band were provided by detailed measurements of lifetimes with the Doppler-shift attenuation method (DSAM) [25]. In contrast with previous measurements for superdeformed states, where only fractional Doppler shifts  $F(\tau)$  were reported [10,18], in this work one has been able to analyze detailed lineshapes for individual transitions between superdeformed states. Such an analysis allows one to determine the variation of transition quadrupole moment ( $Q_t$ ) as a function of  $\hbar\omega$ , as opposed to previous studies where  $Q_t$  was assumed to be constant for all states in the band. The measured lifetimes  $\tau$  were transformed into transition quadrupole moments  $Q_t(I) = (1.22 \times 10^{20} / I - 2)^{2/3} \tau E_{\gamma}^5)^{-1/2}$  assuming the spin values given above. The  $Q_t$ -values are displayed as a function of  $\hbar\omega$  in fig. 3c. As can be seen, the quadrupole moment  $Q_t$ , and hence the deformation, remain essentially constant ( $Q_t \sim 20 \pm 2$  eb) over the entire frequency range. This result rules out centrifugal stretching as an explanation for the rise in  $J^{(2)}$ : this is illustrated by the dashed line in fig. 3c, where the values of  $Q_t$  have been derived assuming that the change in  $J^{(2)}$  is entirely due to a variation in deformation.

Bengtsson et al [20] have shown that the occupation of specific high-N intruder orbitals plays an important role in understanding the variations of  $J^{(2)}$  with mass number and rotational frequency in the  $A = 150$  region. This effect alone cannot account for the variation in  $J^{(2)}$  in  $^{191,192}\text{Hg}$ : mean-field calculations without pairing, such as those by Chasman [15] or Åberg [13], give proton and neutron contributions to  $J^{(2)}$  which remain essentially

constant with  $\hbar\omega$ . This finding points to the need to examine the effects of pairing (possibility (ii) in the discussion above) as pointed out originally by Ye et al [22]. This is best done in the framework of cranked deformed shell model calculations which include the effects of static and dynamic pairing, using either the Woods-Saxon or the modified-oscillator approach. The basis for these calculations is discussed in detail in refs. [26,27] and the first applications to the Hg nuclei can be found in refs. [21,25,28,29]. The neutron and proton Woods-Saxon routhians for large deformation [21] are presented in figure 4. It is seen that the large Z=80 shell gap remains at all rotational frequencies. In the neutron system there are two single-particle gaps at N=112 and N=116, separated by two high-K levels [512]5/2 and [624]9/2. Because of these shell gaps,  $^{192}_{80}\text{Hg}_{112}$  can be regarded as a doubly magic nucleus in the superdeformed well. For this nucleus the relevant high-N intruder orbitals which are occupied in the superdeformed configuration are four ( $i_{13/2}$ ) protons and four ( $j_{15/2}$ ) neutrons. Adopting the nomenclature of Bengtsson et al [20], the superdeformed configuration in  $^{192}\text{Hg}$  can be labelled ( $\pi 6^4 \nu 7^4$ ). Figure 3d compares the calculated dynamic moment of inertia with the data. In the calculation, pairing correlations were treated self-consistently by means of the particle number projection procedure [26], but the neutron pairing interaction strength was reduced. The rise in the calculated  $J^{(2)}$  can be ascribed to the combined gradual alignment of a pair of N=6 ( $i_{13/2}$ ) protons and of a pair of N=7 ( $j_{15/2}$ ) neutrons within the frequency range under consideration. The data are reproduced rather well. The evolution of the nuclear shape with  $\hbar\omega$  was also calculated. The inset in fig. 3c illustrates that within the frequency range of interest the predicted changes in the  $\beta_2$  and  $\beta_4$  deformation parameters are very small. The resulting  $Q_t$ -values agree well with the measured values as is shown by the solid line in fig. 3c. The success of the calculations in reproducing all aspects of the data allows one to propose that quasiparticle alignments and the resulting changes in pairing represent a major factor contributing to the rise in  $J^{(2)}$  in  $^{192}\text{Hg}$  and, probably, in other nuclei in this region. Further evidence for this conclusion, as well as for the power of the calculations, is discussed below.

#### 2.4 Neutron and Proton Excitations in the Superdeformed Minimum

Figure 5 presents the dynamic moments of inertia of all the superdeformed bands observed so far in the A = 190 region: bands have been identified in all Hg isotopes with A=189-194 [18,21-23,28,30-33], in  $^{193,194}\text{Tl}$  [34,35] and

ANL-P-19,851

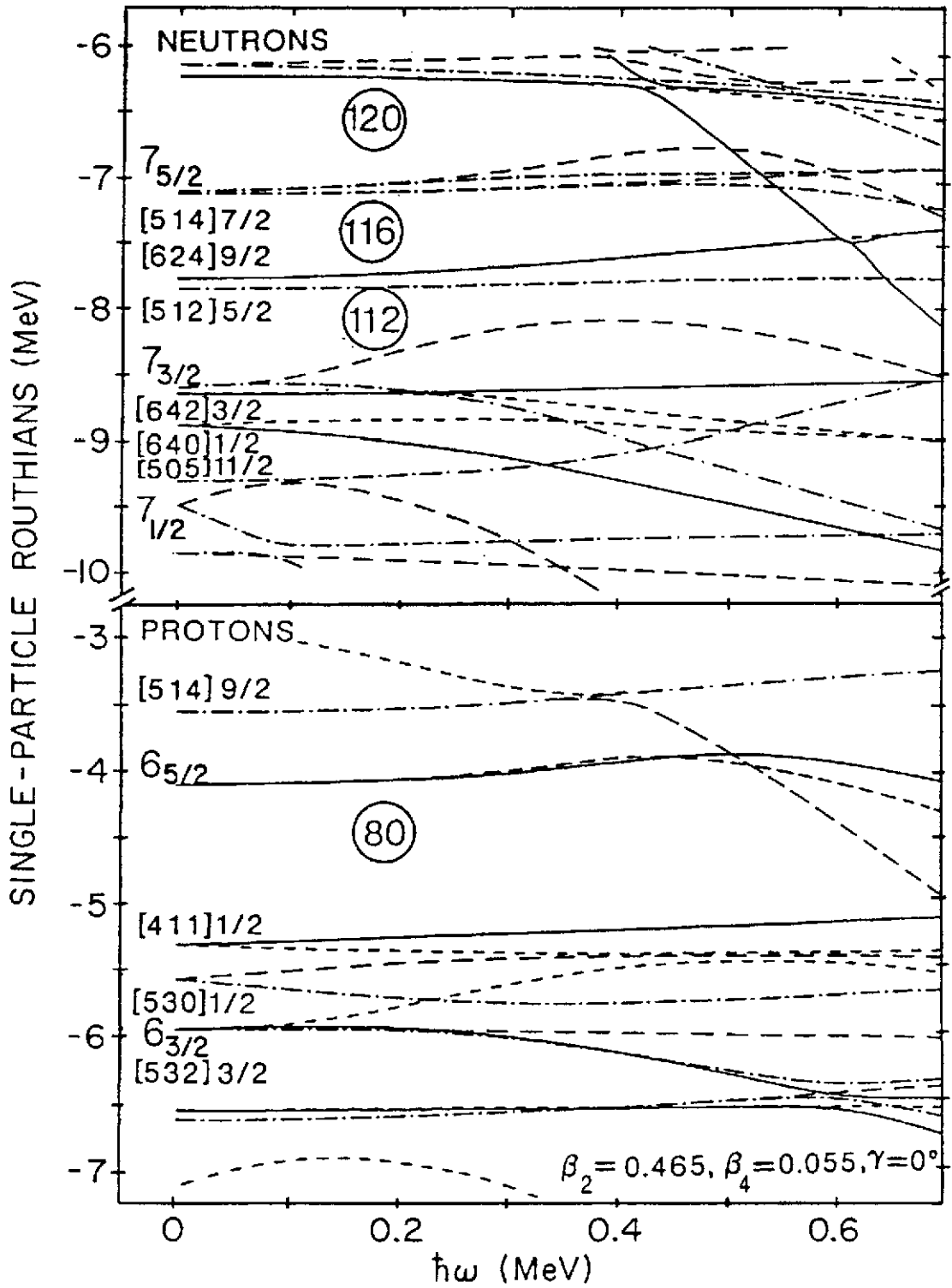


Figure 4: Representative neutron and proton Woods-Saxon routhians for  $^{192}\text{Hg}$ . The conventions adopted are given in ref. [28].

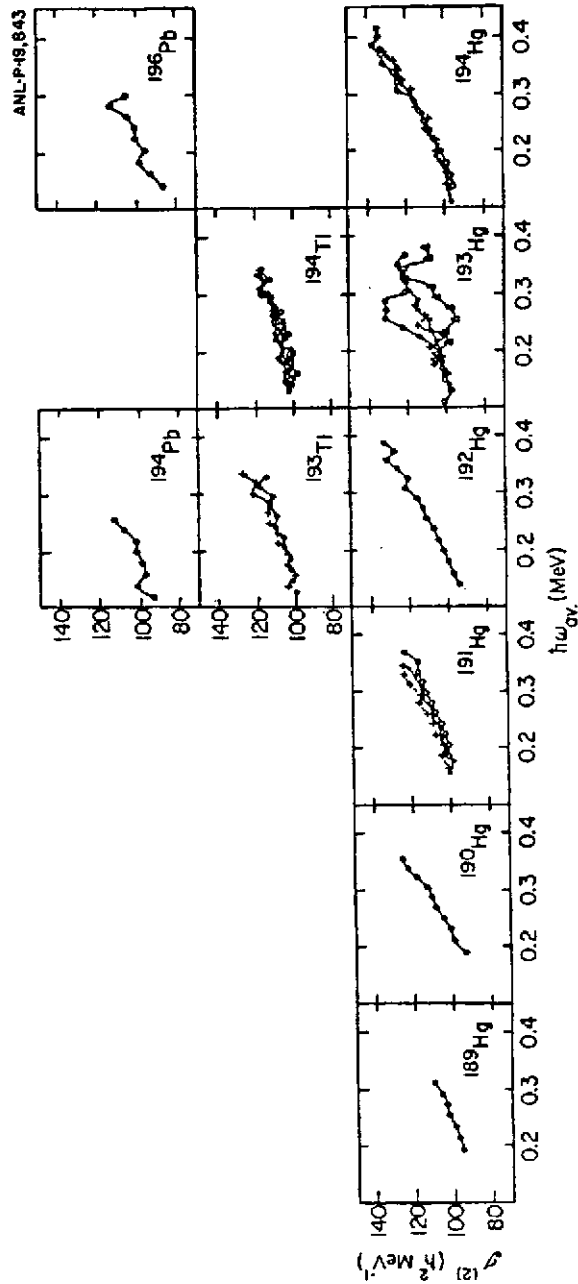


Figure 5: Dynamic moments of inertia  $J^{(2)}$  as a function of rotational frequency for all superdeformed bands in the  $A = 190$  region. The data are from refs. [18,21-23,28,30-37].

in  $^{194,196}\text{Pb}$  [36,37]. Furthermore, in many nuclei several superdeformed bands have been reported. Thus, just as in the  $A = 150$  region discussed below, it has been possible to perform detailed spectroscopy in the superdeformed well. Most of the data can be understood in the framework of the cranked shell model calculations with pairing introduced in section 2.3, and specific configurations have been proposed [21,29] for many of the bands of fig. 5. Neutron configurations involving the intruder orbital  $7_{3/2}$  and/or the  $[642]3/2$ ,  $[512]5/2$  and  $[624]9/2$  levels (fig. 4) have been proposed for the superdeformed bands in the Hg isotopes (the proton configuration being always  $\pi 6^4$ ). In  $^{194}\text{Hg}$ , for example, the superdeformed yrast band still contains the  $\pi 6^4 \nu 7^4$  configuration, but the lowest neutron excitations are predicted to involve promotion from the  $[512]5/2$  to the  $[624]9/2$  levels. This will lead to two pairs of strongly coupled bands with negative parity showing no signature splitting. Three superdeformed bands have been observed in this nucleus [21,33]. Their properties match the expectations: the two excited bands are interpreted as one signature partner pair, since the  $\gamma$ -ray energies in one of the bands are observed to lie mid-way between those of the other within 1 keV over the entire frequency range, and both bands are of similar intensity. Equally successful comparisons between the data and the calculations can be made for the bands of the other Hg isotopes. The only noticeable exception is the case of  $^{193}\text{Hg}$  where some of the observed features [32], such as the irregularities in the evolution of  $J^{(2)}$  with  $\hbar\omega$  for two of the bands (fig. 5), cannot be readily understood within the framework of the calculations. The suggestion has been made that octupole effects have to be taken into account. This is discussed in section 5.

The cranked shell model calculations with pairing appear to be equally successful in the case of proton excitations. Considering the proton routhians of fig. 4, the  $[411]1/2$ ,  $[530]1/2$  and  $[532]3/2$  levels are important for superdeformed nuclei with  $Z \leq 80$ , while the third  $i_{13/2}$  ( $6_{5/2}$  in fig. 4) intruder orbital and the  $[514]9/2$  state should characterize superdeformed bands in the Tl and Pb nuclei. At present, no superdeformed bands have been observed in the Au or Pt nuclei, and it is possible that this observation underlines the importance of the  $Z=80$  shell gap. On the other hand, superdeformed bands have been seen in several Pb and Tl nuclei [34-37]. In  $^{193}\text{Tl}$ , for example, the yrast superdeformed configuration is labelled as  $\pi 6^3$  in the calculations, and exhibits some signature splitting at  $\hbar\omega \geq 0.2$  MeV (fig. 4), leading to the expectation that two signature partner bands should be observed: this is the case experimentally [34]. A direct



comparison of the  $J(2)$  values for  $^{193}\text{Tl}$  with those observed in  $^{192}\text{Hg}$  and in the first  $^{191}\text{Hg}$  superdeformed band (which, as  $^{193}\text{Tl}$ , is thought to contain a single nucleon in a high- $N$  intruder orbital) is also particularly revealing (fig. 6). The occupation of the third  $i_{13/2}$  orbital in  $^{193}\text{Tl}$  results in an increase in the value of  $J(2)$  with respect to  $^{192}\text{Hg}$  at the lowest frequencies. In both  $^{191}\text{Hg}$  and  $^{193}\text{Tl}$ ,  $J(2)$  is essentially constant at the lowest frequencies before exhibiting the characteristic rise described above. This feature is also present in the calculations and is proposed to be a signature for the occupation of these high- $j$  intruder orbitals by a single nucleon [34]. In the  $^{191}\text{Hg}$  band, the alignment of the  $j_{15/2}$  neutron is blocked and the rise in  $J(2)$  is attributed to the alignment of the  $i_{13/2}$  protons while in  $^{193}\text{Tl}$  the opposite situation occurs. The fact that the rise in  $J(2)$  with  $\hbar\omega$  is very similar in both cases implies that neutron and proton alignments have contributions of comparable magnitude. Furthermore, the rise of  $J(2)$  in  $^{193}\text{Tl}$  starts at lower frequency than that in  $^{191}\text{Hg}$ . This suggests that the neutrons align at somewhat lower frequency than the protons, in agreement with the calculations.

From the discussion above, it can be concluded that a good description of the superdeformed bands within the framework of cranked shell model calculations with pairing can be achieved. Two points need, however, to be emphasized. First, the transition energies in some of the superdeformed bands are surprisingly close to those of bands in neighboring nuclei and several bands can be related to  $^{192}\text{Hg}$  [40]. This property is discussed in section 4. Second, the inclusion of pairing is crucial for reproducing the data and, in particular, the smooth increase of  $J(2)$  with  $\hbar\omega$ . In the proton system, pairing is reduced by the presence of the  $Z=80$  shell closure. As was shown in refs. [21] and [28], the calculations require that the neutron pairing be reduced as well if one wants to reproduce the similarities in the behavior of  $J(2)$  with  $\hbar\omega$  observed in all nuclei in this region. Reduced pairing is to be expected on the basis of general arguments [38]. Pairing is sensitive to the overlap between orbitals of interest. At the very large deformations being considered here, states originating from different shells approach the Fermi level, and these states will only be very weakly coupled through the pairing interaction. Moreover, the coupling between the all important unique-parity levels (i.e. the various components of the high- $N$  intruders) is also severely reduced because of their sizable energy splitting at large deformation. First attempts to provide a quantitative estimate of the reduction in pairing are discussed in refs. [38,39].

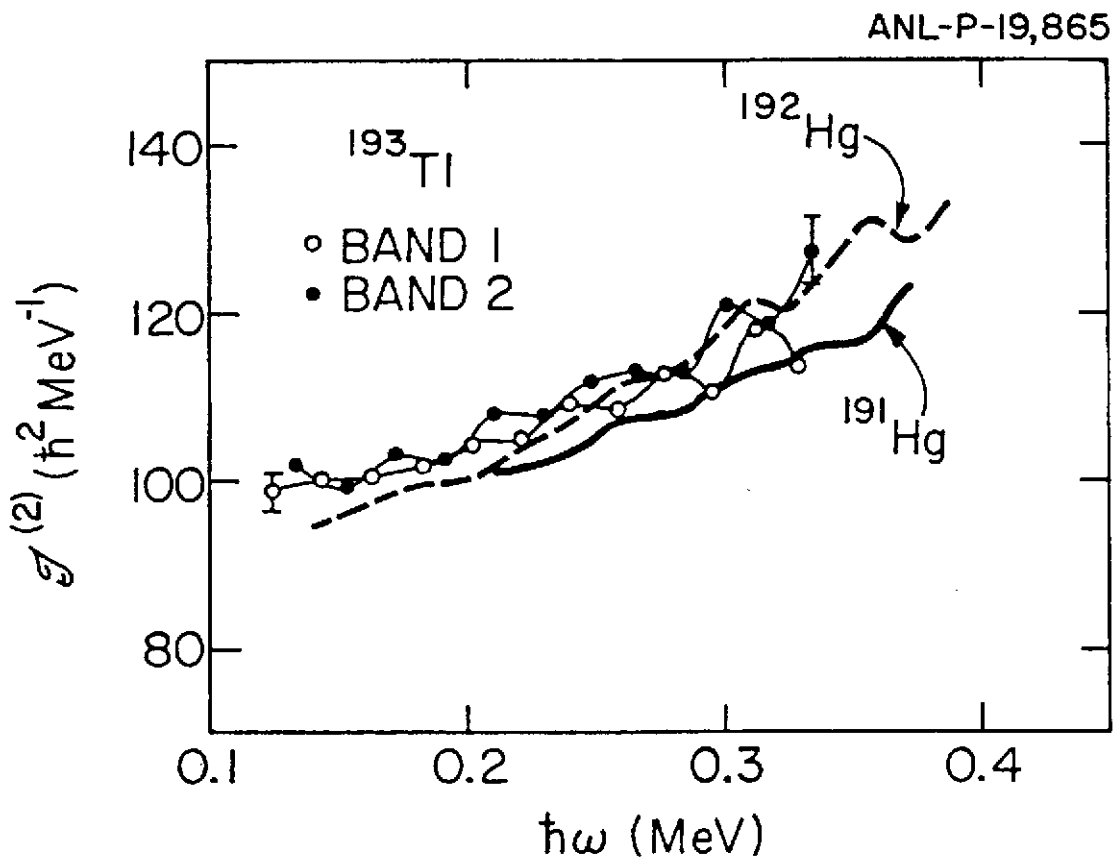


Figure 6: Comparison between the dynamic moments of inertia  $J^{(2)}$  measured in the superdeformed bands of  $^{193}\text{Tl}$ ,  $^{192}\text{Hg}$  and  $^{191}\text{Hg}$  (yrast superdeformed band). The data are from refs. [22,28,34].

### 3. SUPERDEFORMATION IN THE A = 150 REGION: "IDENTICAL" BANDS

#### 3.1 High-N Orbital Assignments in the Superdeformed Minimum

Since the review by Nolan and Twin [10], where the two first superdeformed bands of the A = 150 region were discussed ( $^{152}\text{Dy}$  and  $^{149}\text{Gd}$ ), the "island" of superdeformed nuclei in this mass region has expanded considerably. Superdeformed bands have now been identified in all Gd isotopes with A=146-150 [41-46], in  $^{150,151}\text{Tb}$  [44,45,47], as well as in  $^{151-153}\text{Dy}$  [8,48,49]. Furthermore, in many cases several superdeformed bands have been seen in the same nucleus: a summary of the available data on the  $J(2)$  moments of inertia is presented in fig. 7. Preliminary reports of similar band structures in  $^{145}\text{Gd}$  and  $^{142}\text{Eu}$  have also become available [50,51]. As in the A = 190 region, differences in the variations of  $J(2)$  with  $\hbar\omega$  from nucleus to nucleus have been attributed to the occupation of specific high-N intruder orbitals. In the A = 150 region,  $^{152}_{86}\text{Dy}_{86}$  can be described as the "doubly magic" nucleus: all available calculations indicate the presence of very large shell gaps at Z=66 and N=86 for a quadrupole deformation  $\beta_2 \sim 0.6$ . The occupation of specific high-N intruder orbitals can have dramatic effects: in the case of the Dy isotopes for example,  $J(2)$  is seen to rise smoothly over the entire frequency range in  $^{151}\text{Dy}$  (fig. 7), while a smooth decrease is seen in  $^{152}\text{Dy}$  and an essentially constant value of  $J(2)$  is observed for the yrast superdeformed band in  $^{153}\text{Dy}$  (it is assumed that the most intensely populated band is the "ground" band in the second well). For these isotopes, the proton contribution has been assigned as  $\pi 6^4$  (i.e.  $i_{13/2}$ ) and the observed differences have been attributed to changes in the occupation of the  $j_{15/2}$  neutron orbitals ( $\nu 7^1$ ,  $\nu 7^2$  and  $\nu 7^3$  for  $^{151-153}\text{Dy}$ , respectively), which result in contributions of varying magnitude to  $J(2)$  [20]. While the calculations of ref. [20] were performed without pairing and at a fixed deformation, more recent Woods-Saxon cranked shell model calculations [19,26] have taken into account small variations of the shape with spin as well as changes in deformation from one nucleus to another. These calculations also treat pairing correlations self-consistently (see also ref. [52] for the treatment of pairing). The best indication for the importance of the inclusion of pairing correlations and shape effects in this mass region comes from the data on the Gd isotopes. In the yrast superdeformed band of  $^{150}\text{Gd}$ , for example,  $J(2)$  is not only seen to decrease with  $\hbar\omega$ , but also exhibits a dramatic fall off at the lowest frequencies (fig. 7). In the calculations, this band is assigned a  $\pi 6^2 \nu 7^2$  configuration. This is in agreement with the assignment

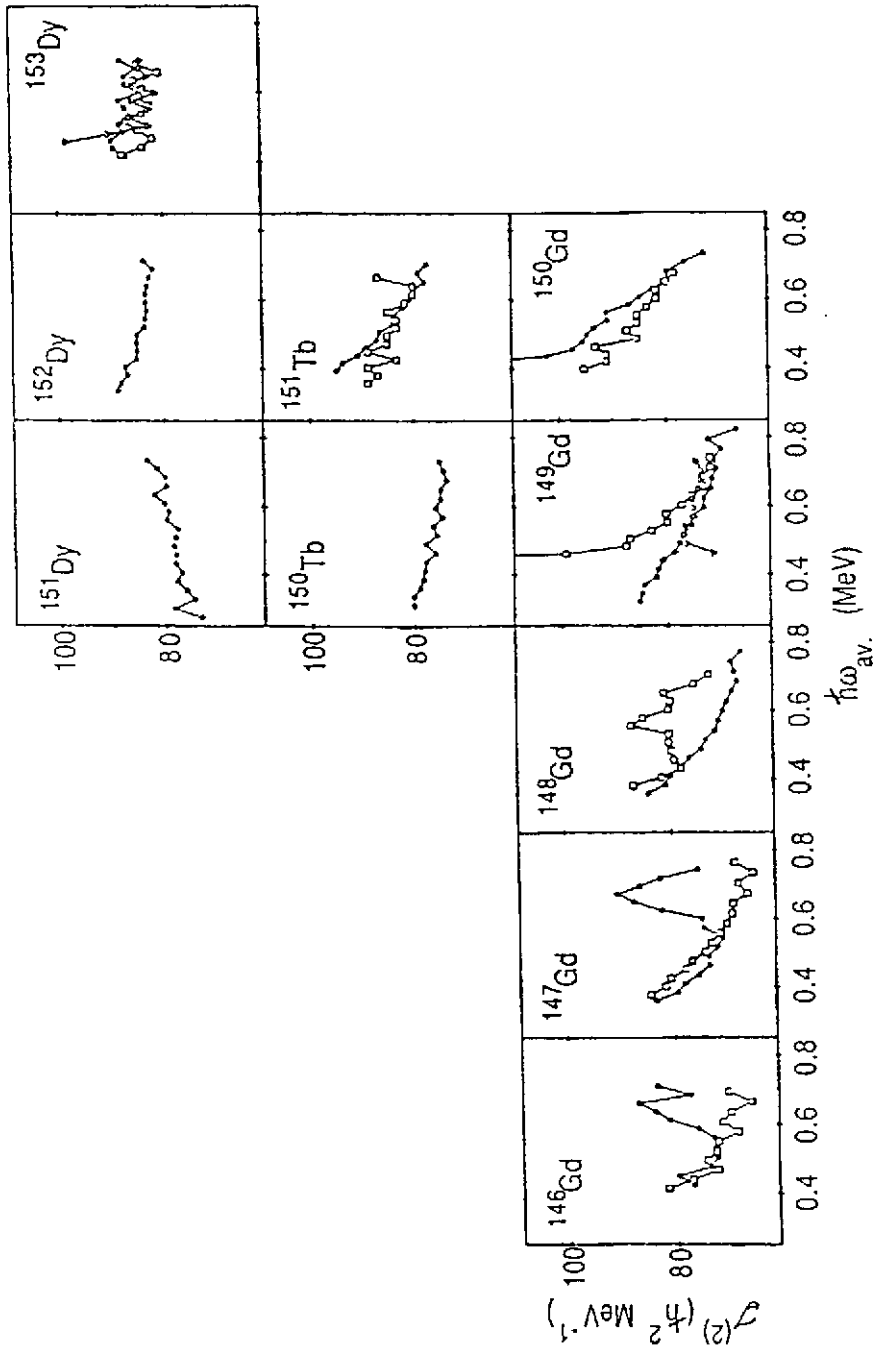


Figure 7: Dynamic moments of inertia  $J^{(2)}$  for all superdeformed bands in the  $A = 150$  region. The data are from refs. [8,10,41-49].

of ref. [20], but the alignment of a pair of  $j_{15/2}$  neutrons at  $\hbar\omega \sim 0.4$  MeV (i.e. a band crossing) has to be invoked to account for the sharp drop in  $J(2)$ . The observation that the deexcitation out of the superdeformed band in  $^{150}\text{Gd}$  is extremely abrupt, with essentially all the intensity being lost over a single transition, has been interpreted as additional evidence for this band crossing, which in turn requires the presence of the pairing correlations [45]. Marked irregularities in the behavior of  $J(2)$  can also be seen in the yrast superdeformed bands of  $^{146,147}\text{Gd}$  as well as in an excited band in  $^{148}\text{Gd}$  (fig. 7). At present, there is some argument regarding the exact orbitals involved in these crossings as well as concerning the role of pairing and/or octupole correlations [26,41,42,46]. The general conclusion, however, remains that in all yrast superdeformed bands near  $A = 150$  the variations of  $J(2)$  with  $\hbar\omega$  reflect the major role played by the few nucleons in high-N orbitals, and the adopted configurations are  $\pi 6^{2,3,4}$  for Gd, Tb, and Dy respectively;  $\nu 7^0$  or  $\nu 7^1$  for  $N=82-85$ ;  $\nu 7^2$  for  $N=86$  and  $\nu 7^3$  for  $N=87$ . The number of occupied intruder orbitals varies in some of the excited bands.

### 3.2 Superdeformed Bands with Identical Energies

The discovery of multiple superdeformed bands within a single nucleus has made it possible to investigate the microscopic structure of both the ground and excited states in the second well. However, a greater impetus for detailed studies of excited bands has been the unexpected discovery that several pairs of related bands have almost identical transition energies. The first reported [53] cases consisted of the pairs ( $^{151}\text{Tb}^*$ ,  $^{152}\text{Dy}$ ) and ( $^{150}\text{Gd}^*$ ,  $^{151}\text{Tb}$ ) - the \* denotes an excited superdeformed band - where transition energies in the pair were found to be equal to within 1-3 keV over a span of 14 transitions. Later, another similar pair ( $^{149}\text{Gd}^*$ ,  $^{150}\text{Tb}$ ) was found [44] (the notation  $^{149}\text{Gd}^{**}$  is used in ref. [44] as it is suggested that the second excited superdeformed band in  $^{149}\text{Gd}$  is involved). This is illustrated in fig. 8 where the difference between "identical" transitions energies  $\Delta E_\gamma$  is plotted versus the transition energy. It can be seen that, on average, the deviation is less than 1 keV for the first pair and only slightly larger for the other two. This implies that transition energies are equal to better than 3 parts in 1000. This is a rather surprising equality and is quite unprecedented in nuclear physics!  $\gamma$ -ray energies should scale with the moment of inertia  $J$ , which is proportional to  $A^{5/3}$  ( $J \sim MR^2$ ), so that adjacent mass nuclei would have energies different by  $\sim 14$  keV. Furthermore, the spins of corresponding transitions in each pair necessarily differ by  $1/2\hbar$ , leading

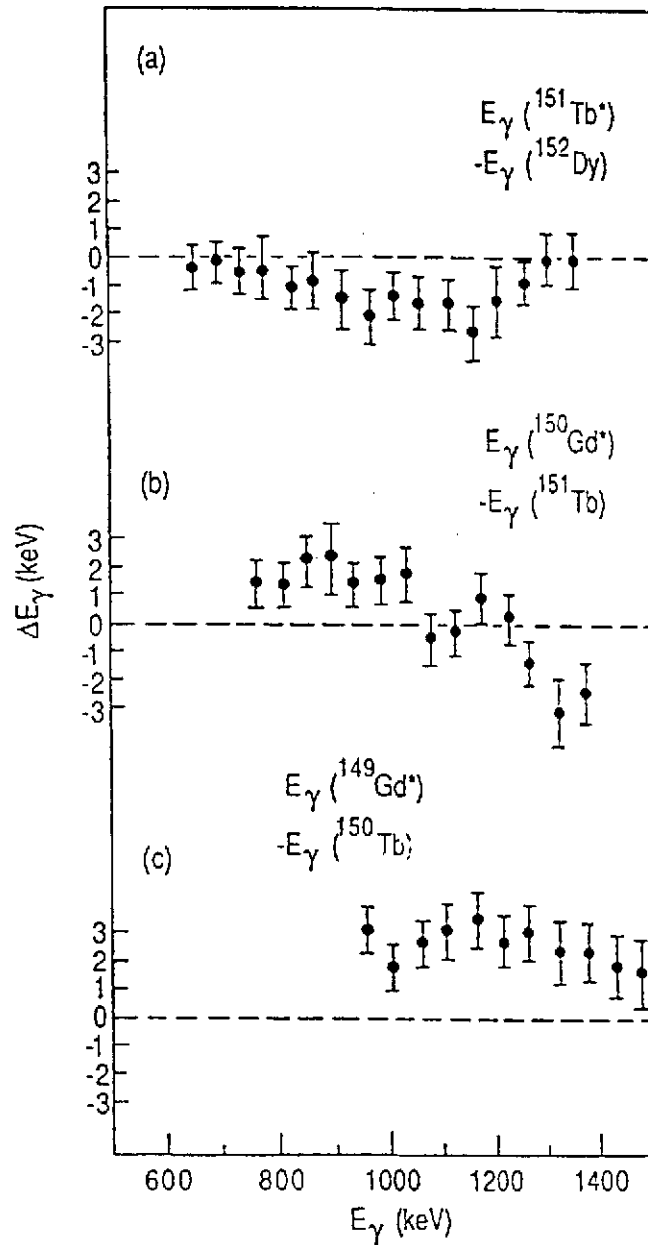


Figure 8: Differences in the  $\gamma$ -ray energies  $\Delta E_\gamma$  between the superdeformed bands in (a) ( $^{151}\text{Tb}^*$ ,  $^{152}\text{Dy}$ ), (b) ( $^{150}\text{Gd}^*$ ,  $^{151}\text{Tb}$ ) and (c) ( $^{149}\text{Gd}^*$ ,  $^{150}\text{Tb}$ ). The data are taken from refs. [44,53].

to differences in  $E_\gamma$  of  $\sim 13$  keV. For  $(A-1)^*$ ,  $A$  pairs, with  $A$  even, these differences would reinforce each other.

A word of caution is in order since it is assumed that each pair of transitions being compared has the appropriate spins  $(I+1/2, I)$ , but the spins of the superdeformed bands have not been measured. Since the spacing between consecutive transitions in each band is  $\sim 50$  keV, the maximum difference in energy in a pair of bands is  $\sim 25$  keV if no spin correlation is involved. However, with three cases and not just an isolated one, it is unlikely that these degeneracies are accidental. Furthermore, in all three cases the excited  $(A-1)^*$  superdeformed band is proposed to be characterized by a hole in the same specific orbital (see below).

A related case of identical transition energies occurs in  $^{153}\text{Dy}$  - the first case where excited superdeformed bands were reported [49]. Here, two excited bands have been interpreted as signature partners and the averages of the transition energies in the partners reproduce the  $\gamma$ -ray energies in  $^{152}\text{Dy}$  within 1-3 keV. Finally, the two superdeformed bands of  $^{147}\text{Gd}$  have been related to the yrast superdeformed bands of  $^{146}\text{Gd}$  and  $^{148}\text{Gd}$  respectively, although the average  $\Delta E_\gamma$  are somewhat larger in this case ( $\sim 5$  keV) [42]. In the case of  $^{147}\text{Gd}$ , another relation applies as well: one of the bands has  $\gamma$ -ray energies following closely (1-4 keV) the average of two successive transition energies in  $^{148}\text{Gd}$ , while the other band shows the same property when compared with the superdeformed band of  $^{146}\text{Gd}$ .

### 3.3 Strong Coupling and Identical Bands

The first attempt at an explanation of this surprising phenomenon was presented in refs. [38,54]. The interpretation is done within the framework of the strong coupling limit of the particle-rotor model in which one or more particles are coupled to a rotating deformed core and follow the rotation adiabatically. We note that for rotors the  $\gamma$ -ray energy for a  $I \rightarrow I-2$  transition is given by:

$$E_\gamma = \frac{\hbar^2}{2J} [4I-2] \quad \text{Eq. (1)}$$

If the Coriolis force causes alignment  $i$  of the particle along the rotation vector  $\underline{R}$ , giving  $R = I-i$ ,

$$E_{\gamma} = \frac{\hbar^2}{2J} [4(I-1) - 2] \quad \text{Eq. (2)}$$

Eq. (2) shows that odd and even nuclei can have identical transition energies if  $i = 1/2$ , when  $J^{\text{odd}} = J^{\text{even}}$ . In the strong coupling limit no alignment is present, i.e.  $i=0$ , and the transition energies in an odd nucleus, relative to those in an even-even core, obey simple relations [11] which are shown in fig. 9. Here the moments of inertia for all cases are assumed to be identical. When  $K \neq 1/2$ , it is seen (fig. 9 (a-c)) that

$$1/2 [E_{\gamma}(R+1/2) + E_{\gamma}(R-1/2)]_{\text{odd}} = E_{\gamma}(R)_{\text{even}}$$

This strong coupling relation provides a straightforward explanation for the ( $^{153}\text{Dy}^*$ ,  $^{152}\text{Dy}$ ) pair. The two excited bands in  $^{153}\text{Dy}$  have been interpreted [26,49] as a  $^{152}\text{Dy} \nu [514] 9/2$  structure with no signature splitting - the relevant single-particle levels for protons and neutrons at large deformation are presented in fig. 3 of ref. [55].

For a  $K = 1/2$  band, the transition energies in the odd-nucleus are affected by the decoupling parameter,  $a$ , and obey the relation:

$$E_{\gamma} = \frac{\hbar^2}{2J} [4I-2 + 2(-1)^{I+1/2} a \delta_{K,1/2}]$$

The transition energies for  $a = \pm 1$  are indicated in fig. 9(d-e). Transitions from both signatures form degenerate doublets, with the  $a = 1$  case giving energies identical to those of the core, while the  $a = -1$  case has energies mid-way between those of adjacent transitions in the core. The alignment in a  $K = 1/2$  band is given by  $i = (-)^{I-1/2} a/2$ .

The three pairs ( $A-1^*$ ,  $A$ ) where identical energies have been observed can be interpreted as a case where  $a = 1$ . In each case, the  $(A-1)^*$  configuration is  $A \pi ([301] 1/2)^{-1}$ . If the decoupling parameter  $a$  is calculated from the Nilsson wave function of the  $[301] 1/2$  orbital, a value of 0.85 is obtained [54] very close to, but not exactly 1. On the other hand, for a  $[Nn_3 \Lambda] \Omega$  orbital, the decoupling parameter can be calculated from the asymptotic quantum number, by

$$a = (-)^N \delta_{\Lambda,0} .$$



ANL-P-20,207

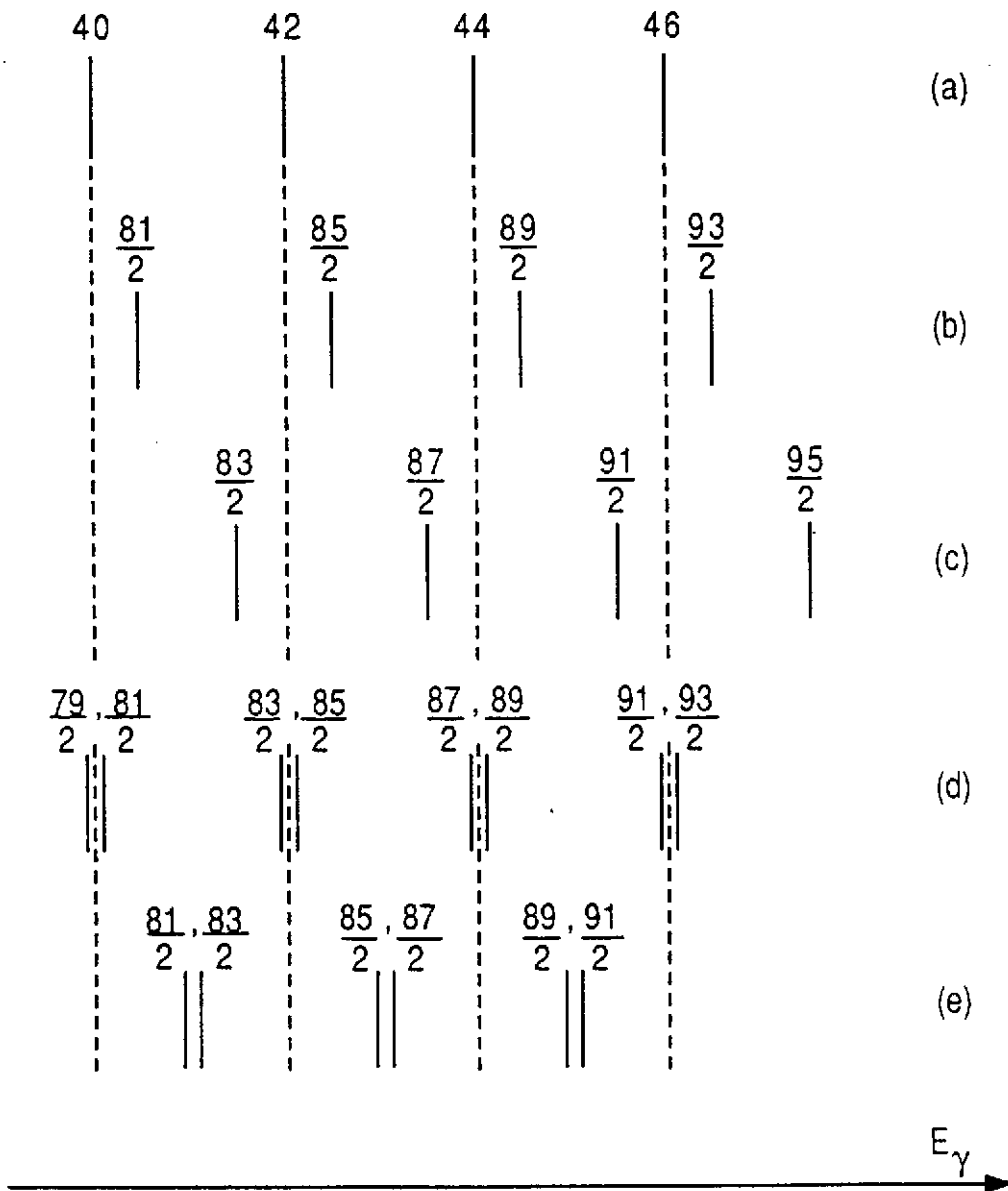


Figure 9:  $\gamma$ -ray energies for transitions in a perfect rotor, assuming identical moments of inertia in all cases: (a) even core; (b) and (c) odd-even nucleus in the strong coupling limit; (d) and (e) odd nucleus with  $K = 1/2$ ,  $a = +1$  and  $a = -1$ , respectively. Note that (d) and (e) also apply for an odd nucleus with alignment  $\pm 1/2$ , i.e.  $I = R \pm 1/2$ .

which would result in  $a = 0$  for the  $[301]1/2$  orbital. However, if one employed a different coupling scheme in terms of pseudo-spin (see below), the appropriate quantum numbers are  $[200]1/2$ , and

$$a = (-)^{\tilde{N}} \delta_{\tilde{\lambda},0} = 1,$$

providing a natural explanation for the identical energies of the three pairs. A case where  $a = -1$  has not been seen so far, although it is predicted [38,54] within the pseudo-spin scheme to apply an excited superdeformed band in  $^{151}\text{Dy}$ , but has not yet been observed.

It must be stressed again that the explanation of identical energies presented here follows only if the moments of inertia for odd and even nuclei are identical.  $A^{5/3}$  scaling would give differences of  $\sim 1\%$ , as mentioned above. Thus, it still is a puzzle why the moments of inertia  $J$  for adjacent nuclei appear to be constant to within  $\sim 0.2\%$ .

### 3.4 Pseudo-spin in Rotating Deformed Nuclei

A simplified analysis of nucleonic motion and of the effect of deformation can be made [56-59] within the framework of the pseudo-spin scheme. In heavy nuclei, this formalism is based on the fact that a major shell, labelled by the total quantum number  $N$ , consists of the members of an oscillator shell modified by the removal of the state with largest  $j (= N+1/2)$  and the addition of an intruder orbital with opposite parity and  $j = N+3/2$ . The remaining normal parity orbitals form close-lying doublets with quantum numbers  $\ell_1, j_1 = \ell_1+1/2$  and  $\ell_2 = \ell_1+2, j_2 = \ell_2-1/2 = j_1+1$ . Examples are the  $(d_{5/2}, g_{7/2})$  and  $(f_{7/2}, h_{9/2})$  doublets. The doublets can be relabelled in terms of pseudo quantum numbers  $\tilde{\ell} = \ell_1+1, \tilde{N} = N-1$ . Thus, the doublets  $(d_{5/2}, g_{7/2})$  and  $(f_{7/2}, h_{9/2})$  become  $\tilde{f}$  and  $\tilde{g}$ , respectively. A deformed potential preserves this degeneracy: in a Nilsson diagram close-lying nearly parallel orbits are observed as function of deformation (see, e.g. fig. 1 in ref. [59]). The pair of orbits

$$[Nn_3\Lambda, \Omega = \Lambda+1/2] \text{ and } [Nn_3\Lambda+2, \Omega = \Lambda+3/2]$$

can be relabelled with pseudo quantum numbers

$$[\tilde{N} = N-1, n_3, \tilde{\kappa} = \Lambda+1, \Omega = \tilde{\kappa} \pm 1/2].$$

This doublet can be viewed as pseudo-spin-orbit partners. The important feature is that the  $\mathcal{L} \cdot \tilde{\mathcal{S}}$  interaction is substantially smaller than the normal  $\mathcal{L} \cdot \mathcal{S}$  coupling. Since the  $\mathcal{L} \cdot \tilde{\mathcal{S}}$  coupling is weak, the Coriolis force readily causes  $\tilde{\mathcal{S}}$  to align along the rotation vector, i.e.  $\tilde{\mathcal{S}}_1 = \pm 1/2$ . One sees, therefore, that pseudo-spin can lead to  $i = 1/2$  in equation (2) and account for identical transition energies in odd and even nuclei by offsetting the intrinsic spin difference of  $1/2\hbar$  [60].

The case for  $K = 1/2$  bands has been discussed above, where it was pointed out that the pseudo-spin formalism naturally provides the correct decoupling parameter for explaining bands with identical transition energies. For orbits with  $K \neq 1/2$ , the alignment in an odd nucleus relative to an even core will, in general, have non-zero contributions from alignment  $\mathcal{L}_1$  of the pseudo orbital angular momentum [59]. (Only if  $\mathcal{L}_1 = 0$  will one obtain the simple spectrum given in fig. 9(d-e). Thus, it will not be easy to find experimental evidence for pseudo-spin alignment by comparing data in odd and even nuclei for orbits with  $K \neq 1/2$ . However, Hamamoto [61] has suggested that evidence for pseudo-spin alignment may be found in an alignment difference of  $\hbar$  for pairs of orbits which constitute doublets with identical  $\mathcal{L}_1$  and  $\tilde{\mathcal{S}}_1 = \pm 1/2$  (see also Figs. 3 and 4 in ref. [59]). Examples of such doublets have so far not been identified. Detection of those doublets will probably require detection of more (weak) excited superdeformed bands, as well as firm spin assignments.

### 3.5 Identical Moments of Inertia

The identical bands discussed above require moments of inertia  $J$  in different nuclei to be equal to a remarkable degree. Since  $J$  depends on several factors (mass, deformation, polarization effects, alignment and pairing) the equality in  $J$  is very striking and leads one to wonder about the possibility of a fundamental explanation. The standard models are unable to reproduce transition energies with an accuracy of  $\sim 1$  keV. We note that only a few identical bands are observed among the many superdeformed bands in this region and that three of these pairs of bands involve a common orbital. This suggests that the phenomenon is associated with only a few specific orbitals. Indeed, it is recognized that occupation of different high- $N$  intruder orbits will not result in identical bands because the orbital energies tend to have steep slopes as a function of both deformation and rotational frequency, i.e. strong polarization and alignment effects will result. Ragnarsson [62] has

used a simple harmonic oscillator model to show that for particles or holes in certain orbitals there can be cancellation among the different terms contributing to changes in J. He has been able to reproduce the "identical" energies observed in ( $^{152}\text{Dy}$ ,  $^{153}\text{Dy}^*$ ), where the orbital occupied in  $^{153}\text{Dy}^*$  is either  $\nu[402]5/2$  or  $\nu[514]9/2$ . These orbitals slope upward with increasing  $\beta_2$  - so-called oblate orbitals - so that a particle here would tend to decrease the deformation of the (A+1) nucleus, compensating the increase in J due to the larger mass. Agreement for other cases calculated by Ragnarsson, including that involving the  $\pi[301]1/2$  hole (responsible for the three pairs of bands with identical energies) is not as satisfactory, suggesting that other effects, such as changes in pairing, should be included. A further requirement for the orbital is that the alignment be small, a criterion satisfied by the "oblate" orbitals.

#### 4. IDENTICAL BANDS IN THE A = 190 REGION

##### 4.1 Identical Transition Energies and Relation to $^{192}\text{Hg}$

There are even more examples of identical superdeformed bands in the A = 190 region [63,64]. However, two features distinguish the bands in this region from those near A = 150: (a) many of the bands occur in pairs separated by two mass units and (b) a large number of bands can be related to the superdeformed band in  $^{192}\text{Hg}$ , which appears to serve as a doubly-magic core. These features are illustrated in fig. 10a, which shows the degree of similarity between transition energies in the pairs [ $^{191}\text{Hg}(2)$ ,  $^{193}\text{Hg}(2)$ ], [ $^{191}\text{Hg}(3)$ ,  $^{193}\text{Hg}(3)$ ], [ $^{192}\text{Hg}$ ,  $^{194}\text{Hg}(3)$ ] and [ $^{192}\text{Hg}$ ,  $^{194}\text{Pb}$ ]. [The numbers in brackets () correspond to the labels given to different bands in the original publications and numbers larger than 1 designate excited bands]. Figure 10b relates transition energies of  $^{192}\text{Hg}$  to those of bands in adjacent nuclei  $^{191}\text{Hg}$ ,  $^{193}\text{Hg}$  and  $^{193}\text{Tl}$  through the relationship:

$$\Delta E_{\gamma}^* = 1/2 [E_{\gamma}^f(R \pm 1/2) + E_{\gamma}^u(R \mp 1/2)] - E_{\gamma}^{\text{core}}(R),$$

where R is the core angular momentum, and u and f designate transitions from favored and unfavored states in signature partner bands of the odd-even nucleus. As discussed in ref. [64] and in section 2 above, the proposed configurations for these superdeformed bands are characterized by  $K \neq 1/2$ . As a result both features in fig. 10 can be understood in a straightforward way in the strong coupling scheme, which gives  $\Delta E_{\gamma}^* = 0$ . However, there is again the requirement of equal moments of inertia in all nuclei.

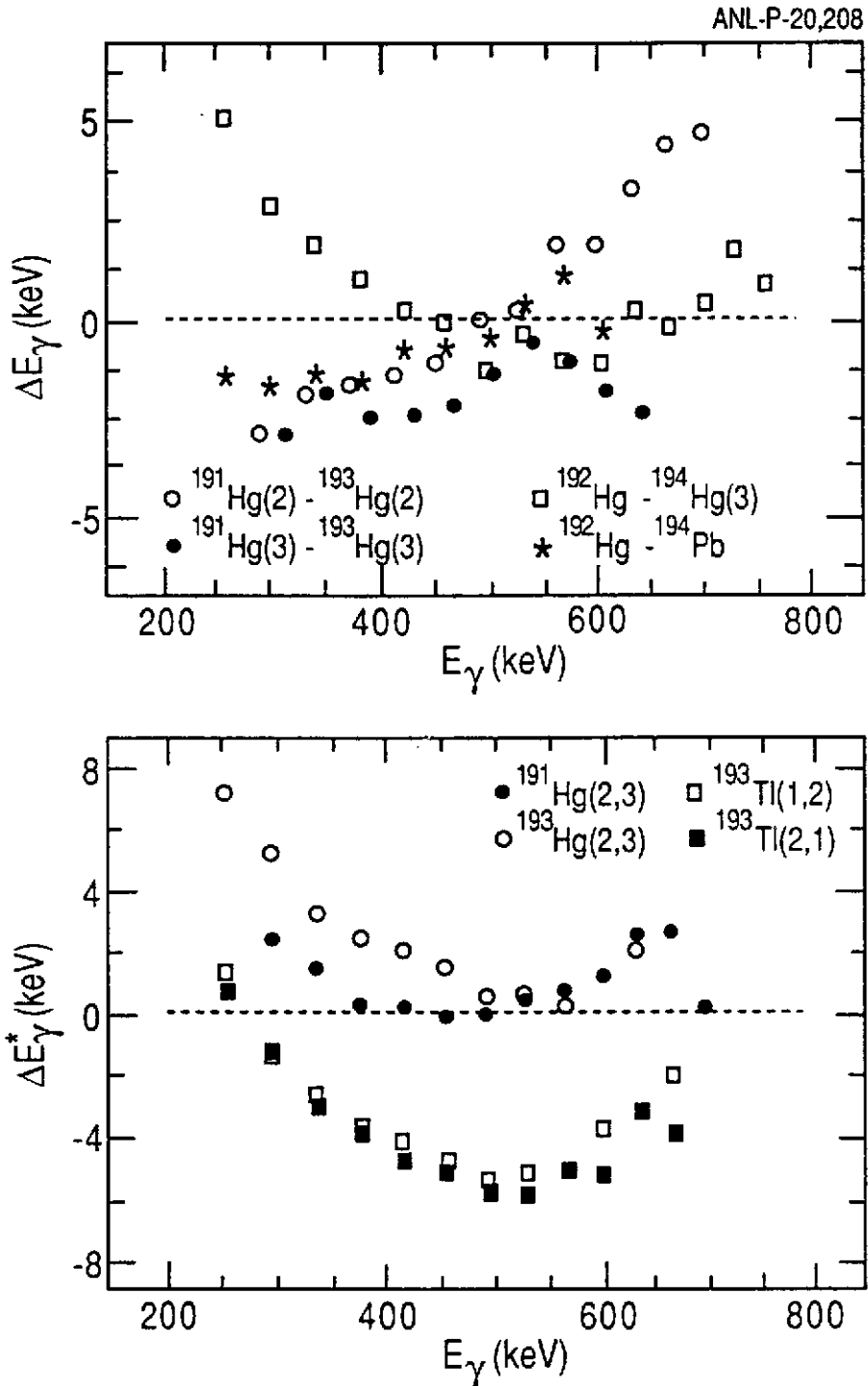


Figure 10: (a): Difference in transition energy  $\Delta E_\gamma$ , between selected superdeformed bands in the  $A = 190$  region. (b): Energy difference  $\Delta E_\gamma^*$  (see text) referenced to  $^{192}\text{Hg}$  for strongly coupled bands in  $^{191,193}\text{Hg}$  and  $^{193}\text{Tl}$ . For both (a) and (b), the data are from ref. [21-23,28,34] (from ref. [64]).

Another way of relating the energies of different bands to those of a reference,  $^{192}\text{Hg}$ , has been proposed by Stephens et al [63], using the quantity

$$\Delta i = 2 \frac{\Delta E_{\gamma}}{\Delta E_{\gamma}^{\text{ref}}},$$

where  $\Delta E_{\gamma} = E_{\gamma} - E_{\gamma}^{\text{ref}}$  is obtained by subtracting the transition energy  $E_{\gamma}$  in a band of interest from the closest transition energy in  $^{192}\text{Hg}$  ( $E_{\gamma}^{\text{ref}}$ ), and  $\Delta E_{\gamma}^{\text{ref}}$  is calculated as the energy difference between the two closest transitions in the reference.  $\Delta i$  has been called incremental alignment in ref. [63], but is not necessarily related to any physical alignment. In the strong coupling limit,  $\Delta i = \pm 1/2$  for an odd nucleus referred to an even core, as can readily be seen in fig. 9a-c. For even nuclei, bands with the same or different signatures have  $\Delta i = 0$  or  $\pm 1$ , respectively. Plots of  $\Delta i$  are shown in fig. 11, which illustrates that the superdeformed bands of the  $A = 190$  region can be classified in two families. When additional particles (holes) with respect to  $^{192}\text{Hg}$  occupy lower  $K$  members of the high- $N$  intruder orbitals, values of  $\Delta i$  scatter significantly (fig. 11a). This is not surprising since particles in these intruder orbitals tend to both increase deformation and align with rotation, thus making the strong coupling scheme inappropriate. In contrast, when the orbitals involved do not show much variation with  $\hbar\omega$  (see fig. 4), i.e. when there is little alignment,  $\Delta i$  values fall close to the limits of  $0, \pm 1/2, \pm 1$ , which are expected in the strong coupling limit (fig. 11b).

Stephens et al [40,63] suggested that many of the cases which exhibit  $\Delta i = 0, \pm 1/2, \text{ or } \pm 1$  also have integer alignment differences with respect to the core, which they refer to as quantized alignment. While the strong coupling limit corresponds to a zero alignment difference, ref. [40] instead suggests alignments (with respect to  $^{192}\text{Hg}$ ) of  $1/2\hbar$  in, for example,  $^{191}\text{Hg}(2,3)$  and  $^{194}\text{Hg}(2,3)$ , which are then attributed to pseudo-spin alignment. An alignment of  $1/2\hbar$  in  $^{191}\text{Hg}$ , instead of the expected  $1/2\hbar$ , is not easy to understand. However, a word of caution is in order. Whereas extraction of  $\Delta i$  does not require knowledge of spin, determination of alignment does. So far the spins of superdeformed band members have not been assigned using the conventional, tested techniques of  $\gamma$ -ray spectroscopy. Methods to infer the spin have been suggested [23,65,66], and are discussed below. At present, it is not established whether these methods give the exact spin or have uncertainties of at least  $1/2\hbar$  [67,68]. Thus, until spins can be assigned firmly, one cannot

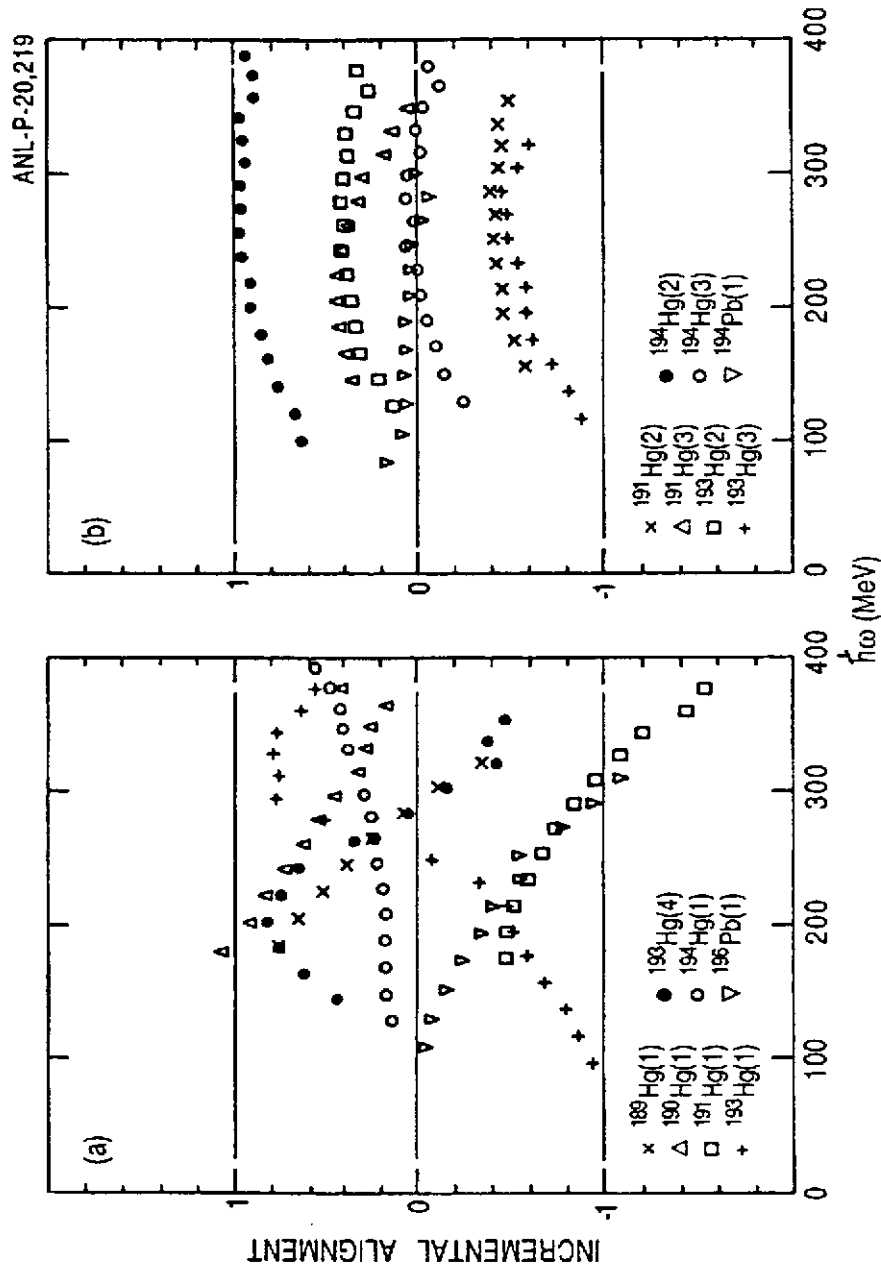


Figure 11: Incremental alignment  $\Delta_i$  as a function of rotational frequency for superdeformed bands in  $^{189-194}\text{Hg}$  [21-23,28-33] and  $^{194,196}\text{Pb}$  [36,37], with  $^{192}\text{Hg}$  as a reference. As discussed in the text, the data are grouped [(a) and (b)] in order to illustrate the existence of two families; in (b)  $\Delta_i$  clusters around integer and half-integer values. The data on superdeformed bands in the Tl isotopes have been omitted for clarity; these are discussed in ref. [35].

be certain whether the alignments have the putative value of  $h\bar{n}$  [40] or simply have the value  $0\bar{n}$  expected from strong coupling.

#### 4.2 Spin Assignments

Several related procedures for assigning spins to superdeformed states in the  $A = 190$  region have been proposed recently [23,65,66]. These procedures all start from a Harris expansion [69] of the moment of inertia

$$J^{(2)} = J_0 + J_1 \omega_x^2 + \dots$$

and the relation

$$\frac{dI_x}{d\omega_x} = J^{(2)} \quad \text{Eq. (3)}$$

where  $I_x$  is the projection of spin along the rotation vector, and  $\omega_x = \Delta E_\gamma / \Delta I_x$  is the corresponding rotational frequency. Integrating Eq. 3 gives

$$I_x = J_0 \omega + \frac{J_1}{3} \omega^3 + i_0 \quad \text{Eq. (4)}$$

where  $i_0$  is the constant of integration. The parameters  $J_0$  and  $J_1$ , obtained by fitting  $J^{(2)}$  as a function of  $\omega_x$ , are used to determine  $I_x$  with Eq. 4. The spin  $I$  is then derived from the relation

$$I_x = \sqrt{I(I+1) - K^2},$$

where  $K$  is the projection of angular momentum along the symmetry axis. It has been shown [70] that reasonable choices of  $K$  do not sensitively affect the derived spin. Two assumptions need to be valid for the derived spin to be correct. First, it must be assumed that the fit of  $J^{(2)}$  vs  $\omega$  can be correctly extrapolated to zero frequency. (A minimal requirement for this assumption to be correct is that  $J^{(2)}$  varies smoothly and gradually in the low frequency domain.) Second, the constant of integration  $i_0$ , which corresponds to the alignment at zero frequency, must be known. It has been assumed in ref. [65,66] that  $i_0 = 0$ , since this results in calculated values of  $I$  which are within  $0.1\bar{n}$  of the integer or half-integer value appropriate for an even or odd-nucleus. However, it has not been unambiguously demonstrated that both assumptions are valid. In fact, pairing may well change as  $h\bar{n}$  approaches



zero, leading to uncertainty in the extrapolation of  $J^{(2)}$ , and resulting in an "effective" alignment (i.e. an effect which mimics alignment). The extent to which these effects are subsumed into the parameters  $J_0$  and  $J_1$  is not clear. Other attempts at spin determination [67,68] have concluded that spin uncertainties of at least  $1\hbar$  exist. Thus, there is a clear need to determine the actual spins of superdeformed band members experimentally in order to resolve these uncertainties.

#### 4.3 Strong Coupling Limit and Identical Moments of Inertia

In the discussion above it was suggested that the identical bands can be understood in terms of the strong coupling limit of the particle-rotor model, with the additional requirement that the moments of inertia be identical. The following questions must then be raised: why does this strong coupling limit work so well and why are the moments of inertia so close? These are interesting questions for theory to address quantitatively, but qualitative comments can be made at this point. As discussed in section 3.3, the strong coupling limit applies when the alignment is zero. (Assuming equal  $J$  values for the bands, the identical energies suggest  $i \lesssim 0.1\hbar$ .) At the large deformations discussed here, alignment effects are expected to be small: the large value of the moments of inertia and the increased separation between Nilsson levels from a given shell both reduce the Coriolis coupling which is responsible for the alignment. In addition, the reduced pairing discussed in section 2 also leads to less alignment. These qualitative arguments, however, do not guarantee that  $i \lesssim 0.1\hbar$  - as implied by the equal transition energies - and, indeed, cranked shell model calculations [70] suggest that alignments of the order of  $\sim 0.5 - 1\hbar$  are obtained.

It has been emphasized above that identical transition energies require equal moments of inertia in the bands. This feature is unexpected since the masses involved differ by as much as two units. In the  $A = 190$  region, scaling by  $J \sim A^{5/3}$  results in a  $\sim 5$  keV difference per mass unit. Furthermore, bands are compared where the number of quasiparticles associated with the superdeformed configurations differ by one or two. These bands can be expected to have different moments of inertia  $J$  because blocking may be present which reduces pairing. A major question remains whether the equality of the moments of inertia reflects some hitherto undiscovered symmetry.

Another interesting observation can be added. When  $J^{(2)}$  values for all the known superdeformed bands in the  $A = 190$  region are compared (see fig. 5), they are all found to cluster within  $\lesssim 10\%$  (with the exception of 4 cases). This is indeed a surprise since bands which differ by 0, 1 or 2 quasiparticle excitations are included. For rotational bands at normal deformation,  $J^{(2)}$  values increase by  $\sim 15\%$  per quasiparticle because of reduced pairing due to blocking. One wonders if the reduced pairing in superdeformed bands, which is partially responsible for smaller alignment, is also responsible for the noted clustering in  $J^{(2)}$  values.

## 5. OTHER IMPORTANT EFFECTS AT LARGE DEFORMATION

Some pairs of orbitals such as the  $i_{13/2}-f_{7/2}$  and the  $j_{15/2}-g_{9/2}$  orbitals which are responsible for strong octupole correlations in light actinide nuclei [71] also appear close to the Fermi level in superdeformed configurations around  $^{152}\text{Dy}$  and  $^{192}\text{Hg}$ . Several recent calculations [32,72-75] have indicated that for many superdeformed nuclei the minima in the total energy surfaces exhibit considerable octupole softness which is expected to persist even at the highest spins. As a result, collective octupole vibrational excitations can be mixed with low-lying one- and two-quasiparticle states and the excitation pattern near the superdeformed yrast line can be different from that expected for axial symmetry. The calculations suggest that the first excited state in the doubly-magic superdeformed nuclei  $^{152}\text{Dy}$  and  $^{192}\text{Hg}$  should be of collective octupole character and an analogy can be drawn with the well-known collective  $3^-$  state in the doubly-magic spherical nucleus  $^{208}\text{Pb}$ . Octupole correlations are also expected to reduce single-particle alignments, increase band interactions, and modify the deexcitation pattern of the superdeformed states because of enhanced  $B(E1)$  rates [71]. Most of the anticipated effects still remain to be observed experimentally. However, first evidence for strong mixing of quasiparticle excitations with octupole vibrations may have been seen in  $^{193}\text{Hg}$  [32]. In this nucleus, two of the four superdeformed bands are characterized by moments of inertia  $J^{(2)}$  strikingly different from those of all other superdeformed bands in this region (see fig. 5), i.e. one shows a strong upbend at the frequency where the other shows a strong downbend. Furthermore, there is indirect experimental evidence for enhanced  $E1$  transitions linking one of the irregular bands with the yrast superdeformed band. These observations, together with the reduced alignments observed and the strong interaction between the crossing bands, have been interpreted as evidence for strong octupole correlations [32]. In

the mass  $A = 150$  region, one of the proposed explanations for the behavior of one of the superdeformed bands in  $^{147}\text{Gd}$  invokes collective octupole excitations [42,76] as well, but other interpretations are also possible [46].

It has been suggested recently [77] that the residual n-p interaction may also play a role in superdeformed nuclei. Such an interaction is expected to be strong in situations where protons and neutrons occupy rotationally aligned high-N intruder orbitals with large spatial overlap, such as the  $\pi_{13/2}$  and  $\nu_{15/2}$  orbitals involved in the superdeformed bands of the  $A = 150$  and 190 regions. Such an interaction is expected [77] to lower the energy of superdeformed bands based on these specific intruder configurations with respect to other excitations in the superdeformed well. Firm experimental evidence for the importance of this interaction is currently lacking even though it has been invoked to explain the strong feeding of a superdeformed band in  $^{142}\text{Eu}$  [51] (interaction between  $N=6$  odd proton and odd neutron) and the smooth rise of  $J(2)$  with  $\hbar\omega$  in the lighter Hg isotopes (interaction between 4  $N=6$  protons and 4  $N=7$  neutrons) [30].

## 6. FEEDING AND DECAY OF SUPERDEFORMED BANDS

Superdeformed bands are populated to much higher spins than states with smaller deformation (referred to as "normal" states hereafter) and have about an order of magnitude larger intensity than might be expected from the intensity pattern of the normal states [10,78]. These features make it interesting to try to understand the population mechanism. Important elements affecting the feeding are the level densities of both normal and superdeformed states, the mixing between the two classes of states at moderate excitation energy, the electromagnetic decay rates in the normal and superdeformed minima [78,79], as well as the barrier separating the two minima [80]. Thus, investigations of the feeding mechanism also yield information on these aspects, providing perhaps the main incentive for such studies. Furthermore, knowledge of this mechanism allows selection of optimal conditions (in terms of reaction and bombarding energy) for spectroscopic studies of superdeformation.

Insight on the feeding mechanism may be obtained from data for both superdeformed and normal states on: (a) population intensities as a function of spin and beam energy for one or several projectile-target combinations; (b) distributions in spin and energy at entry into the final nucleus; (c) shapes

of the quasicontinuum and statistical spectra associated with the feeding of the two classes of states; and (d) the properties of ridge structures in  $E_\gamma$ - $E_\gamma$  correlation matrices. Unfortunately, data on this problem have not kept pace with the steady flow of information on the many superdeformed bands discussed above. Only (a) and (b) are discussed here (see ref. [81] for a discussion of (c), ref. [10,79] for a discussion of (d)).

### 6.1 Intensities of Superdeformed Bands

Figure 12 presents, as a function of the rotational frequency  $\hbar\omega$ , the relative intensities of transitions in  $^{149}\text{Gd}$  and  $^{192}\text{Hg}$ , which are representative of superdeformed nuclei in their respective regions. In the  $A = 150$  region, the number of coincident  $\gamma$  rays is generally larger and the transition energies are almost twice as large. The latter is principally due to the larger spins of the emitting states and, to a lesser extent, to the smaller moments of inertia. The first and last transitions in the superdeformed bands in  $^{149}\text{Gd}$  and  $^{192}\text{Hg}$  correspond to estimated spins of  $(63/2, 131/2\hbar)$  and  $(10, 42\hbar)$ , respectively [44,22,23]. In both cases, the population extends to much higher spin than in the normal states. Figure 12 also shows another similarity between bands in the two regions: as the spin decreases, the intensity gradually increases, flattens out at the maximum and then drops rapidly within a couple of transitions as the bands decay to the lower-lying normal states. The superdeformed bands are weakly populated in all cases, with maximum intensities reaching about 1 and 2% in the  $A = 150$  and  $A = 190$  regions, respectively.

### 6.2 Entry Distributions

The entry distribution, representing the population distribution in spin and excitation energy after neutron emission, can be measured for superdeformed and normal states with  $4\pi$  detector calorimetric arrays which, together with Compton-suppressed Ge detectors, constitute the detection systems used in all superdeformation studies. Data on complete distributions have not been published, but information exists on the average entry points, i.e. the centroids of the distributions. The latter have been derived from data on the total energy and fold (average number of detectors firing) measured in coincidence with discrete normal or superdeformed transitions. The entry points for normal and superdeformed states in  $^{192}\text{Hg}$ , measured at several bombarding energies with the  $^{160}\text{Gd}(^{36}\text{S},4n)$  reaction, are given in

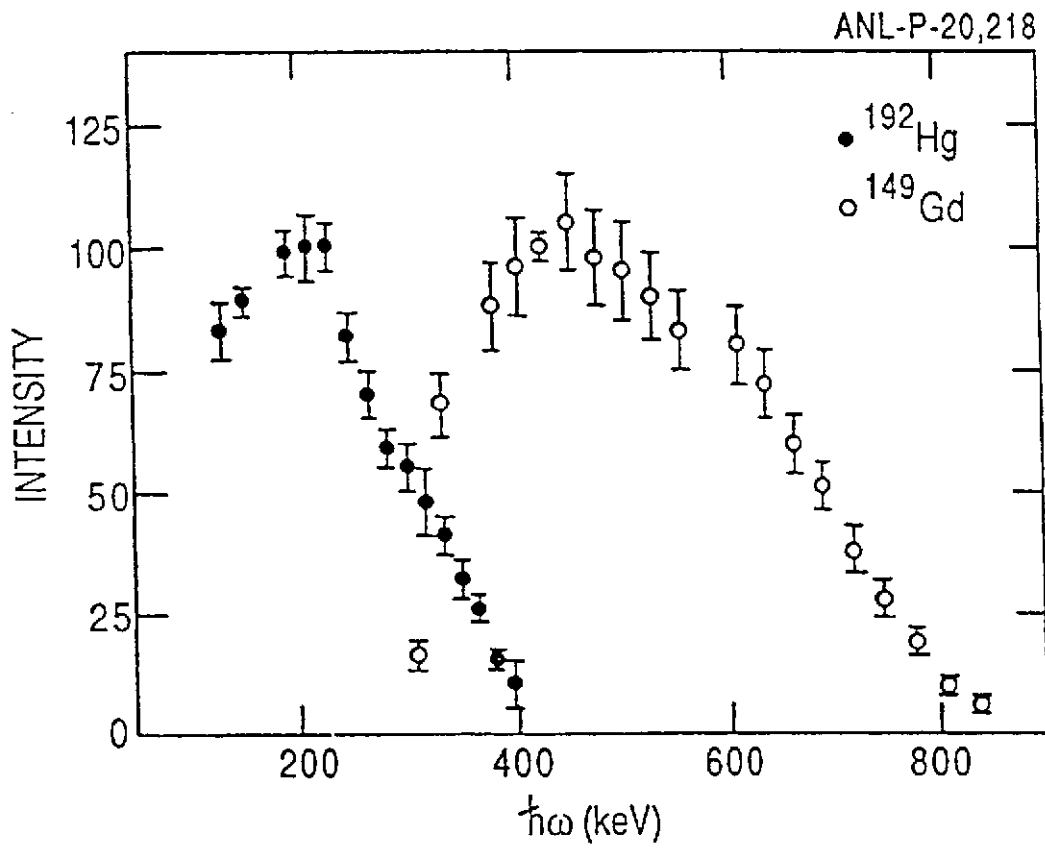


Figure 12: Relative intensities as a function of frequency  $\hbar\omega$  for  $^{192}\text{Hg}$  [22] and  $^{149}\text{Gd}$  [44], normalized to 100 at their respective maxima.

Fig. 13(a) [80]. The entry spins for the superdeformed states are higher than those for the normal states and the initial population leading to superdeformed states is colder, i.e. the entry points are lower in excitation energy than those of normal states at the same spin. Similar data on entry points for the  $A = 150$  region have not been published, but the sum-energy and fold for normal and superdeformed states in  $^{149}\text{Gd}$  have been measured [82] (Fig. 13(b)). As spin scales approximately linearly with fold, Fig. 13(b) shows that feeding of superdeformed bands also originates from higher spin and lower energy, as for  $^{192}\text{Hg}$ . Thus, feeding of superdeformed bands in both  $A = 150$  and  $A = 190$  regions share common characteristics.

Since the entry spins for  $^{149}\text{Gd}$  must necessarily be larger than the average spin where the discrete superdeformed band is fed ( $\sim 111/2h$ ), the spins of the states from which the superdeformed bands originate are larger in  $^{149}\text{Gd}$  than in  $^{192}\text{Hg}$ . On the other hand, the maximum angular momenta brought into the compound nuclei are comparable in the two cases. The lower entry spin in  $^{192}\text{Hg}$  is attributed [80] to the depletion of the highest partial waves by fission, which predominates over evaporation residue formation beyond spin  $40h$ . (Thus, superdeformed bands have been identified in this nucleus near to the limit of fission instability.) It is striking that the feeding of the superdeformed bands originates from the highest spins in the evaporation residues. This occurs because the level densities of superdeformed states exceed that of the normal states only for the highest spin.

Schiffer and Herskind [78,79] have performed an extensive series of calculations, which successfully described many of the observed feeding features in  $^{152}\text{Dy}$  and which have provided insight into the population mechanism. The calculations start by describing the first phase of the decay of the compound nucleus, i.e. neutron evaporation and fission, to obtain an entry distribution in spin and energy from which  $\gamma$  decay occurs. The decay is then followed through Monte Carlo simulations and consists of a competition at each step between electromagnetic decay ( $E1$  statistical  $\gamma$  decay, which cools the nucleus, and collective  $E2$   $\gamma$  decay, which removes two units of angular momentum) in the normal and superdeformed wells, and hopping between the normal and superdeformed wells. It was found to be important that, as the energy increases, the level density for the superdeformed states increases less rapidly than for the normal states. This results in a limited region in excitation energy where the density of superdeformed states is larger than that of normal states. This region corresponds to the highest partial waves

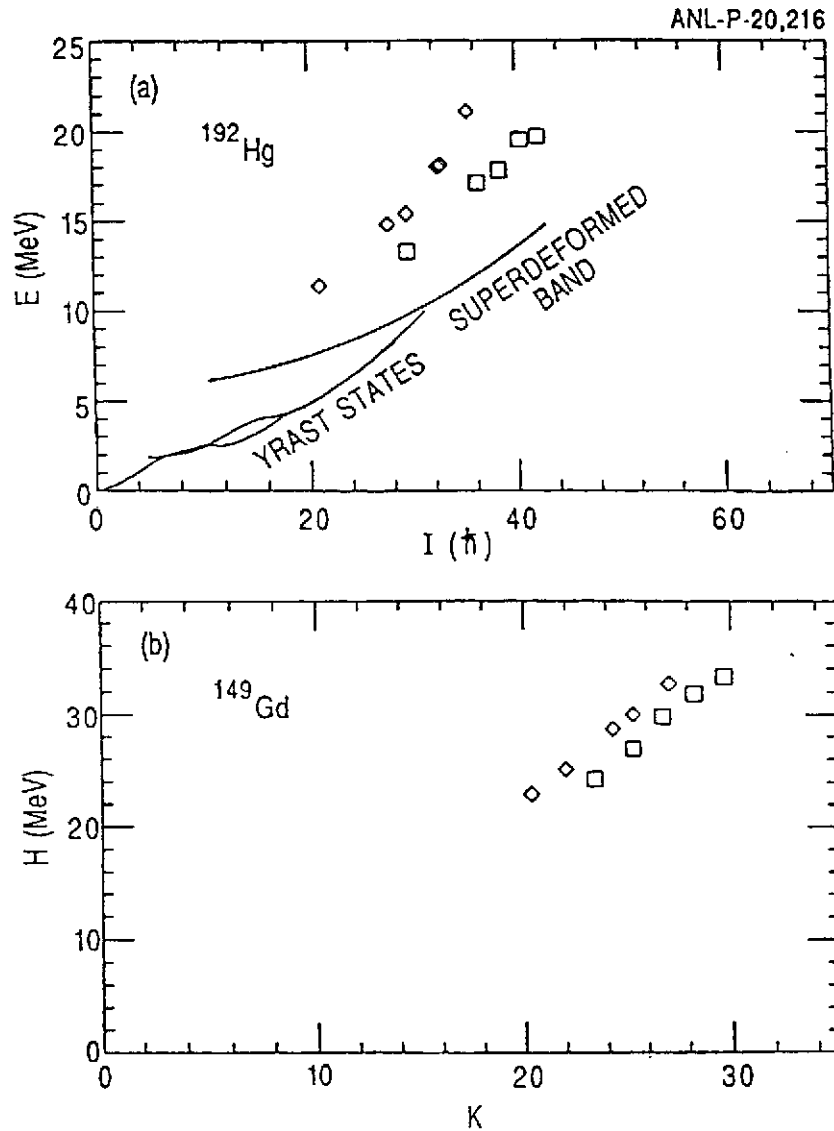


Figure 13: (a): Entry points for normal (diamonds) and superdeformed (squares) states in  $^{192}\text{Hg}$  measured in the  $^{160}\text{Gd}(^{36}\text{S},4n)$  reaction at several bombarding energies [80]. The known yrast states are indicated; the energy of the superdeformed band is not known and is arbitrarily chosen. (b): Average sum-energy  $H$  and fold  $K$  for normal and superdeformed states in  $^{149}\text{Gd}$  measured at a number of projectile energies in the  $^{124}\text{Sn}(^{30}\text{Si},5n)$  reaction [82].

and is located roughly beyond the point where the superdeformed band crosses the normal states and becomes yrast (Fig. 13). Schiffer and Herskind suggest that the entry states for the superdeformed band originate from this region and that this feature accounts for the "colder" feeding of the superdeformed bands. Although the barrier between the superdeformed and normal states was included in the calculations and governed the tunnelling between the two wells, its role is not emphasized. It has been proposed in ref. [80] that the barrier may, in fact, play the pivotal role since mainly entry states within the superdeformed well (i.e. states which are below the barrier) are likely to be trapped within the well. If this is indeed the case, then the entry energy is closely related to the barrier energy. As a result, a measurement of the entry points could provide a determination of the barrier and also of the superdeformed well depth, although the latter requires knowledge of the excitation energy of the band. These quantities are directly related to the shell correction which is responsible for the superdeformed pocket and, thus, are interesting to compare with theoretical values.

### 6.3 Deexcitation of Superdeformed Bands

The sudden decrease of superdeformed transition intensities at low frequencies (Fig. 12) indicates that, after a long cascade of consecutive intraband transitions, a rapid decay towards the lower-lying normal states takes place. So far, none of the decay paths linking the superdeformed bands with the normal states has been identified in the  $A = 150$  or  $190$  regions, suggesting that the decay is fragmented into many pathways, each too weak to define, and is probably statistical in nature [78]. It has, therefore, not been possible to define the spins and excitation energies of superdeformed band levels with standard spectroscopic techniques. This task remains the major open challenge in the study of superdeformation.

The transition from a superdeformed to a normal shape represents a large amplitude motion involving a drastic structural rearrangement. It is perhaps not surprising that the decay is fragmented into many intermediate excited states involving, in some cases, a time delay before the yrast line is reached [21,83].

The deexcitation of superdeformed bands represents an interesting problem which has been addressed by a number of recent calculations [78,84,85]. As  $\gamma$  decay occurs within a superdeformed band, a curious situation occurs where the



excitation energy of the superdeformed states with respect to the yrast levels increases (see Fig. 13a). At the point of decay, the superdeformed levels have an estimated energy of 3-5 MeV above yrast. Hence, a cold state, isolated within its own potential well, is immersed in a hot sea of normal states with very high density. The decay then occurs through admixtures with this sea of states. Properties of the decay, e.g. the spin dependence of the out-of-band decay probability, can provide information on the mixing between the superdeformed and normal states and on the barrier separating them. The gross energy distribution of the decay  $\gamma$  rays may also provide additional information. (It may be possible to determine this distribution more easily than to trace out the individual pathways.)

## 7. SUMMARY AND OUTLOOK

Superdeformed nuclei have now been discovered in four distinct regions of the periodic table with masses around  $A=130$ , 150, 190 and 240, and with respective axis ratios of 3:2, 1.9:1, 1.7:1 and 2:1. These coincide with the regions where theory, which incorporates a macroscopic liquid drop term and a quantal shell-correction term, also predict the occurrence of nuclei with very large deformation. This success represents a triumph for the Strutinsky method, and for mean-field theories in general, in describing the macroscopic and microscopic aspects of nuclear behavior.

In the  $A=150$  and 190 regions, which have been reviewed here, it has been possible to perform spectroscopic studies in the superdeformed secondary well, and both "ground" and excited bands have been observed. An unexpected discovery is that a number of the excited bands have energies identical to those of the lowest superdeformed bands in adjacent nuclei. The degeneracies of better than one part in 500 require that the moments of inertia be identical and also that the strong coupling limit applies, both to a remarkable degree. It is not clear whether this is a result of an accident or is a consequence of a symmetry which has yet to be identified. Perhaps models which exploit symmetries, such as the interacting model [86], may shed light on this question. One also wonders if the identical energies of bands in even and odd nuclei might be a manifestation of supersymmetry [87], which covers both fermion and boson degrees of freedom. Pseudospin alignment partially accounts for identical energies in superdeformed bands of some adjacent even and odd nuclei, but it is not clear if it plays a significant role in other identical bands.

Although there has been much progress in research on superdeformation, many questions remain and, indeed, have actually been raised by the new discoveries. Certainly, a major challenge is to determine the excitation energies and spins of superdeformed levels since there is not a single superdeformed band in the  $A=150$  and  $190$  regions for which these properties are known. The borders of the regions of superdeformation in the periodic table need to be established. The known excited superdeformed bands are believed to correspond to particle or quasiparticle excitations, but the collective modes associated with states of large deformation, e.g. the beta, gamma or octupole vibrations are yet to be found. If the deformation is stiff with respect to quadrupole distortion, the beta vibrations may lie at high excitation energies, but soft octupole modes may exist at lower energies [88], possibly giving rise to exotic bending modes. To shed more light on the cause of identical bands, it will probably be necessary to identify higher-lying particle states to, for instance, search for evidence of pseudo spin-orbit doublets and pseudospin alignment, as described in Section 3.4.

Investigations of the mixing between states in the normal and superdeformed well will give information on the barrier separating them and on the superdeformed well-depth. Both quantities are important to study as they are direct manifestations of the shell-corrections leading to the formation of the superdeformed pocket. Mixing in excited states can be investigated through the properties of ridges in the  $E_\gamma$ - $E_\gamma$  matrices and, at higher energies, by studying the feeding mechanism of superdeformed bands. Finally, mixing between cold superdeformed states and excited normal ones can be studied through the decay properties involved in the deexcitation out of superdeformed bands.

At present experiments are limited by the detection capabilities of current  $\gamma$ -ray detectors. The next generation detector arrays currently under construction (GAMMASPHERE in the USA and EUROGAM in Europe) will improve the detection sensitivity by about two orders of magnitude and provide answers to the questions raised above. Many fascinating discoveries about superdeformation -- and about nuclear structure in general -- lie ahead.

### Acknowledgments

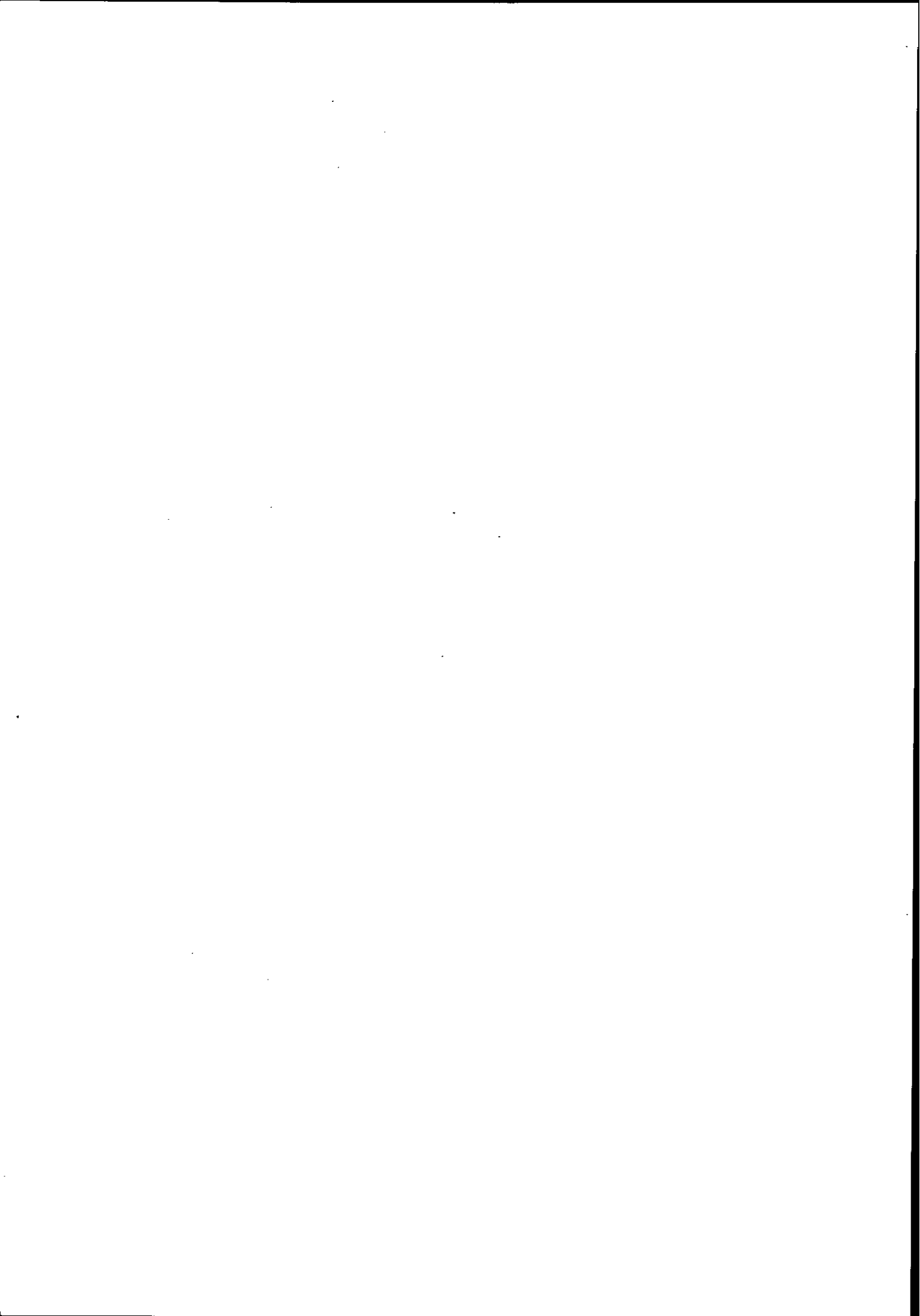
The data and ideas reviewed above are the result of dedicated work by many colleagues and friends. It is impossible to name them all here. We would like, however, to acknowledge the contributions of our collaborators at Argonne, Notre Dame, Purdue, I.N.E.L., Stockholm and Warsaw. We also thank Mike Carpenter, Patricia Fernandez and Frank Moore for carefully reading the manuscript. This work was supported by the Department of Energy, Nuclear Physics Division, under contract no W-31-109-ENG-38.

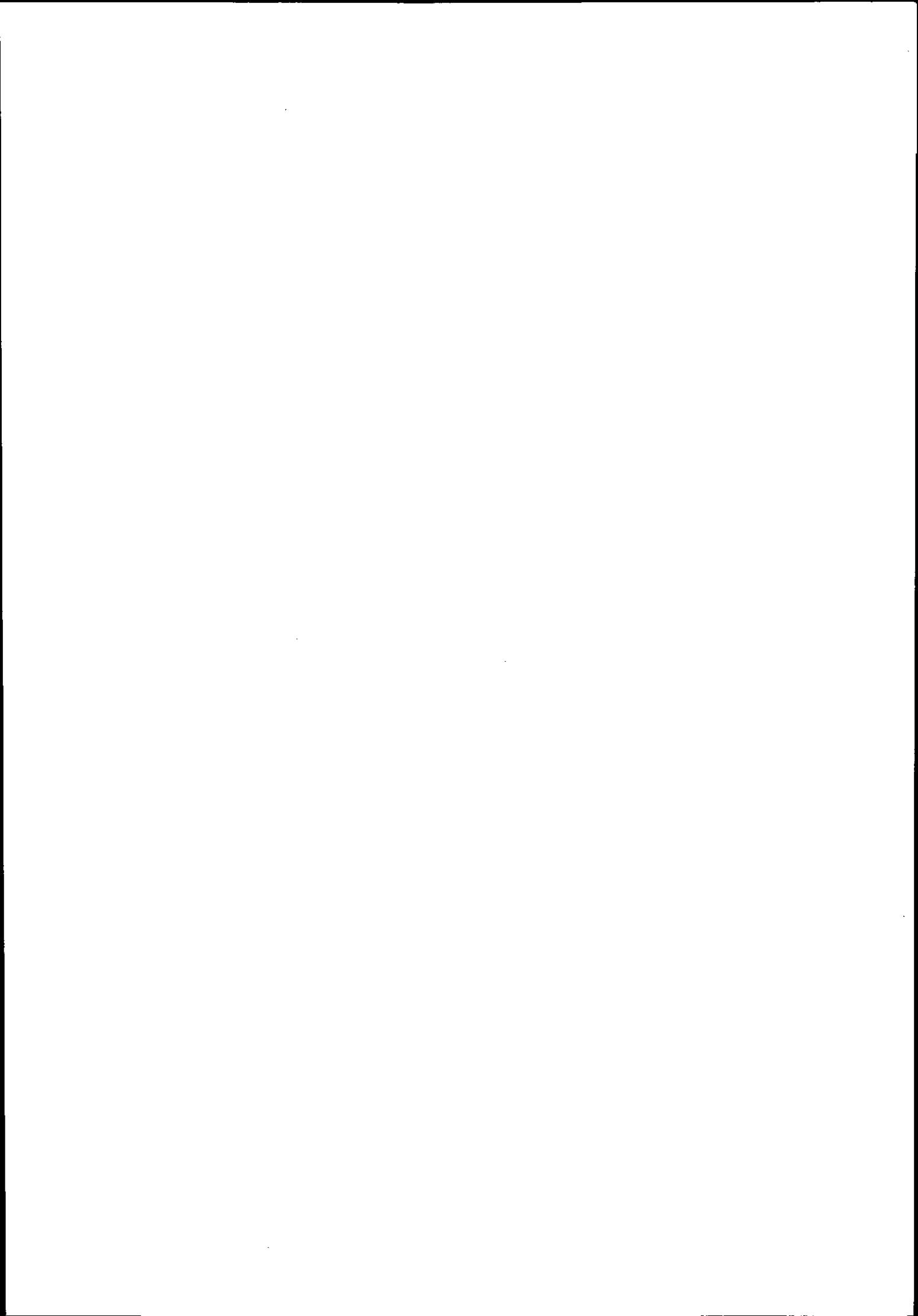
References:

1. Strutinsky, V.M., Nucl. Phys.A95:420-42(1967);A122:1-33(1968)
2. Polikanov, S.M., et al., Sov. Phys. JETP15:1016-21(1962)
3. Tsang, C.F., Nilsson, S.G., Nucl. Phys.A140:275-288(1970)
4. Bengtsson, R., et al., Phys. Lett.57B:301-5(1975)
5. Ragnarsson, I., et al., Nucl. Phys.A347:287-315(1975);A347:287-315(1980)
6. Dudek, J., Nazarewicz, W., Phys. Rev.C31:298-301(1985)
7. Chasman R.R., Phys. Lett.187B:219-23(1987)
8. Twin, P.J., et al., Phys. Rev. Lett.57:811-4(1985)
9. Kirwan, A.J., et al., Phys. Rev. Lett.58:467-70(1987)
10. Nolan, P.J., Twin, P.J., Ann. Rev. Nucl. Part. Sci.38:533-62(1988)
11. Bohr, A., Mottelson, B.R., Nuclear Structure, vol. 2: Benjamin, Reading, Mass., (1975)
12. Nilsson, S.G., et al., Nucl. Phys.A131:1-66(1969)
13. Åberg, S., Phys. Scr.25:23-7(1982)
14. Bengtsson, T., Ragnarsson I., Nucl. Phys.A436:14-82(1985)
15. Chasman, R.R., Phys. Lett.219B:227-31(1989).
16. Girod M., et al., Phys. Rev. Lett.62:2452-6(1989)
17. Bonche, P., et al., Nucl. Phys.A500:308-22(1989)
18. Moore, E.F., et al., Phys. Rev. Lett.63:360-3(1989)
19. Nazarewicz, W., et al., Phys. Lett.255B:208-14(1989)
20. Bengtsson, T., et al., Phys. Lett.208B:39-43(1988)
21. Riley, M.A., et al., Nucl. Phys.A512:178-88(1990)
22. Ye, D., et al., Phys. Rev.C41:R13-6(1990)
23. Becker, J.A., et al., Phys. Rev.C41:R9-12(1990)
24. Hubel, H., et al., Nucl. Phys.A453:316-48(1986)
25. Moore, E.F., et al., Phys. Rev. Lett.64:3127-30(1990)
26. Nazarewicz, W., et al., Nucl. Phys.A503:285-330(1989)
27. Bengtsson T., Nucl. Phys.A496:56- (1989)
28. Carpenter M.P., et al. Phys. Lett.240B:44-9(1990)
29. Janssens, R.V.F., et al., Nucl. Phys.A520:75c-90c(1990)
30. Drigert, M.W., et al., Nucl. Phys. in press
31. Henry E.A., et al., Z. Phys.A335:361-2(1990)
32. Cullen, C.M., et al., Phys. Rev. Lett.65:1547-50(1990)
33. Beausang, C.W., et al., Z. Phys.A335:325-30(1990)
34. Fernandez, P.B., et al. Nucl. Phys.A517:386-98(1990)
35. Azaiez, F., et al., Z. Phys.A336:243-4(1990); Phys. Rev. Lett.66:1030-3(1991)

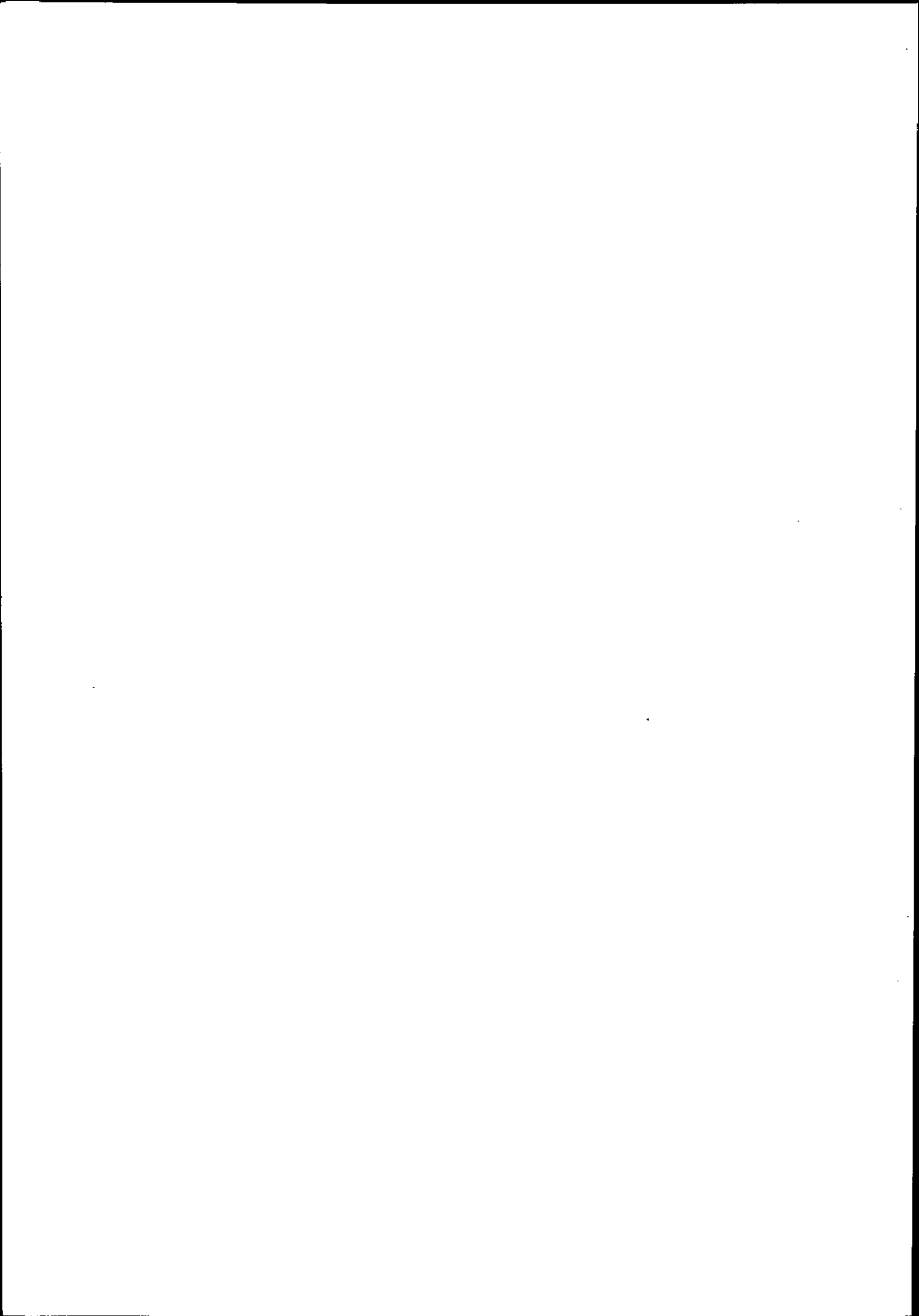
36. Brinkman, M.J., et al., Z. Phys.A336:115-6(1990)
37. Theine, K., et al., Z. Phys.A336:113-4(1990)
38. Nazarewicz, W., Proceedings XXV Zakopane School on Physics, to be published
39. Chasman, R.R., Phys. Lett.242B:317-22(1990)
40. Stephens, F.S., et al., Phys. Rev. Lett.64:2623-6(1990);65:301-4(1990)
41. Hebbinghaus, G., et al., Phys. Lett.240B:311-6(1990)
42. Zuber, K., et al., Nucl. Phys.A520:195c-200c(1990) and to be published
43. Deleplanque, M.A., et al., Phys. Rev. Lett.60:1626-9(1988)
44. Haas, B., et al., Phys. Rev. Lett.60:503-6(1988); Phys. Rev.C42:R1817-21(1990)
45. Fallon, P., et al., Phys. Lett.218B:137-42(1989); and to be published
46. Janzen, V.P., et al., Proceedings Int. Conf. on High Spin Physics and Gamma-soft Nuclei, to be published
47. Deleplanque, M.A., et al., Phys. Rev.C39:1651-4(1989)
48. Rathke, G.-E., et al., Phys. Lett.209B:177-81(1988)
49. Johansson, J.K., et al., Phys. Rev. Lett.63:2200-3(1989)
50. Lieder, R.M., et al., Nucl. Phys.A520:59c-66c(1990)
51. Twin, P.J., Nucl. Phys.A520:17c-33c(1990) and Mullins S.M., et al., to be published
52. Shimizu, Y.R., et al., Phys. Lett.198B:33-3(1989); Nucl. Phys.A509:80-116(1990)
53. Byrsky, T., et al., Phys. Rev. Lett.60:503-7(1990)
54. Nazarewicz, W., et al., Phys. Rev. Lett.64:1654-8(1990)
55. Twin, P.J., Nucl. Phys.A522:13c-30c(1991)
56. Hecht, K.T. and Adler, A., Nucl. Phys.A137:129-43(1969)
57. Arima, A., et al., Phys. Lett.30B:517-22(1969)
58. Ratna-Raju R.D., et al., Nucl. Phys.A202:433-66(1973)
59. Bohr, A., et al., Phys. Scr.26:267-72(1982)
60. Mottelson, B., Nucl. Phys.A520:711c-22c(1990)
61. Hamamoto, I., private communication and to be published
62. Ragnarsson, I., Nucl. Phys.A520:67c-74c(1990)
63. Stephens, F.S., Nucl. Phys.A520:91c-104c(1990)
64. Satula, W. et al., Nucl. Phys. in press
65. Becker, J.A. et al., Nucl. Phys.A520:188c-94c(1990)
66. Draper, J.E., et al., Phys. Rev. C42:R1791-5(1990)
67. Wu, C. et al., to be published
68. Wyss, R., Pilotte, S., to be published
69. Harris, S.M., Phys. Rev.B509:138-54(1965)

70. Carpenter, M.P., et al., to be published
71. Nazarewicz, W., Nucl. Phys.A520:333c-51c(1990) and references therein
72. Höller, J., Åberg, S., Z. Phys.A336:363-4(1990)
73. Åberg, S., Nucl. Phys.A520:35c-57c(1990)
74. Dudek, J. et al., Phys. Lett.248B:235-42(1990)
75. Bonche, P. et al., to be published
76. Szymanski, Z.,Nucl. Phys.A520:1c-16c(1990)
77. Wyss, R., Johnson, A.,Proceedings Int. Conf. on High Spin Physics and Gamma-soft Nuclei, to be published
78. Herskind, B., Schiffer, K., Phys. Rev. Lett.59:2416-9(1987)
79. Schiffer, K., et al., Z. Phys.A332:17-27(1989)
80. Khoo, T.L., et al.,Nucl. Phys.A520:169c-77c(1990)
81. Moore, E.F., et al., Proceedings Workshop on Nuclear Structure and Heavy-ion reaction Dynamics, Inst. Phys. Conf. Ser. 109:171-8(1991)
82. Taras, P. et al., Phys. Rev. Lett.61:1348-51(1988) and Haas, B. et al, Phys. Lett.B245:13-6(1990)
83. Carpenter, M. P., et al.,Nucl. Phys.A520:133c-7c(1990)
84. Vigezzi, E., et al., Phys. Lett.B249:163-7(1990)
85. Bonche, P., et al., Nucl. Phys.A519:509-20(1990)
86. Iachello, F., Arima, A., The Interacting Boson Model, Cambridge Univ. Press, Cambridge (1987) and Iachello, F., Nucl. Phys.A522:83c-98c(1991)
87. Iachello, F., van Isacker, P., The Interacting Boson Fermion Model, Cambridge Univ. Press, Cambridge (1990)
88. Mizutori, S., et al., to be published









## LES ISOMERES DE FISSION

D. PAYA

(DAPNIA/SPN, C.E.Saclay)

### RESUME

Des noyaux superdéformés sont connus depuis près de trente ans dans la région des actinides. Ils ont tous en commun de pouvoir se désexciter par fission spontanée, d'où leur nom d'isomères de fission. Après un bref rappel historique, on décrit les principes des dispositifs expérimentaux qui ont permis l'étude de leurs propriétés (durée de vie, énergie d'excitation, spin, facteur gyromagnétique, moment d'inertie et moment quadrupolaire) et on donne les valeurs les plus significatives. On aborde ensuite la question des différents types d'états excités de ces isomères de fission.

### ABSTRACT

Superdeformed nuclei have been known for almost thirty years in the actinide region. They all have in common to be able to de-excite by spontaneous fission, hence their name of fission isomers. After a short historical account, the principles of different experimental set-ups are described. These set-ups were used to study various properties: half-life, excitation energy, spin, gyromagnetic factor, moment of inertia and quadrupole moment. The most significant values are given. Finally, the question of the various types of excited states of fission isomers is tackled.

### Introduction

La spectroscopie nucléaire a pris un élan nouveau, ces dernières années, avec les noyaux superdéformés. De nombreuses conférences et une part importante de cette école leur sont d'ailleurs consacrées. Pourtant, leur taux de production est très marginal (moins de 1% dans les réactions entre ions lourds). On ne peut donc les observer qu'à condition de mettre en oeuvre un tri des plus sévères, réalisé généralement en imposant des coïncidences multiples entre les rayons  $\gamma$  qui désexcitent une même bande. Il est clair que l'étude, ou même la simple observation de noyaux superdéformés, tels que nous les concevons actuellement, n'est guère possible ni même envisageable à moins de disposer d'un de ces multidétecteurs gamma de haute résolution qui ont permis leur découverte. Plutôt, devrait-on dire, leur re-découverte; car, si le mot de superdéformation est nouveau, la chose est connue depuis bien plus longtemps, il est vrai, par une communauté qui a toujours été un peu à l'écart de la spectroscopie traditionnelle: celle des fissionistes. Ces derniers, qui ne disposaient pas du filtre que constituent les coïncidences multiples entre rayons  $\gamma$ , avaient découvert, par hasard, que la voie de fission pouvait constituer un puissant moyen de sélection. Evidemment, la méthode ne pouvait être appliquée

qu'aux noyaux très lourds mais elle a donné son nom à toute une classe de noyaux qu'on appelle maintenant superdéformés et qui étaient à l'époque des isomères de fission.

### Historique

Le premier isomère de fission fut découvert à Doubna en 1962 dans le cadre d'un programme portant sur la synthèse d'éléments superlourds. Le bombardement d'une cible de  $^{238}\text{U}$  par des ions de  $^{22}\text{Ne}$  et  $^{16}\text{O}$  conduisait à la fission spontanée d'un isotope inconnu avec une durée de vie voisine de 14 msec<sup>1)</sup>. Cette durée de vie,  $10^{10}$  fois plus petite que la plus courte durée de vie qu'on peut obtenir par fusion complète ou incomplète de  $^{238}\text{U} + ^{16}\text{O}$  donnait à penser que l'isotope fissionnant n'était pas dans son état fondamental mais plutôt dans un état isomère ayant des propriétés "anormales". La même activité observée, ou pas observée, avec différentes cibles ( $^{238}\text{U}$ ,  $^{239-240-242}\text{Pu}$ ,  $^{241-243}\text{Am}$ ) et différents projectiles ( $^{22}\text{Ne}$ ,  $^{20}\text{Ne}$ ,  $^{16}\text{O}$ ,  $^{11}\text{B}$ ,  $\alpha$ ,  $d$ )<sup>2)</sup>

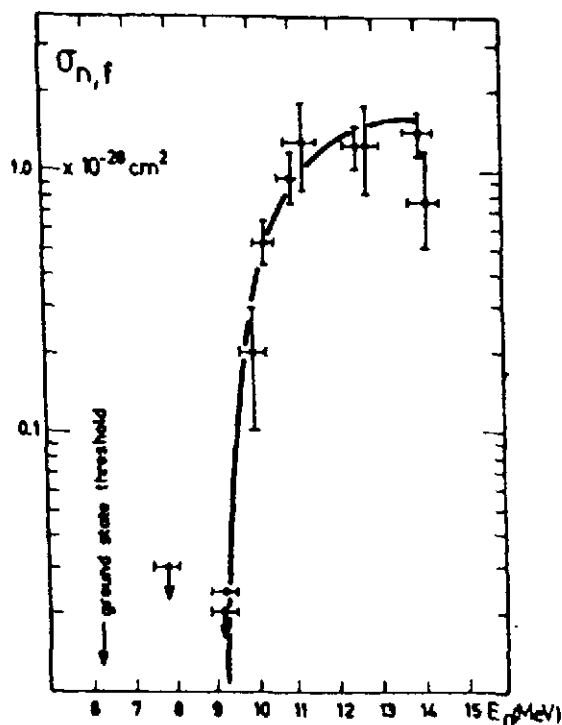


Fig.1. Fonction d'excitation pour la production de l'isomère de fission  $^{242m}\text{Am}$  par la réaction  $(n,2n)$ .

indiquait qu'on avait affaire à un isotope d'américium, probablement  $^{242}\text{Am}$ . La preuve en fut apportée en 1967 quand Flerov et al.<sup>3)</sup> produisirent la même activité par la réaction  $^{243}\text{Am}(n,2nf)$ . Du même coup, ils mesuraient la fonction d'excitation (fig. 1) et en déduisaient l'énergie de l'état isomère: 2,9 MeV. On ne comprenait alors pas pourquoi un état à si haute énergie d'excitation, avec un spin guère plus grand que 8 à 10  $\hbar$  était stable vis à vis de l'émission  $\gamma$ . En effet, dans les isomères habituels de la physique nucléaire, la désexcitation  $\gamma$  est ralentie parce que l'état initial a un spin élevé par rapport à tous les états de plus basse énergie. Dans ces conditions, seules les transitions de grande multipolarité sont autorisées, mais avec une faible probabilité. Or, dans un noyau impair-impair comme  $^{242}\text{Am}$ , on s'attend à trouver, au-dessous de 3 MeV, de nombreux niveaux avec des spins compris entre 4 et 8  $\hbar$  autorisant des désexcitations rapides. On ne comprenait pas non plus pourquoi la fission semblait la voie de désexcitation

favorisée alors que toutes les tentatives d'observer d'autres voies de désexcitation ( $\alpha$  et  $\gamma$  en particulier) avaient échoué. On en était réduit à supposer que, dans ce cas, l'isomérisme était dû à une déformation nucléaire inhabituelle qui se trouverait être stable, une circonstance qui avait été envisagée dès 1953 par D. L. Hill et J. A. Wheeler<sup>4)</sup> dans leur grand article sur l'interprétation des phénomènes de fission. Une interprétation théorique vraiment satisfaisante, au moins sur le plan qualitatif, fut trouvée bientôt dans les travaux de Strutinsky<sup>5)</sup>. En incorporant les effets de couches dans le modèle de la goutte liquide on voyait, en effet, la barrière de fission se creuser en son sommet et un minimum secondaire apparaître à côté du minimum principal (fig. 2). On avait alors toute l'explication: le niveau le plus bas dans le minimum secondaire est celui de l'état isomère. Il a une durée de vie longue parce qu'il est piégé entre deux barrières de potentiel qu'il doit nécessairement franchir pour se désexciter et il le fait plus volontiers par fission que l'état fondamental parce qu'il a à traverser une barrière beaucoup moins haute et moins épaisse. Cette propriété, on le voit, n'est en rien spécifique de  $^{242}\text{Am}$  et

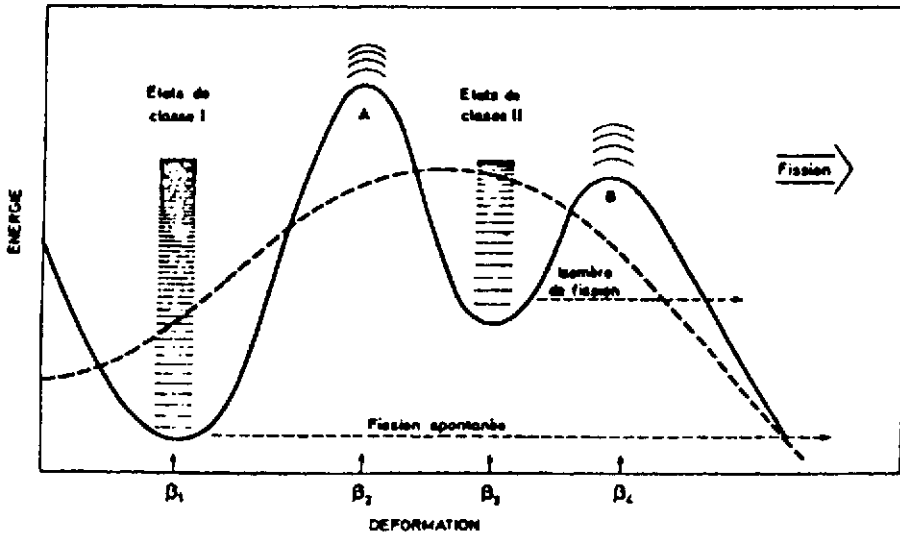


Fig.2. Barrière de fission (en trait plein) quant la barrière goutte liquide (en tirets) est corrigée des effets de couches.

on doit s'attendre à ce que les noyaux voisins possèdent, eux aussi, des isomères de fission, aussi la chasse aux isomères s'est-elle ouverte aussitôt. La signature la plus immédiate de l'isomère est évidemment sa période. La méthode expérimentale consiste alors à détecter, généralement par le biais des fragments de fission, la fission retardée et à mesurer le retard en temps entre cette fission et le temps de formation du

noyau composé initial. Une des principales difficultés de l'expérience est due au petit nombre de fissions retardées comparé à celui des fissions promptes et à la sensibilité de la mesure à d'éventuelles fissions promptes parasites qui pourraient simuler des fissions isomériques.

Techniques expérimentales

De nombreux dispositifs expérimentaux ont été imaginés pour mesurer les périodes. On peut distinguer deux catégories : les mesures directes et les mesures indirectes.

Les mesures directes sont réalisées généralement avec des faisceaux pulsés, en comptant les fissions qui se produisent entre deux impulsions de faisceau et en mesurant directement leur retard par rapport à l'impulsion précédente aux moyen de techniques électroniques standard. Cette méthode est illustrée par la figure 3 où le nombre de fissions retardées est tracé en fonction du retard défini plus haut. Dans ce cas, une cible de  $^{238}\text{U}$  était

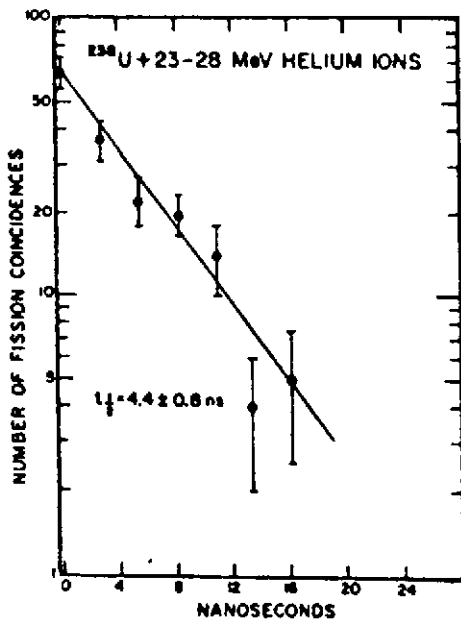


Fig.3. Courbe de décroissance de  $^{240m}\text{Pu}$ .

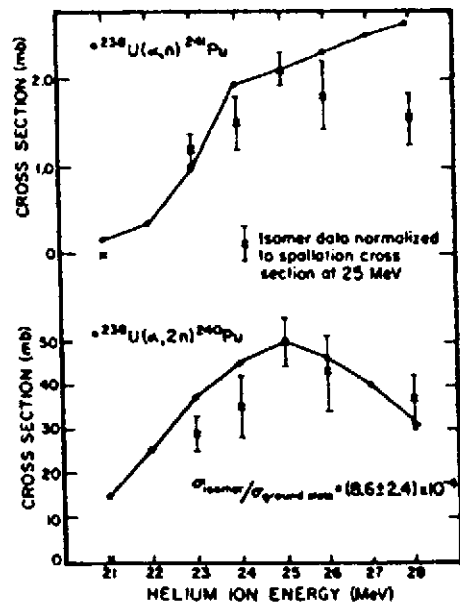


Fig.4. Fonction d'excitation de l'isomère de 4,4 ns de  $^{240m}\text{Pu}$  comparée aux fonctions d'excitation  $(\alpha, n)$  et  $(\alpha, 2n)$ .

bombardée par des  $\alpha$  de 23-28 MeV délivrés par le cyclotron de Washington par impulsions de 2 ns de large. Les points expérimentaux se placent sur une courbe exponentielle avec une période de  $4,4 \pm 0,8$  ns. L'attribution de cette activité à un isomère de  $^{240}\text{Pu}$  est faite sur la base de la fonction d'excitation montrée sur la figure 4, puisque seule une réaction ( $\alpha,2n$ ) peut donner un maximum pour des rayons  $\alpha$  de 25 MeV. Dans cette réaction, le taux de formation de l'isomère comparé à celui de l'état fondamental est de  $8,6 \cdot 10^{-4}$ . Un soin tout-à-fait particulier a donc du être pris pour éliminer les effets parasites. Dans le cas présent, l'un de ceux-ci, en effet, donne aussi une courbe de décroissance qui n'est pas due à des fissions retardées et qui simule une durée de vie de 12 ns. La limite inférieure des durées de vie qui peuvent être mesurées par cette méthode est donnée par la durée des impulsions du faisceau: typiquement 1 à 2 ns. La limite supérieure est fixée par la période de répétition qui doit couvrir trois à quatre durées de vie. Il faut aussi mentionner, dans les mesures directes, les expériences dans lesquelles le faisceau n'est pas pulsé et où l'instant zéro est donné par la détection de la particule associée, par exemple le proton dans la réaction (d,pf).

Dans les méthodes indirectes, le temps n'est pas mesuré directement mais plutôt par l'intermédiaire d'une autre quantité physique (généralement une distance) qui lui est reliée. Dans ce domaine, l'imagination des expérimentateurs a été très féconde. Nous citerons deux techniques différentes à titre d'exemples. La technique de la roue est illustrée par le schéma de la figure 5. Le faisceau traverse une roue ajourée avant d'aller frapper une cible fixe. La roue a trois fonctions: 1) elle porte des détecteurs à traces qu'elle présente devant la cible entre deux impulsions de faisceau, 2) à l'aide d'une cellule photo-électrique, elle fournit une impulsion qui coupe le faisceau juste avant que les détecteurs n'arrivent devant la cible, 3) elle empêche tout faisceau résiduel, qui pourrait subsister pendant les périodes d'occultation, d'atteindre la cible. Un collimateur assure qu'un point quelconque du détecteur ne peut être touché par un fragment de fission que s'il se trouve en face de la cible, ce

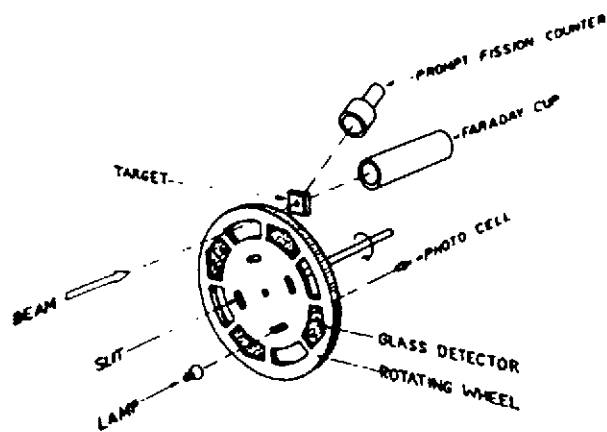


Fig. 5. Représentation schématique du dispositif de la roue<sup>7)</sup>.

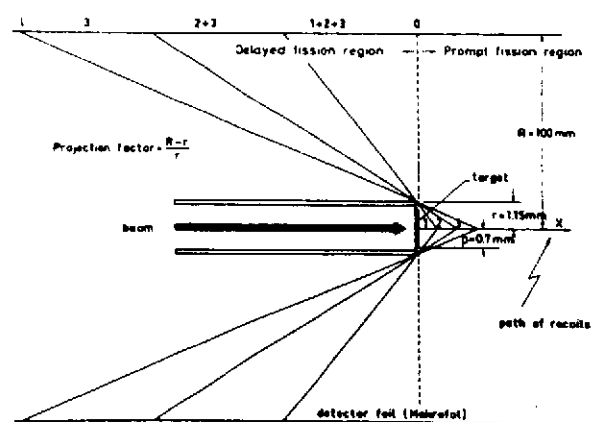


Fig. 6. Schéma de principe de la détection en vol d'un isomère de fission.

qui supprime les fissions promptes. La mesure du temps de vie se fait en comptant les points d'impact en fonction de la distance. Ce dispositif a été utilisé par Bjornholm et al.<sup>7)</sup> pour mesurer la durée de vie et l'énergie d'excitation de l'isomère de  $^{240}\text{Am}$  produit dans la réaction  $^{241}\text{Pu}(p,2n)^{240m}\text{Am}$ . La durée de vie de  $0,91 \pm 0,07$  ms est typique des durées de vie les plus faibles qu'on peut mesurer avec cette technique où la limite est imposée par la vitesse de la roue. Des durées de vie bien plus courtes sont mesurées grâce à la technique de la fission en vol dont le schéma de principe est représenté sur la figure 6. Un faisceau continu frappe une cible suffisamment mince ( $\sim 10 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ ) pour que les noyaux composés de recul puissent s'en échapper. Dans ces

conditions, la fission prompt se produit dans (ou près de) la cible, tandis que les fissions retardées se produisent plus loin. Une fission retardée ne peut être observée d'un point donné du détecteur, constitué d'un cylindre de feuilles de plastique ou de plaques de verre, que si l'isomère a dépassé un certain point le long de l'axe de recul. Ce point est déterminé par le rayon du support de cible. Ainsi la densité de traces sur le détecteur sera une fonction du nombre de noyaux fissionnants, intégré le long de l'axe. En jouant sur les rayons respectifs du détecteur et du support de cible, on peut atteindre une amplification importante de la longueur de recul et ajuster les dimensions du dispositif en fonction de la durée de vie recherchée. Avec des vitesses de recul de l'ordre de 0,2 à 0,6 mm/ns, on peut mesurer des durées de vie dans la gamme de quelques picosecondes à quelques nanosecondes. Les résultats de cette méthode sont illustrés par les isomères de  $^{238}\text{Pu}$ , formés dans la réaction  $^{236}\text{U}(\alpha, 2n)^B$ . On voit sur la figure 7 que cet isotope possède deux isomères de fission, dont les durées de vie

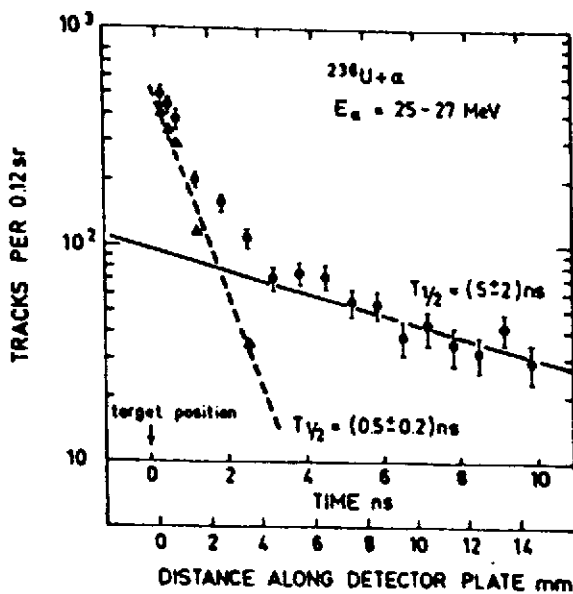


Fig.7. Distribution des traces dans la fission retardée de  $^{238m}\text{Pu}$ .

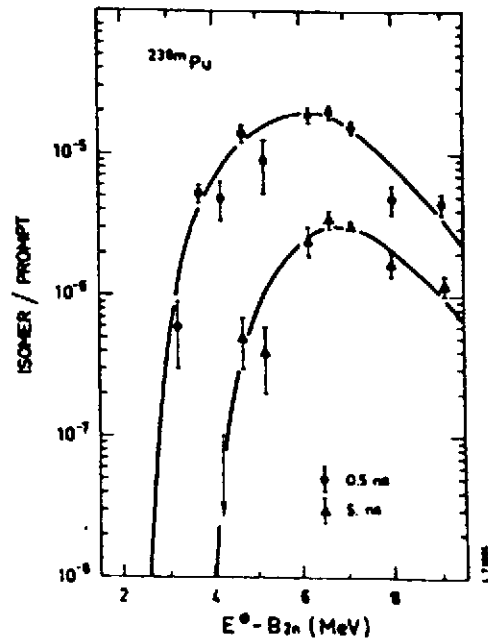


Fig.8. Nombres de fissions isométriques pour les deux isomères de  $^{238m}\text{Pu}$ , en fonction de l'énergie d'excitation.

sont dans un rapport 10. La fonction d'excitation (fig.8) montre que l'isomère de 5 ns se trouve à une énergie d'excitation supérieure de 1,3 MeV à celle de l'isomère de 0,5 ns, qui, d'après la systématique, est considéré comme l'état "fondamental" dans le deuxième minimum de la surface d'énergie potentielle. Le niveau situé à 1,3 MeV au-dessus est le premier état excité intrinsèque. Il est obtenu à partir de l'état "fondamental" en cassant une paire de neutrons. Les projections des spins de ces neutrons peuvent alors se coupler à une grande valeur de K qui ralentit les transitions  $\gamma$  vers l'état "fondamental". On a ainsi un isomère de type classique qui décroît vers le "fondamental" avant de fissionner. L'énergie de l'état intrinsèque est une mesure de  $2\Delta_n$  où  $\Delta_n$  est l'énergie d'appariement de deux neutrons à la déformation de deuxième minimum.

#### Propriétés de décroissance.

Ces différentes techniques, avec de nombreuses variantes, ont permis la découverte d'une trentaine d'isomères de fission, dont la figure 9 montre la localisation sur la carte nucléaire.

Dans onze cas, deux activités de fission spontanée ont été attribuées au même noyau. On considère que ces doubles isomères résultent de la présence d'un isomère de spin, au dessus de l'isomère de fission dans le

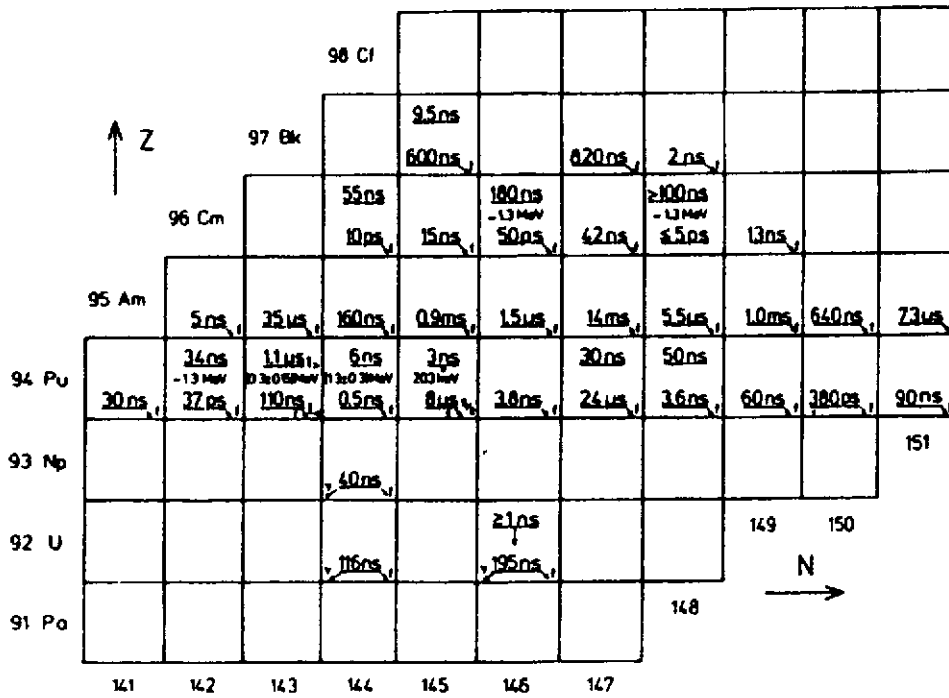


Fig.9. Partie de la carte nucléaire montrant les isomères de fission observés expérimentalement. On a porté la durée de vie, le mode de décroissance, le spin et l'énergie d'excitation par rapport au fondamental du deuxième minimum, quand ils sont connus.

deuxième minimum. Ces isomères d'énergie élevée sont interprétés comme le résultat d'excitations à une particule dans les noyaux de masse impaire, à deux particules dans les noyaux pair-pair. Leur nombre indique que l'isométrie de spin est aussi commune dans le second puits que dans le premier. Pour la majorité de ces états excités, on ne sait toujours pas si la durée de vie est liée à la fission spontanée directe ou à la transition électromagnétique vers un état d'énergie inférieure dans le deuxième puits, suivie de la fission de ce dernier.

On voit clairement sur la figure 9 qu'on a affaire à un flot d'isomérisme localisé entre les plutoniums et les curiums. La présence de cet flot se comprend fort bien dans le cadre du modèle macroscopique-microscopique de Strutinsky. En effet la correction de couches microscopique, qui est de quelques MeV, n'a d'effet significatif sur la barrière de fission que si elle intervient dans une région de déformation où la barrière macroscopique varie peu, c'est à dire, en pratique au voisinage de son sommet. Or, si les corrections de couches varient lentement avec Z, il n'en va pas de même de la composante goutte liquide. Dans cette dernière, l'augmentation de la répulsion coulombienne avec Z déplace le sommet de la barrière macroscopique vers les petites déformations, ce qui a pour effet de déformer la barrière globale. Ceci est représenté schématiquement sur la figure 10. Pour les Z élevés, la barrière extérieure, qui se trouve sur le flanc descendant de la barrière goutte liquide, est plus basse que la barrière intérieure, ce qui favorise la décroissance de l'isomère dans la voie

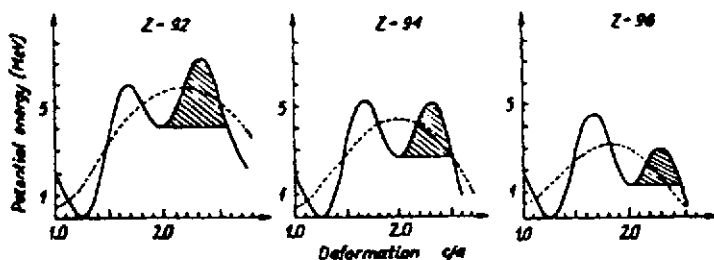


Fig.10. Influence de la partie goutte liquide (en tirets) de l'énergie potentielle sur les hauteurs relatives des barrières intérieure et extérieure. D'après Metzger<sup>9</sup>.

de fission, avec une durée de vie de fission petite, trop petite même pour en permettre l'observation expérimentale au dessus de Z=97. Pour les Z plus faibles, au contraire, c'est la barrière intérieure qui devient la plus basse et, donc, la plus facile à franchir. La voie de fission se trouve alors défavorisée au profit de la voie  $\gamma$  qui a une durée de vie

plus petite. Effectivement, comme le montre la figure 9, on a pu observer expérimentalement trois exemples d'isomères où on a une compétition entre la voie  $\gamma$  et la voie fission:  $^{236}\text{U}$ ,  $^{238}\text{U}$ ,  $^{237}\text{Np}$ . La variation des durées de vie partielles de fission avec le nombre de protons est donc déterminée principalement par la composante goutte liquide, les effets de couches de protons ne jouant qu'un rôle mineur. Il en va très différemment des neutrons dont les effets de couches sont très fortement influencés par la proximité du nombre magique  $N=146$ . V. Metag a établi une formule semi-empirique<sup>9)</sup> basée sur ces considérations et qui donne les durées de vie partielles de fission spontanée des isomères avec une précision meilleure qu'un facteur trois. Cette formule donne pour  $^{238m}\text{U}$ , qui est sur la couche magique  $N=146$ , une durée partielle de fission d'environ  $4\ \mu\text{s}$ , à com-

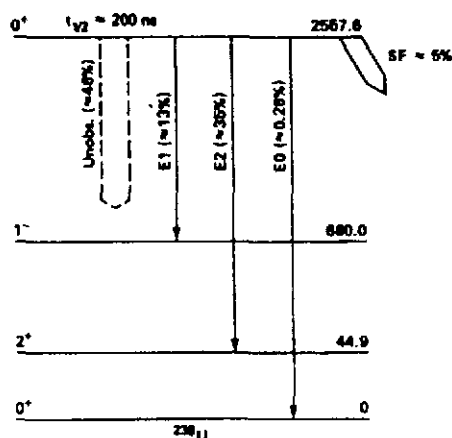


Fig.11. Désexcitation  $\gamma$ , dans le premier minimum, de l'isomère de  $^{238}\text{U}$ .

parer à la durée de vie globale mesurée de 195 ns. Cette dernière est donc gouvernée essentiellement par la désexcitation  $\gamma$  vers le minimum principal. L'observation directe de ces rayons  $\gamma$  est rendue très délicate à cause du bruit de fond ambiant mais aussi à cause des états isomères des produits de fission dont le plus connu est  $^{134}\text{Te}$  qui a une raie de 1279 keV, avec une durée de vie de 164 ns. Néanmoins, P. A. Russo et al.<sup>10)</sup> puis J. Kantele et al.<sup>11)</sup> ont réussi à observer les transitions E1 et E2 entre l'état isomère  $0^+$  et les premiers états  $1^-$  et  $2^+$  dans le premier minimum ainsi que la transition E0 vers le fondamental  $0^+$ . Ces résultats donnent une mesure précise de l'énergie d'excitation de l'isomère:  $E_i = 2557,6 \pm 0,5\ \text{keV}$ . L'essentiel des résultats concernant la désexcitation  $\gamma$  de  $^{238m}\text{U}$  est résumé sur la figure 11.

### Spins

On s'attend à ce que l'état le plus bas dans le deuxième minimum d'un noyau pair-pair ait un spin nul. Pour un noyau impair, le spin doit être celui du niveau occupé par la particule célibataire. Il est donc d'un grand intérêt de déterminer les spins et les moments pour identifier les niveaux à une particule voisins de la surface de Fermi et avoir un guide dans l'établissement des diagrammes théoriques. Malheureusement, il est souvent difficile d'obtenir des informations inambiguës. Les mesures des distributions angulaires des fragments de fission isomérique, par exemple, dont l'anisotropie doit être liée au spin de l'état isomère ne donnent pas de résultats fiables.

Un cas intéressant est  $^{237}\text{Pu}$  qui possède deux isomères de vie très différentes (1100 ns et 100 ns). P.A. Russo et al.<sup>12)</sup> et W. Günther et al.<sup>13)</sup> ont mesuré les peuplements relatifs de ces deux isomères dans les réactions  $(\alpha, 2n)$ ,  $(d, 2n)$  et  $(\gamma, 2n)$  pour différents transferts de moment angulaire. En faisant une analyse en termes de modèle statistique, ils concluent que le spin le plus probable est  $11/2$  pour l'état excité à vie longue et  $5/2$  pour l'état "fondamental" à vie courte dans le deuxième minimum. D'autre part, le facteur gyromagnétique de cet état a lui aussi été mesuré. La technique utilisée est celle de la distribution angulaire perturbée dépendant du temps<sup>14)</sup>, où l'anisotropie de la distribution angulaire des fragments de fission est observée, en fonction du temps, dans un champ magnétique transverse. C'est une technique délicate, qui exige que l'alignement provoqué par la réaction nucléaire se conserve pendant un temps suffisamment long pour permettre la



précession de l'isomère dans le champ magnétique appliqué. Le facteur  $g$  mesuré pour l'isomère de 100 ns de  $^{237}\text{Pu}$  vaut  $g = -0,45$ . Seule l'orbitale  $[871] 1/2^+$ , où le paramètre de découplage  $a = -1,75$  fait de l'état  $I=3/2$  le niveau le plus bas, est susceptible de donner une valeur de  $g$  aussi négative.

Excitation des isomères

Les états les plus bas des noyaux pair-pair normalement déformés sont des états rotationnels, le premier d'entre eux se trouvant à une énergie inférieure de plus d'un ordre de grandeur à celle des états de vibration ou des états à deux quasi-particules les plus bas. Chez les isomères de fission, beaucoup plus déformés, les excitations rotationnelles se produisent à des énergies encore plus basses, à cause du plus grand moment d'inertie. Les transitions entre ces états de basse énergie sont hautement converties et donnent des électrons de faible énergie qui peuvent être détectés au moyen d'un spectromètre de type "orange". La figure 12 montre le

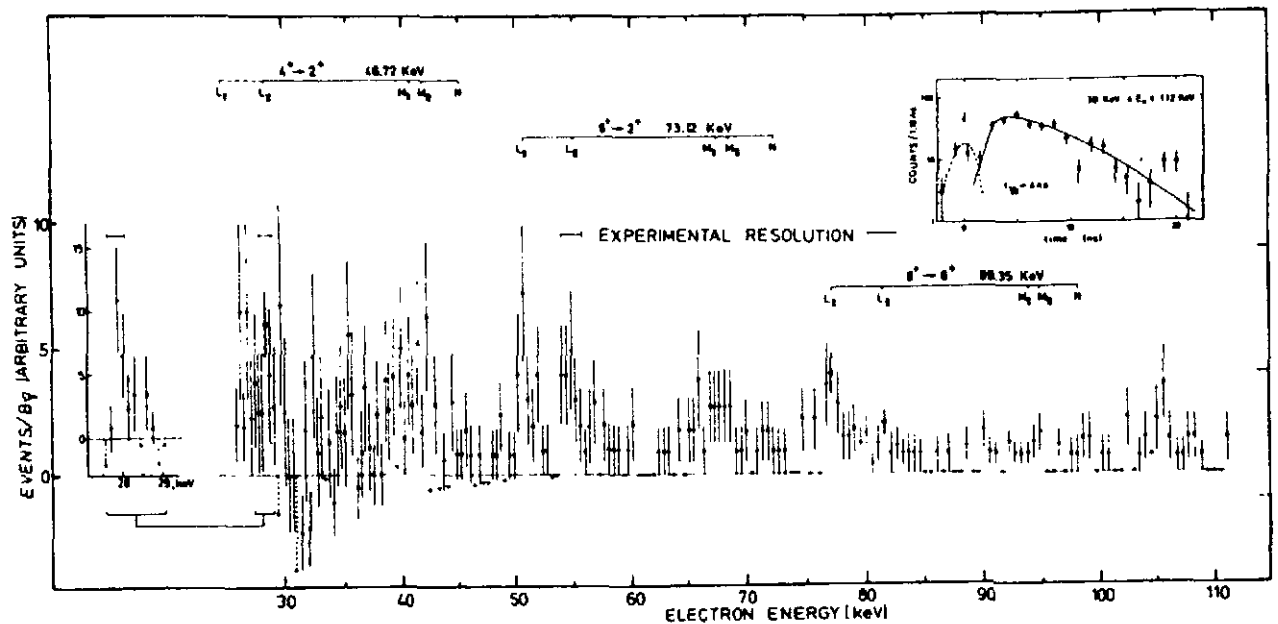


Fig.12. Spectre en énergie et courbe de décroissance des électrons de conversion mesurés en coïncidence retardée avec la fission isomérique de  $^{240m}\text{Pu}$  (15).

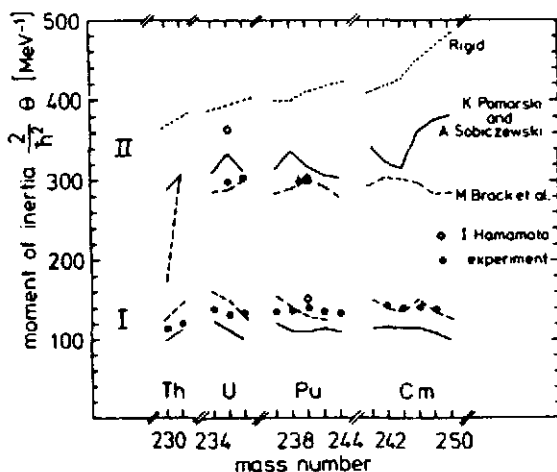


Fig.13. Moments d'inertie des actinides dans l'état isomérique et l'état fondamental, comparés à différents résultats de calculs.

spectre d'électrons de conversion mesuré à Munich<sup>15)</sup> en coïncidence retardée avec la fission isomérique de  $^{240m}\text{Pu}$ . On y voit l'interprétation des différentes lignes, attribuées à trois transitions  $E2$ :  $8^+ \rightarrow 6^+$ ,  $6^+ \rightarrow 4^+$  et  $4^+ \rightarrow 2^+$  (la transition  $2^+ \rightarrow 0^+$  n'est pas identifiée dans cette expérience à cause d'un problème dû aux électrons  $\delta$ ). La corrélation en temps représentée dans le cadre supérieur est en accord avec la durée de vie, précédemment mesurée, de 4 ns et prouve surtout que les électrons sont effectivement émis par le noyau de  $^{240m}\text{Pu}$  avant la fission. L'observation de niveaux rotationnels permet bien évidemment de mesurer le moment d'inertie de ces noyaux. La figure 13<sup>16)</sup> présente les moments d'inertie

dans le premier et dans le deuxième minimum de la surface d'énergie potentielle, comparés à différents calculs. Il apparaît que, dans le deuxième minimum, le moment d'inertie est deux fois plus grand et le terme de non-adiabaticité (dû à l'interaction de la rotation avec la vibration ou l'excitation de particules) dix fois plus petit que dans le premier minimum.

Si les grands moments d'inertie ont constitué la première preuve expérimentale de la grande déformation des isomères de fission, ils ne permettent pas en eux-mêmes de mesurer cette déformation dans la mesure où leur calcul dépend assez fortement du modèle utilisé. Une information plus directe est obtenue à partir du moment quadrupolaire électrique. Celui-ci est directement relié aux durées de vie des états rotationnels, qui sont bien inférieures à la nanoseconde. Pour mesurer des temps de vie aussi courts, une technique ingénieuse de plongeur de charge a été mise au point à Heidelberg<sup>16</sup>). Elle est basée sur le fait que les cascades Auger qui suivent les transitions rotationnelles produisent des charges ioniques qui sont plus grandes, d'un ordre de grandeur, que les charges d'équilibre ( $1+$  ou  $2+$ ) aux vitesses de recul mises en jeu ( $v/c \sim 0.2\%$ ). Dans l'expérience, les ions de recul traversent une feuille de carbone placée à différentes distances de la cible. Si la désexcitation de la cascade rotationnelle est terminée avant la traversée de la feuille, les ions en sortent avec leur charge d'équilibre, faible, qu'ils conservent pendant le reste de leur vol. Si, au contraire, une transition convertie se produit après la traversée de la feuille, il y aura une forte augmentation de la charge ionique (fig. 14). La proportion d'ions avec des charges faibles ou élevées peut être mesurée en défléchissant les ions dans un champ magnétique. L'échelle de temps est donnée par la distance cible-feuille qui varie de  $50\ \mu\text{m}$  à  $5\ \text{mm}$ . Les moments quadrupolaires mesurés par cette méthode sont représentés sur la figure 15. Ils correspondent à des rapports d'axes  $c:a$  d'environ  $2:1$ , à comparer à environ  $1,3:1$  pour les états normalement déformés.

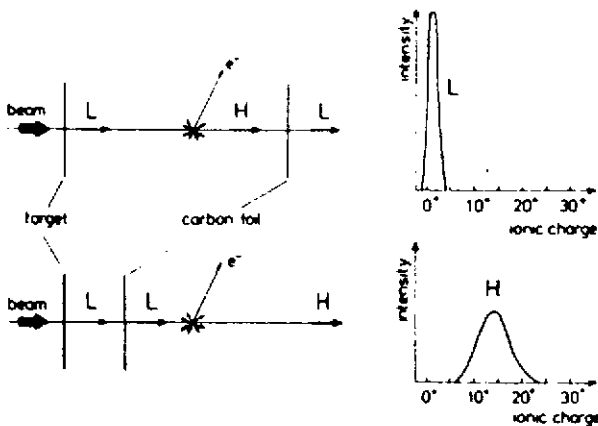


Fig.14. Principe de la méthode du plongeur de charge (L=petite charge ionique, H=grande charge ionique).

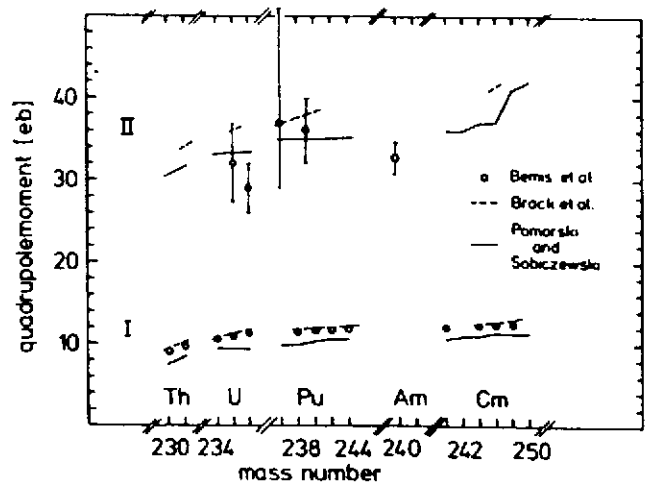


Fig.15. Moments quadrupolaires des actinides dans l'état isomérique et dans l'état fondamental, comparés à différents résultats de calculs.

Quand on augmente l'énergie d'excitation, on s'attend à trouver, après les états de rotation, des états de vibration. A la déformation de l'état fondamental, la décroissance de la bande  $\beta$  vers la bande de rotation du fondamental se fait via cinq transitions  $E0: 0\beta \rightarrow 0_f$  jusqu'à  $8\beta \rightarrow 8_f$ . Des raies  $E0$  de  $684,5\ \text{keV}$  et  $645,2\ \text{keV}$  ont été découvertes par le groupe de Heidelberg<sup>17</sup>) en coïncidence retardée avec la fission de  $^{236\text{m}}\text{U}$  et  $^{238\text{m}}\text{U}$ , respectivement. Ces raies sont interprétées comme la superposition de plusieurs transitions quasi-dégénérées en énergie et qui dépeuplent une bande  $\beta$  située à  $686$  et  $647,8\ \text{keV}$  dans l'un et l'autre de ces isotopes.

A plus haute énergie encore, l'existence d'un deuxième minimum dans la surface d'énergie potentielle donne naissance à plusieurs types de structures dans la dépendance en énergie de la probabilité de fission. D'abord le couplage des états vibrationnels dans le deuxième minimum, avec un espacement d'environ 0,7 MeV, aux états du premier minimum crée des grosses structures qui sont visibles dans la probabilité de fission sous barrière, même avec des réactions directes à relativement mauvaise résolution en énergie, comme les réactions (d,pf) (fig. 16)<sup>18)</sup>. Ensuite, au voisinage de l'énergie de liaison d'un neutron dans le premier minimum,

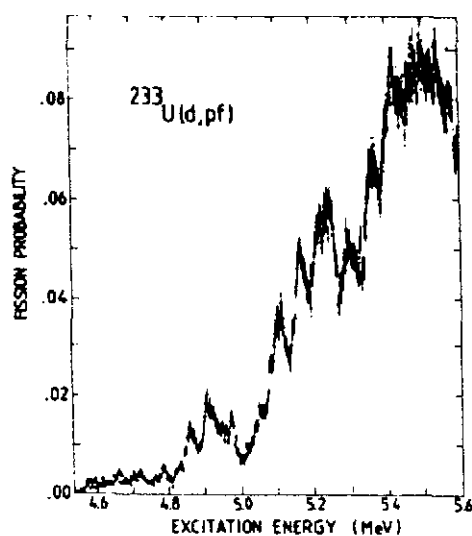


Fig.16. Probabilité de fission de  $^{234}\text{U}$  mesurée dans la réaction  $^{233}\text{U}(d,pf)$ .

où on dispose d'une résolution beaucoup meilleure en faisant varier l'énergie du neutron incident, on peut observer le couplage des états superdéformés qui ont un espacement voisin de 0,1 keV, avec les états normalement déformés qui ont une densité beaucoup plus grande. On a alors une exaltation des largeurs de fission de ces derniers quand leur énergie est quasiment dégénérée avec celle d'un niveau superdéformé de même spin et parité. Ceci donne des résonances de structure intermédiaire (fig. 17)<sup>19)</sup> qui fournissent une illustration claire des états-portes longtemps invoqués dans d'autres domaines de la physique nucléaire. En fait, ces états sont de vrais états-portes au sens géographique puisqu'ils constituent le point de passage obligé pour aller, dans l'espace de configuration, d'un noyau unique approximativement sphérique à deux fragments séparés.

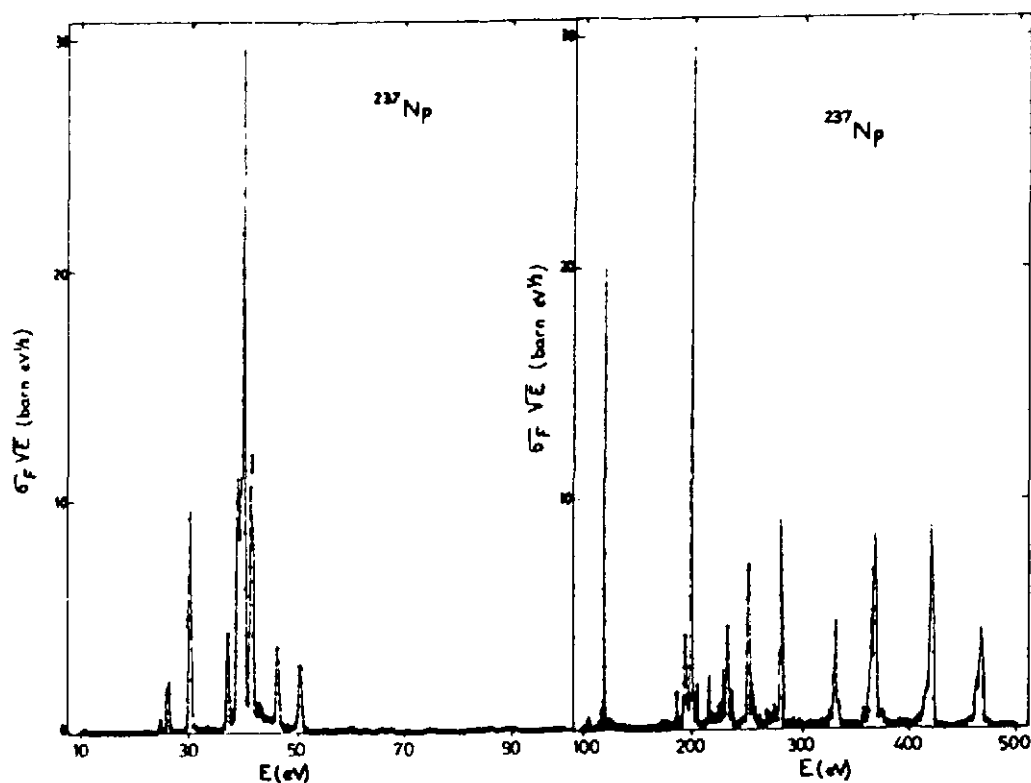


Fig.17. Section efficace de fission de  $^{237}\text{Np}$  pour des neutrons d'énergies comprises entre 10 et 500 eV. Les résonances fines correspondent à des états normalement déformés. Seules apparaissent ici celles dont l'énergie est voisine de l'énergie d'un état superdéformé ayant les mêmes nombres quantiques.

Enfin, il faut mentionner les états hyperdéformés qui sont situés dans un troisième minimum de la surface d'énergie potentielle et qui correspondent à un rapport d'axes  $c:a$  voisin de 3:1. Ces états ne sont pas des isomères, au sens habituel du terme, puisque leur durée de vie, voisine de  $10^{-19}$  s, n'est mesurable qu'à travers des largeurs de résonances. C'est effectivement sous la forme de résonances qu'ils apparaissent dans la section efficace de fission de  $^{230}\text{Th}$  pour des neutrons<sup>20,18</sup>. L'analyse de la section efficace fait apparaître une double bande de rotation avec un moment d'inertie  $2\theta I$  de  $500 \text{ MeV}^{-1}$ , à comparer à  $300 \text{ MeV}^{-1}$  dans le deuxième minimum (voir fig. 13). La double bande est l'indication d'une déformation octupolaire permanente de  $^{231}\text{Th}$  dans l'état hyperdéformé.

### Conclusions

Comme on l'a vu, on dispose d'une grande variété d'informations expérimentales sur les états superdéformés des noyaux lourds, que ce soit l'état "fondamental" ou les différents états excités. Toutes ces informations, à part l'existence même de la super déformation, sont conformes aux prédictions qu'on peut faire à partir des propriétés des noyaux normalement déformés. C'est un peu frustrant pour ceux qui pensent qu'en explorant un domaine nouveau on va nécessairement découvrir des phénomènes nouveaux. Mais c'est tout de même rassurant. Pendant longtemps, on a cru que la superdéformation était l'apanage des transuraniens où la conjonction accidentelle d'un effet de couche et d'un effet de goutte liquide produisait un minimum secondaire dans la surface d'énergie potentielle. On sait maintenant qu'on peut trouver des noyaux superdéformés dans d'autres régions de la table de masses. Pour les théoriciens, il est clair qu'il s'agit d'un même phénomène, auquel ils appliquent fondamentalement le même traitement. L'expérimentateur, de son côté, a plutôt tendance à y voir un phénomène différent tant les conditions physiques, expérimentales et historiques sont différentes. D'abord ces noyaux de  $Z < 90$  ont une barrière extérieure très élevée qui interdit toute désexcitation par fission. C'est donc un mode de détection tout à fait essentiel qui disparaît. Du même coup, la technique de détection devient très différente puisqu'on ne peut plus compter que sur la détection du rayonnement électromagnétique. Le tri nécessaire entre états superdéformés et normalement déformés demande alors des coïncidences multiples mettant en jeu un grand nombre de détecteurs, ce qui n'est pas le cas pour les noyaux fissiles.

Une autre différence, frappante, concerne le moyen de production. Toutes les recherches actuelles sur les noyaux superdéformés utilisent des faisceaux d'ions lourds. Or si, comme on l'a vu, ce sont des faisceaux d'oxygène et de néon qui ont les premiers attiré l'attention sur les isomères de fission, toutes les découvertes ultérieures et toutes les mesures ont utilisé des faisceaux de  $Z \leq 2$ . Ceci va à l'encontre de l'idée souvent répandue que la superdéformation est provoquée par le mécanisme même de l'interaction entre deux ions lourds. On voit bien néanmoins l'intérêt d'utiliser des ions lourds pour transférer une énergie et un moment angulaire importants: on alimente ainsi ces longues bandes de rotation auxquelles on est maintenant habitué. En comparaison, celle de  $^{240}\text{mPu}$  formé par réaction  $(\alpha, 2n)$  ne débute qu'au niveau  $8^+$ . Enfin, les états rotationnels sont les seuls états superdéformés connus actuellement dans les noyaux de  $Z < 90$ . On ne connaît pas d'autres états excités et on ne connaît même pas l'état fondamental de la bande rotationnelle, qui devrait être lui aussi un isomère similaire aux isomères de fission. C'est une situation stimulante qui montre qu'il y a encore du travail intéressant à faire en physique nucléaire de basse énergie.

Références

- 1) S.M. Polikanov et al., Soviet Physics JETP 15 (1962) 1016
- 2) G.M. Flerov et al., Soviet Physics JETP 18 (1964) 964
- 3) G.M. Flerov et al., Nucl. Phys. A97 (1967) 444
- 4) D.L. Hill et J.A. Wheeler, Phys. Rev. 89 (1953) 1102
- 5) V.M. Strutinsky, Nucl. Phys. A95 (1967) 420
- 6) R. Vandenbosch et K.L. Wolf, Physics and Chemistry of fission IAEA Vienne (1969) 439
- 7) S. Bjornholm et al., Nucl. Phys. A95 (1967) 513
- 8) P. Limkilde et G. Sletten, Nucl. Phys. A199 (1973) 504
- 9) V. Metag, Nukleonika 20 (1975) 789
- 10) P.A. Russo et al., Nucl. Phys. A240 (1975) 13
- 11) J. Kantele et al., Phys. Rev. C29 (1984) 1693
- 12) P.A. Russo et al., Phys. Rev. C3 (1971) 1595
- 13) W. Günther et al., Phys. Rev. C19 (1979) 433
- 14) M.H. Rafailovich et al., Phys. Rev. Lett., 48 (1982) 982
- 15) H.J. Specht et al., Phys. Lett. 41B (1972) 43
- 16) V. Metag et al., Physics Reports 65 (1980) 1
- 17) U. Goerlach et al., Phys. Rev. Lett. 48 (1982) 1160
- 18) J. Blons et al., Nucl. Phys. A477 (1988) 231
- 19) D. Paya et al., Physics and Chemistry of fission IAEA Vienne (1969) 307
- 20) J. Blons et al., Nucl. Phys. A414 (1984) 1

**UTILISATION PRATIQUE DES EXCITATIONS NUCLEAIRES  
A LONGUE DUREE DE VIE  
LE CRASER**

**D.COGNY**

CEA-CESTA - 33114 Le Barp

**RESUME**

Les noyaux, stables ou béta instables, présentent généralement dans leur spectre d'excitations des niveaux métastables "Isomères" dont les durées de vie varient de la pico seconde à quelques milliers d'années. L'intérêt suscité par ces Isomères s'explique aisément lorsque l'on songe à leur potentialité en tant que réservoir d'énergie. En supposant que l'on soit capable de les produire en nombre appréciable, la question posée est de trouver un mécanisme permettant de libérer cette énergie emmagasinée. Elle est abordée ici sur le thème du laser gamma. Dans la conclusion on s'efforce de montrer l'intérêt des isomères dans un cadre plus général.

**ABSTRACT**

The majority of nuclides, stable or béta unstable, have isomeric states whose lifetimes vary from some pico seconds to several years. The interest in Isomers becomes apparent when thinking about their potentiality as a reservoir of energy. Assuming that one is able to produce a sufficient number of such excited nuclei, the question remains to find a mechanism to release this energy. This question is discussed here by describing recherche of the last two decades on gamma laser. In the conclusion their practical use and scientific potentiality is presented in a more general context

**INTRODUCTION**

Dans leur majorité les noyaux ont la propriété remarquable de posséder dans leur spectre d'excitations des états métastables dont les durées de vie sont bien supérieures à celles rencontrées dans le spectre des Atomes. Pour donner un ordre de grandeur, rappelons qu'une transition X s'effectue en  $10^{-16}$  s, alors qu'une transition  $\tau$  pour les excitations nucléaires en question peut demander  $10^{-12}$  s voire des années dans certains cas. En ce qui concerne leur énergie elle varie typiquement entre quelques dizaines d'électron-volt et un Mev. Comme cas extrême, tant sur le plan énergie que sur le temps de vie,

mentionnons le Noyau de Hafnium 178 qui peut vivre 36 ans dans l'état  $16^+$  à 2.4 Mev au-dessus de l'état fondamental.

Le terme "Isomère" est utilisé pour désigner ces états métastables qui ont la propriété commune de vivre longtemps. L'origine de l'isométrie s'explique de façon différente selon que l'on invoque des arguments associés au spin ou à la structure particulière de l'état. Ainsi, dans un noyau sphérique, l'isomère est généralement un état dont le spin diffère notablement de tous les spins des niveaux de plus basse énergie. Dans de telles circonstances, il ne peut effectuer une transition qu'au prix d'un grand transfert de moment angulaire, ce qui est peu favorisé par l'ensemble des mécanismes possibles de décroissance tels que le radiatif, la conversion interne et la désintégration bêta. Dans les noyaux déformés le même genre d'argument s'applique, mais cette fois en raisonnant sur le nombre quantique K caractérisant la projection du moment angulaire sur l'axe de symétrie. Le terme "isomère de spin" est utilisé pour désigner ces excitations dans les noyaux sphériques et "isomère K" dans les déformés. Il existe d'autres cas où l'isométrie trouve son origine dans les propriétés de déformation de l'état isomère qui sont très différentes de celles des niveaux sur lesquels il serait susceptible de se désexciter, d'où l'expression "isomère de forme". Les seuls isomères connus entrant dans cette catégorie sont les isomères de fission découverts il y a une vingtaine d'années<sup>3</sup>). Leur durée de vie est comprise entre la nanoseconde et quelques millisecondes (23 ms dans  $^{232}\text{AM}$ ). Des expériences relativement récentes (1985) à DARESBURY suggèrent l'existence d'isomères de forme dans des noyaux plus légers. Il est fait ici allusion à deux grands thèmes traités dans cette école, à savoir les hauts spin et les superdéformations.

L'intérêt suscité par les isomères s'explique aisément lorsque l'on songe à leur potentialité en tant que réservoir d'énergie. Si l'on prend l'exemple du Rhenium 198, qui possède un  $8^+$  dont la durée de vie est de 300.000 ans on constate qu'il serait possible de stocker une énergie d'environ 1 Terajoule par litre pendant plusieurs milliers d'années. Bien sûr, cette constatation naïve et alléchante ne règle pas des problèmes pratiques de taille. En effet il faut pouvoir produire ces noyaux excités en nombre appréciable et surtout trouver un mécanisme de désexcitation afin de libérer l'énergie emmagasinée.

C'est ce dernier aspect que nous abordons maintenant en présentant sommairement les grandes lignes des travaux réalisés ces vingt dernières années, principalement en URSS et aux ETATS-UNIS, dans le domaine de la production cohérente de rayonnement Gamma. Pour l'essentiel l'exposé qui suit est basé sur l'excellent article de revue par G.I. BALDWIN, G.I. SOLEM, et V GOL'DANSKII

"Approaches to the Development of Gamma-Ray Lasers".<sup>1)</sup> Malheureusement certaines informations ont été prises dans des documents peu diffusés, comme c'est le cas de la référence 2

## LE GRASER

Le graser a pour but d'amplifier le rayonnement Electromagnétique à une fréquence précise ,cette dernière pouvant correspondre à des photons dans une gamme d'énergie de 10 à 100 Kev. Bien qu'en principe on pourrait amplifier au- dessus de 100 kev ,il y a de nombreuses raisons pratiques pour se limiter à cette valeur, comme nous le verrons par la suite.

Avant d'introduire les quelques notions indispensables pour orienter la discussion, il faut souligner que le Graser est un sujet complexe dont une compréhension globale nécessite des connaissances approfondies non seulement dans des domaines variés de physique fondamentale mais aussi dans des secteurs qui relèvent plus de la Haute Technologie. C'est un aspect qui n'est pas visible dans cet exposé car nous nous limitons à l'essentiel, par contre il est bien mis en évidence dans l'article de G.C. BALDWIN et Al <sup>1)</sup>.

### - I QUELQUES RAPPELS

Le principe de base de l'amplification d'un faisceau de photons n'est pas nouveau puisqu'il remonte à 1917 avec A.EINSTEIN qui prédit l'existence de l'émission induite et donne la relation entre cette dernière et l'émission spontanée:

$$B = \lambda^3 \cdot A. / (8 \cdot \pi \cdot h)$$

A et B sont les notations consacrées pour les coefficient de probabilité d'émission spontanée et induite. Cette relation est importante, car elle montre déjà que l'amplification par l'émission stimulée est d'autant plus difficile que la longueur d'onde est courte.

En fait, c'est le taux de transition qui nous intéresse, puisque c'est lui qui entre en jeu directement dans les équations donnant l'évolution du champ des photons et du peuplement des excitations nucléaires. Si l'on désigne par  $U(\nu)$  la densité d'énergie à la fréquence  $\nu$

$$U(\nu) = 8 \cdot \pi \cdot h \cdot \frac{\nu^3}{c^3} (e^{h\nu/k\theta} - 1)^{-1},$$

on peut montrer <sup>1)</sup> que le taux de transition stimulé à la résonance s'écrit:



$$B.U(\nu) = \sigma_r \cdot \phi$$

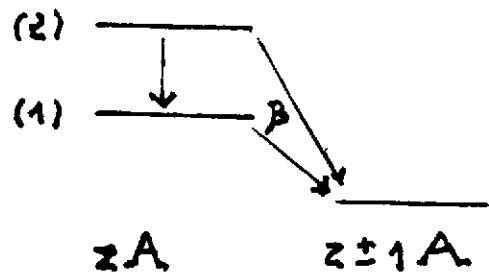
où  $\phi$  représente un flux de densité de photons et  $\sigma_r$  la section efficace radiative.

Cette expression en terme de section efficace est précieuse. Elle montre de façon simple comment interviennent les caractéristiques des niveaux nucléaires de la transition considérée. Sur un couple particulier de niveaux excités nous précisons le sens des ingrédients qui entrent dans la définition de  $\sigma_r$  :

$$\sigma_r = \frac{\Delta^2}{2\pi} \Gamma_r / \Gamma.$$

La figure 1 est un cas typique de deux niveaux nucléaires instables pour lesquels la transition radiative du niveau 2 vers 1 est en compétition avec la conversion interne et une autre voie de désexcitation par émission  $\beta$  existe pour 2.

Figure (1)



Pour cet exemple la largeur radiative s'écrit

$$\Gamma_r = (\beta / (1 + \alpha)) / T_2$$

où  $\alpha$  tient compte de la conversion interne,  $\beta$  est un rapport de branchement et  $T_2$  le temps de vie de 2. Enfin  $\Gamma$  désigne la largeur totale,  $\Gamma = 1/T_1 + 1/T_2$ . Le point important à retenir dans ce bref rappel c'est la dépendance de  $\sigma_r$  vis-à-vis du rapport  $\Gamma_r / \Gamma$ . Il est clair que l'on aura intérêt à choisir un couple de niveaux pour lequel ce rapport soit aussi proche de 1 que possible.

Jusqu'à présent nous avons discuté seulement ce qui contribue à amplifier l'intensité du faisceau. D'un autre côté cette amplification ne sera effective que dans la mesure où l'émission stimulée ajoute des photons plus rapidement qu'ils ne sont perdus par différents processus. On perd évidemment des photons par absorption résonnante qui est le processus inverse de l'émission stimulée, mais aussi par effet photoélectrique sur les électrons liés de l'atome. Il faut aussi tenir compte de la diffusion Compton sur les électrons libres. La somme des sections efficaces photoélectrique  $\sigma_{ph}$  et COMPTON  $\sigma_c$  définit la section efficace non résonnante des pertes ( $\sigma_a = \sigma_{ph} + \sigma_c$ )

Il est important de rappeler l'expression approchée de  $\sigma_{ph}$  pour des photons de haute énergie :

$$\sigma_{ph} \approx Z^{4.5} \Lambda^3$$

A ce stade il est intéressant de tracer le rapport  $\frac{\Lambda^2}{2\pi\alpha}$  de la section efficace d'émission stimulée avec la section efficace totale des pertes en fonction de l'énergie des photons. Sur la figure 2, empruntée à la référence 1, il est visible que ce rapport est très favorable pour des énergies comprises entre 10 et 100 Kev et qu'au-delà de 1 Mev l'opacité devient trop forte pour qu'il soit possible d'amplifier quelque soit le matériau.

Après ce bref rappel nous sommes en mesure d'aborder les problèmes de l'amplification sur un schéma classique de graser.

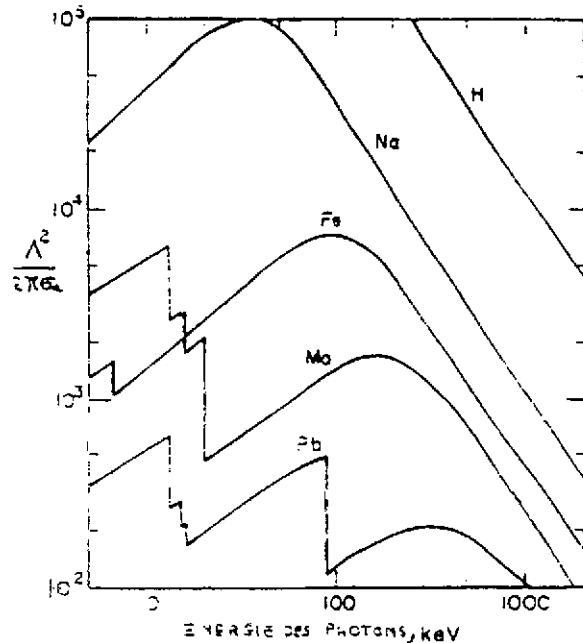


Figure extraite de la référence 1  
FIGURE 2

## -II DEFINITION D'UN SCHEMA GRASER

Pour suivre l'évolution des recherches dans ce domaine il convient de partir d'un schéma dont la définition est très proche de celui des lasers classiques.

Ses caractéristiques sont les suivantes:

- Un milieu actif qui n'est autre que l'ensemble des noyaux choisis pour émettre le rayonnement.
- Un "HOST" qui peut être un filament ou un barreau dans lequel est dispersé le milieu actif.
- Une pompe qui excite le milieu actif afin de réaliser une inversion de population sur les niveaux de la transition choisie pour laser.

Une description complète de la dynamique d'un tel système est fournie par les équations de MAXWELL et de SCHRÖDINGER qui donnent

respectivement, l'évolution dans le temps des degrés de liberté associés aux champs de photons et aux excitations nucléaires respectivement. Il s'agit d'un ensemble d'équations couplées qui en toute généralité ne peuvent être résolues que numériquement. Néanmoins il nous a semblé intéressant de les donner pour plusieurs raisons. D'une part il est instructif de comprendre comment elles font intervenir les ingrédients définis au chapitre précédent et ceux correspondants au schéma étudié, voir la figure 3.. D'autre part nous verrons qu'elles fournissent des informations précieuses dans certains régimes extrêmes.

A l'approximation d'une variation lente de l'amplitude à l'échelle de la longueur d'onde l'enveloppe du potentiel vecteur vérifie l'équation:

$$\partial_x A_e + 1/c \partial_t A_e = -N \sigma_a / 2 A_e + \dot{P} / (2c \epsilon_0 \Omega),$$

où le courant de polarisation  $\dot{P}$  obéit à l'équation,

$$\partial_t \dot{P} + (i(\Omega - \Omega_{12}) + \Gamma/2) \dot{P} = \frac{N^*}{\hbar} |P_{12}|^2 A_e$$

Quant aux équations donnant l'évolution du nombre de noyaux excités dans les états 1 et 2 elles s'écrivent:

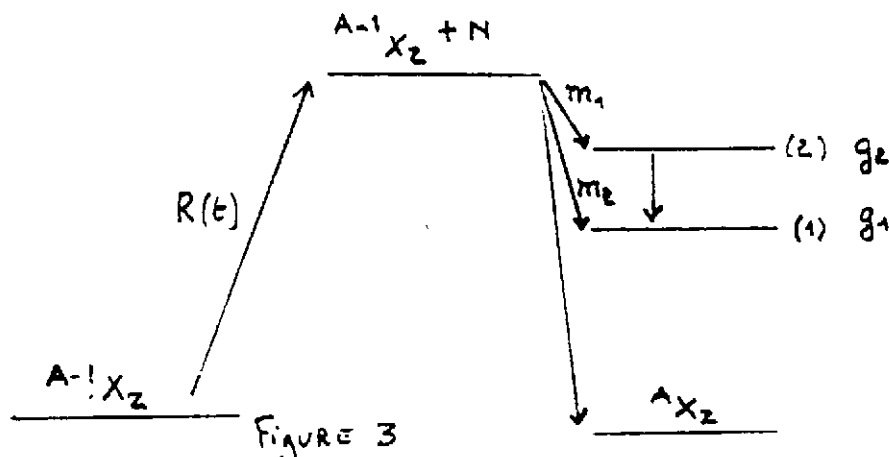
$$\partial_t N_2 + 1/T_2 * N_2 = m_2 * R(t) - n * c * \sigma_r * N^*$$

$$\partial_t N_1 + 1/T_1 * N_1 - \beta/T_2 * N_2 = m_1 * R(t) + n * c * \sigma_r * N^*$$

Dans ces expressions,  $R(t)$  est la fonction de pompage,  $m_1$  et  $m_2$  des coefficients qui tiennent compte de l'efficacité de la pompe selon le niveau et enfin  $n$  désigne la densité de photons. Enfin,  $N^*$  est donné par l'expression:

$$N^* = N_2 - N_1 * (g_2/g_1)$$

La figure 3 ci-dessous permet de comprendre le schéma adopté.



Elle illustre en particulier comment réaliser une inversion de population en utilisant comme pompe un faisceau de neutrons. On constate qu'elle se fait en plusieurs étapes. Le noyau parent  $A-1X^Z$  capture un neutron thermique pour former le noyau composé  $A-1X^{Z+N}$  qui se désexcite en cascade pour donner le fils dans les états 1 et 2. On conçoit alors que le coefficient de pompage  $R(t)$  soit directement relié à la section efficace thermique de capture de neutrons et que les coefficients  $m_i$  (rapport d'isométrie) dépendent de la façon dont s'effectue la cascade. Les méthodes de pompage et les problèmes qu'elles soulèvent constituent un vaste sujet en soi qui déborde le cadre de cet exposé. On trouvera dans la référence 1 une discussion très complète sur ce thème.

Comme nous l'avons déjà mentionné, la dynamique du système formé par les noyaux en interaction avec le champ de photons est un problème difficile à résoudre en particulier dans le régime transitoire. Par contre, si l'on suppose qu'un régime quasi permanent est atteint, c'est-à-dire tel que les variations dans le temps du champ de photons et des populations  $N_1, N_2$  soient négligeables, alors il devient possible de tirer des informations précieuses des équations précédentes. En effet, l'équation de MAXWELL combinée avec celle sur le courant de polarisation  $P$  donnent dans cet hypothèse une expression simple du flux de photons:

$$\phi(x) = \phi(0) e^{(N^* \sigma_r - N \sigma_a) x}$$

Cette expression montre clairement qu'une condition nécessaire de "lasage" est donnée par l'inégalité:

$$N^* \sigma_r > N \sigma_a$$

D'après la discussion du Chapitre I, la section efficace  $\sigma_r$  est proportionnelle au carré de la longueur d'onde. En outre dans le domaine de longueurs d'ondes considérées, les pertes sont dues essentiellement à l'effet photoélectrique, donc  $\sigma_a$  est proportionnelle au cube. Il en résulte que le comportement de la densité critique d'inversion est linéaire en

$\Lambda$

$$N^* \approx \Lambda$$

On peut définir par ailleurs le taux de pompage

$$R \approx N^* / \tau \approx \Lambda / \tau$$

la puissance minimum de pompe pour atteindre la densité critique d'inversion,

$$P \approx h\nu R \approx \Lambda / \tau$$

Ces grandeurs sont essentielles pour comprendre l'historique du programme graser que nous abordons dans le prochain Chapitre.

### **- III LES DIFFERENTES APPROCHES DU GRASER CES VINGT DERNIERES ANNEES**

D'après les formules obtenues à la fin du Chapitre précédent, il apparaît que la densité d'excitation critique décroît comme la longueur d'onde. Par ailleurs la puissance minimum de pompage pour créer cette excitation est inversement proportionnelle au temps de vie de la transition. Il est clair qu'en raison de leur temps de vie, beaucoup plus varié et plus long que dans les atomes, les transitions Nucléaires offrent bien des avantages aux courtes longueurs d'onde.

En dépit de ces aspects favorables le Graser reste encore aujourd'hui un dilemme pour un ensemble de raisons que nous évoquons maintenant.

#### **-1 Le fonctionnement d'un graser diffère nécessairement de celui d'un laser**

Pour comprendre les difficultés, il est indispensable d'évaluer la puissance de pompe nécessaire pour contrebalancer l'émission spontanée. On distinguera deux situations suivant le temps de vie de l'isomère.

Pour des temps de vie courts, inférieurs à la seconde, en introduisant des valeurs raisonnables dans l'expression donnant le gain ( $N=3 \cdot 10^{+22} \text{cm}^{-3}$ ,  $\sigma_a = 5 \cdot 10^{+3} \text{b}$ ,  $\sigma_r = 1,5 \cdot 10^{+6} \text{b}$ ,  $\Gamma_r/\Gamma=1$ .) et en considérant une transition de 12 Kev on trouve  $N_2 = 10^{+20}$ , c'est à dire une énergie stockée de l'ordre de 200 KJ  $\text{cm}^{-3}$ . Les puissances requises pour obtenir un gain sont donc considérables, de l'ordre de 200 Kw minimum. Indiquons dès à présent qu'avec le schéma correspondant à la figure 3 il faudrait des flux de neutrons thermiques d'au moins  $10^{21}$  neutrons  $\text{cm}^2 \text{s}^{-1}$ , valeur astronomique compte tenu des sources dont on dispose aujourd'hui de l'ordre de  $10^{16}$  neutrons.

Les temps de vie longs auraient l'avantage de conduire à des puissances beaucoup plus raisonnables, mais il s'avère malheureusement que le rapport des largeurs  $\Gamma_r/\Gamma$  ne permet plus d'obtenir un gain. Ceci est vrai pour un noyau isolé mais la situation peut être différente dans un cristal comme nous le verrons par la suite.

Un autre aspect qui n'a pas été discuté jusqu'à présent c'est l'effet de recul et l'élargissement des raies avec la température ("Doppler-Recoil effect").

Lorsqu'un Atome émet ou absorbe un photon il est bien connu qu'il recule avec une énergie donnée par la relation:  $E_R = (h\Omega)^2 / (2Mc^2)$  où  $\Omega$  est la fréquence de la transition. C'est une conséquence directe de la conservation de l'énergie et de l'impulsion. Dans le domaine optique cette effet est négligeable, mais pour les transitions nous concernant, il est clair que les spectres d'émission et d'absorption sont notablement décalés respectivement vers le haut et vers le bas (voir figure 4 ci-dessous). En outre sous l'effet de l'agitation thermique les atomes sont en mouvement avec une distribution de vitesse, ce qui provoque un élargissement des spectres.

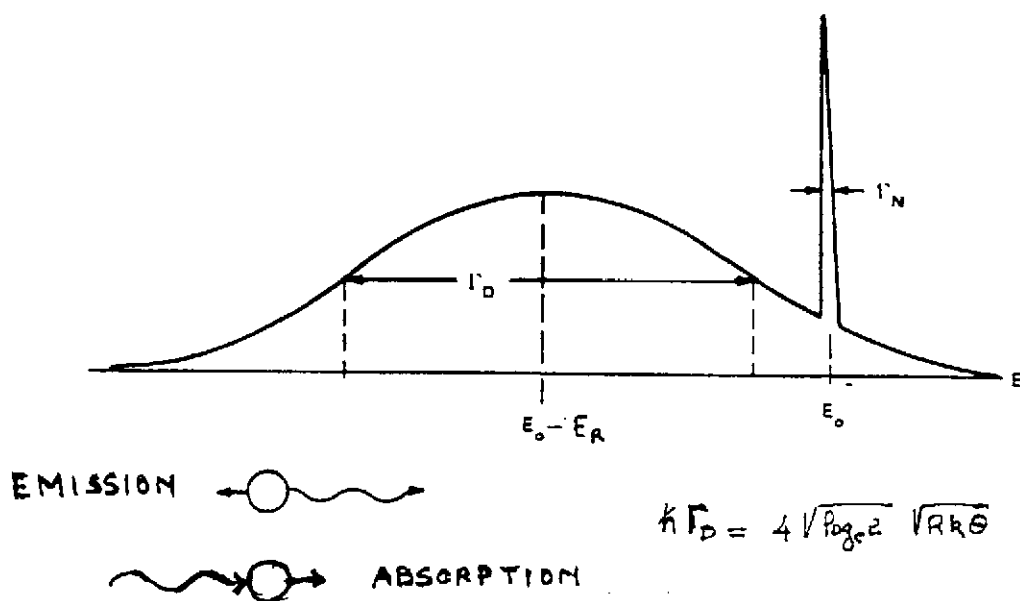


Figure 4

L'effet Döppler est sans aucun doute néfaste puisqu'il contribue à diminuer la densité d'énergie radiative dans le domaine de fréquence que l'on souhaite amplifier. Par contre la situation est moins nette concernant le recul du noyau. En effet, avec un recul suffisant et une température assez basse, le recouvrement des spectres d'absorption et d'émission peut devenir très faible. C'est un facteur positif, puisque dans de telles conditions, l'absorption résonnante devient négligeable et il n'est plus besoin de réaliser une inversion de population. Au passage, la littérature sur le sujet, donne l'impression qu'il ne peut y avoir d'émission stimulée si le noyau recule. En fait il n'en est rien si les noyaux sont tous au repos les uns par rapport aux autres, ou pratiquement. C'est sur ce genre d'observation que repose le schéma graser avec recul dans un milieu gazeux <sup>4)</sup>. Le milieu actif est un faisceau relativiste d'atomes que l'on irradie avec des lasers de puissance. L'idée semble astucieuse puisqu'elle permettrait à la fois d'exciter le niveau sur lequel on veut laser et de faire en sorte que les atomes dans le faisceau soient pratiquement au repos. A l'heure actuelle, ce dernier point est difficile à réaliser car il faudrait atteindre des temps de refroidissement par laser beaucoup plus petits que le temps de vie de la transition nucléaire considérée.

Pour être complet, on ne peut manquer de faire allusion au temps de réponse d'un système résonant. A l'encontre des lasers optiques qui utilisent des raies élargie par l'effet Doppler, nous utilisons des résonances étroites et en conséquence le temps de réponse est lent. Cet aspect, lié à la cinétique décrite par les équations données au Chapitre II, n'est pas en faveur d'un pompage direct.

En résumé, les puissances mises en jeu, les caractéristiques des transitions nucléaires très différentes de celles rencontrées dans les Atomes ou les molécules, des aspects associés à la cinétique, sont autant de raisons qui font qu'un graser ne peut être une simple extension du laser à des plus courtes longueurs d'ondes. Ceci explique qu'un programme sur ce sujet n'ait vu réellement le jour qu'après la découverte par MOSSBAUER en 1958 d'une propriété dans les solides qui ouvrait de nouvelles perspectives.

## **- 2 Le GRASER-MOSSBAUER**

Les travaux de MOSSBAUER révélèrent que le spectre de désexcitation d'isomères dans un solide contenait des raies très fines, pratiquement à l'énergie des transitions nucléaires. C'était donc une indication, que pour certaines

transitions dans un solide, le rapport des largeurs  $\Gamma_r/\Gamma$  pouvait être favorable et le recul du noyau négligeable.

Un autre aspect intéressant, unique à cette région du spectre où les longueurs d'ondes sont comparables à l'espacement entre les atomes, est la diffraction de BRAGG. Sous certaines conditions les photons sont canalisés par les plans du réseau cristallin et n'interagissent pratiquement pas avec les atomes du réseau, c'est l'effet BORRMANN. Dans cette situation les pertes sont considérablement réduites de telle sorte que la condition à satisfaire sur la densité d'excitation critique est beaucoup moins contraignante. Cet effet comme l'effet MOSSBAUER dépendent de façon critique de la température par l'intermédiaire du coefficient de DEBEY-WALLEN.

A quelques exceptions près, les concepts proposés pour l'émission cohérente de radiations gamma reposent sur l'effet MOSSBAUER et l'article de revue par BALDWIN et GOL'DANSKII est consacré essentiellement à ce type de lasers qu'ils ont convenu d'appeler "MOSSBAUER LASERS"

On se contentera de résumer ici les conclusions de cet article qui couvre une vingtaine d'années de recherches dans le domaine.

De nouveau il faut distinguer deux grandes classes de concepts selon le temps de vie de l'isomère

Dans le cas d'un niveau de vie court, la largeur de la raie est pratiquement la largeur naturelle, ce qui rend possible l'obtention d'un gain à partir d'une inversion de population. Malheureusement, comme nous l'avons mentionné plus haut, elle ne peut être réalisée qu'avec une puissance de pompe considérable, pompage qu'il faut réaliser in situ puisque le temps de vie de l'isomère en question est court. Dans ces conditions le cristal-hôte qui accueille les isomères risque de chauffer au point qu'il soit endommagé, voire détruit avant même de laser.

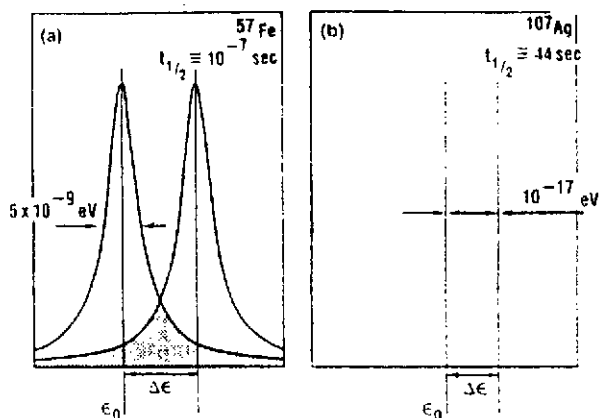
D'un autre côté, en considérant des isomères à temps de vie long le problème du pompage ne se pose plus puisque l'on a tout le temps de les préparer, de les séparer et de les implanter dans un cristal hôte. Cependant un cristal n'est jamais parfait au point que des noyaux à différents sites dans le cristal aient exactement le même environnement. En conséquence la position et l'élargissement des raies varient localement dû à l'inhomogénéité du cristal. Les causes de cet élargissement inhomogène, amplement



discutées dans la référence 1, sont liées à des interactions hyperfines entre électrons et noyaux. La figure 5 illustre les effets néfastes de l'élargissement inhomogène. Elle montre que la largeur naturelle de l'isomère doit excéder le déplacement des raies afin qu'il y ait un recouvrement non négligeable entre les résonances du noyau émetteur et celui qui absorbe. L'expérience montre que pour des temps de vie supérieurs à la micro-seconde il n'est plus possible de satisfaire cette condition.

- (a) Bon isotope MOSSBAUER
- (b) Mauvais isotope MOSSBAUER

(Figure 5)



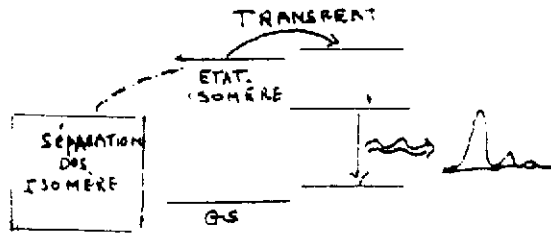
Jusqu'à présent l'effet MOSSBAUER semble poser plus de problèmes qu'il n'en résout. Cependant, bien que les avis soient partagés <sup>1,5)</sup> sur les possibilités de réduire les effets d'élargissement inhomogène, certaines expériences utilisant les techniques de résonance magnétique ou celles de spectroscopie de mélange de niveau semblent prometteuses<sup>5)</sup>.

Nous concluons cet exposé en présentant le concept en deux étapes "two step concept" sur lequel portent les travaux les plus récents.

### -3 Le Schéma en deux étapes ( TWO STEP CONCEPT )

Comme nous venons de le voir le dilemme du graser MOSSBAUER est de rendre compatible une puissance de pompe faible tout en gardant l'effet MOSSBAUER pour la transition choisie. Le "TWO STEP CONCEPT" vise à régler cette question grâce au schéma en deux étapes décrit dans la figure ci- dessous (figure 6)..

(Figure 6)



La première étape consiste à pomper au préalable des noyaux dans un isomère à long temps de vie et de les implanter dans un cristal. De cette façon on règle le problème de la pompe puisque l'on réalise dans cette étape l'inversion de population. La deuxième étape consiste à faire basculer l'ensemble sur un niveau à courte durée de vie, très proche de l'isomère. C'est à partir de ce niveau que l'on espère laser. Le fait qu'il soit à courte durée de vie règle les difficultés associées à l'élargissement inhomogène.

Si le transfert est rapide, on peut s'attendre à ce que le système se désexcite collectivement avec une émission intense de rayonnement différé d'un temps  $T_D$ . Ce temps correspond à l'établissement d'un régime dans lequel un grand nombre de noyaux participent au rayonnement, ce qui implique un temps de transfert beaucoup plus petit. C'est le phénomène de super-radiance prédit par R.H. DICK<sup>6)</sup>, qui est interprété par M.S. FELD<sup>7)</sup> comme le cas limite du processus d'émission stimulée. Il s'agit en fait du régime transitoire des équations données plus haut dans l'approximation où les variations de courant de polarisation et de l'inversion de population sont grandes devant les termes de décroissances. La figure 7 du pulse dû à un phénomène de super-radiance..

$T_{SP}$  Temps de la désexcitation spontanée

$T_R$  Temps de la désexcitation collective

$\frac{n_0 R^2 L}{8\pi}$  Nombre d'atomes dans un barreau de rayon R et de longueur L

$$T_R = T_{SP} / (n_0 R^2 L / 8\pi)$$

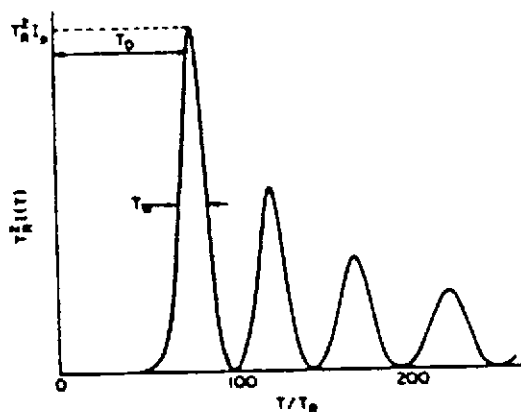


Figure 7

En effet il faut réaliser la seconde étape avec un minimum de puissance si l'on ne veut pas retomber dans les problèmes de chauffage maintes fois évoqués. Ceci implique l'existence d'un niveau dont l'énergie soit voisine de celle de l'état isomère. Par ailleurs, puisqu'il faut trouver un mécanisme de transfert efficace et rapide, il est souhaitable que son moment angulaire ne diffère pas trop de celui de l'isomère. Cet ensemble de conditions représente une contrainte sérieuse sur le choix d'un noyau.

En ce qui concerne le mécanisme de transfert de nombreuses propositions plus ou moins réalistes ont été faites.

Pour commencer par les moins réalistes mentionnons:

- Les processus d'absorption multiphotoniques pour réaliser des transitions nécessitant quelques unités de moment angulaire. Ce n'est pas très sérieux compte tenu des faibles sections efficaces

- l'excitation cohérente du cortège électronique de l'atome par laser. Des études<sup>8)</sup> montrent que l'on a de grandes chances d'ioniser avant même d'induire des transitions nucléaires.

Enfin, parmi les propositions les plus sérieuses, il faut citer:

- Utilisation de neutrons lents sur l'état isomère et peuplement du niveau voisin par désexcitation du noyau composé. Mis à part le problème d'un flux de neutrons suffisants, il n'est pas clair qu'un tel mécanisme soit suffisamment rapide.

- Absorption résonante de photons émis par une source laser X<sup>9)</sup>. De grands progrès sont réalisés chaque année dans le domaine des sources X. Peut-être aura-t-on un jour la chance d'avoir une raie X à la bonne longueur d'onde.

- les électrons pourraient aussi être un moyen de réaliser le transfert dans la mesure où l'on trouverait des niveaux très proches en énergie.

Une liste exhaustive de l'ensemble des mécanismes proposés dans ce domaine dépasse largement le cadre de ce cours. Nous renvoyons le lecteur à l'article cité dans la référence 1 et au compte rendu cité en 2.

## CONCLUSION

A la lecture des différents articles et rapport sur le graser il est très difficile de se faire une idée sur l'état d'avancement d'un tel programme. La difficulté vient en particulier du fait qu'il s'agit d'un sujet pluridisciplinaire où chaque discipline entre en jeu à son plus haut niveau. En lisant l'article de P.L DYER et G.C. BALDWIN dans LA RECHERCHE<sup>10)</sup> il semble cependant que l'on ne s'avance pas trop en disant qu'un laser gamma n'est pas pour demain. Les auteurs relatent une expérience qui leur a permis de créer un échantillon riche en noyaux de Mercure dans un état excité et en concluent que le graser n'est plus une utopie. Certes il s'agit d'une étape importante, mais comme nous l'avons vu, celles qui restent à franchir sont de taille. Ceci étant dit l'auteur de ce cours doit signaler que ses sources d'informations s'arrêtent fin 1988 et surtout qu'il n'a pas accès à la littérature classée.

Outre le fait que l'on ne peut ignorer l'importance d'un tel sujet, le graser a été surtout choisi pour illustrer l'intérêt pratique des isomères. D'un autre côté, il faut souligner que leur intérêt ne s'arrête pas à cette seule application, mais qu'il en existe bien d'autres. Cette conclusion nous donne l'occasion de présenter dans un cadre plus général un ensemble de recherches basées sur leur utilisation.

La diffusion de neutrons sur des niveaux excités se caractérise par un ensemble de propriétés très différentes de celles observées dans une diffusion classique sur un noyau dans son fondamental.

Des études théoriques<sup>11)</sup> révèlent par exemple, que des noyaux dans des états excités se comportent selon les cas, comme des modérateurs ou des accélérateurs de neutrons. En augmentant ou en diminuant le seuil de réactions de fission, certains auteurs<sup>12)</sup> voient dans les isomères la possibilité de changer le mode de fonctionnement des réacteurs.

Une autre propriété importante concerne le rapport des sections efficaces de capture et de diffusion inélastique. Si cette dernière est grande devant celle de capture, on pourrait peut être recycler plusieurs fois les neutrons et recueillir de cette façon l'énergie stockée. En supposant qu'une telle situation se présente on disposerait de sources radiatives à haute densité d'énergie. Ce genre de recherche entre dans le cadre de travaux sur les matériaux à haute densité d'énergie.

Il faudrait aussi mentionner une grande activité dans un domaine combinant les isomères et plasma chaud. Il y a des applications diverses, dont en particulier : le diagnostique plasma<sup>13)</sup>, l'initialisation de la fluorescence d'isomères à

longue durée de vie<sup>14)</sup> et enfin des études de mécanisme des transitions nucléaires induites par les électrons<sup>15)</sup>.

De toute évidence, le rôle de la physique nucléaire est capital dans l'ensemble des recherches que nous venons d'évoquer. L'utilisation des isomères repose sur une compréhension approfondie des mécanismes qui permettent de les produire et de les désexciter. Dans les deux cas, et quels que soient les mécanismes envisagés, il faut des informations précises sur, les niveaux existant à proximité et leurs caractéristiques, et plus généralement sur, les densités de niveaux, les résonnances, etc...

Au niveau de précision requise les informations que l'on peut tirer des modèles nucléaires ne sont pas suffisamment fiables. En effet, Il est exclu de prédire par la théorie des niveaux à mieux de quelques centaines de Kev. Dans le noyau de  $^{186}\text{Re}$  par exemple, une étude théorique prédit un  $7^-$  à 40 Kev du  $8^+$  cité en introduction alors qu'une autre le trouve à environ 400 Kev. De la même façon on peut douter à propos des densités de niveaux obtenues à partir de modèles statistiques. Elles sont sensibles à un certain nombre d'ingrédients et par ailleurs, il n'est pas clair qu'un niveau de structure compliquée n'échappe pas à une telle description. Autrement dit, des données acquises à partir d'expériences sont indispensables pour faire avancer ces recherches. C'est le réquisitoire que l'on trouve dans beaucoup de papiers de revue sur le sujet ou que l'on entend dans les conférences.

Tant sur le plan expérimental que théorique, il y a autour des isomères une physique particulièrement riche. Espérons que dans un proche avenir elle sera abordée avec les moyens expérimentaux dont on dispose aujourd'hui sans oublier les outils puissants de demain dans le domaine de la détection gamma.

### Remerciements

Je remercie les organisateurs pour leur invitation et particulièrement P. QUENTIN qui m'a suggéré de donner ce cours. C'est M.S. WEISS qui m'a incité à travailler sur les sources d'énergie radiative durant mes visites au LAWRENCE LIVERMORE NATIONAL LABORATORY, qu'il trouve ici l'expression de ma gratitude. A travers Monsieur R. DAUTRAY, Directeur Scientifique du CEA, et Monsieur M. LAUNOIS, Directeur du CESTA, Je suis reconnaissant au Commissariat à l'Energie Atomique de me procurer la possibilité de collaborer régulièrement avec le LLNL.

REFERENCES

- 1) G.C. Baldwin, J.C. Solem, V.I. Gol'danskii, Rev. Mod. Phy, Vol 53, No 4, Part I, October 1981
- 2) Proceeding of the IST/IDA "GAMMA RAY LASER" WORKSHOP. IDA Memorandum Report M-162. January 1986.
- 3) D. Paya Cours sur les isomères de fission à cette école.
- 4) L. Cohen "Graser with recoil" J. Quant. Spectroscop. Radiat. Transf. Vol 40, No 6,p.v,1988
- 5) B. Balko "Lasing directly from a isomeric level" Même référence qu'en 4
- 6) R.H. Dicke, Phys. Rev., 93, 99 (1954)
- 7) M.S. Feld and J.C. Mac Gillivray, In Coherent Nonlinear Optics, Recent Advances, M.S Feld and V.S Letokhov, eds(Springer, Berlin, 1980)
- 8) J.F. Berger, D.M. Gogny, and M.S. Weiss, Phys.rev.A, vol 43, 455 (1991)
- 9) B. Yaakobi, S. Letzring, J.M. Soures, F.J Marshall and M.C. Ricardson (L.L.E) - G.B. Collins and S.S. Wagal Texas-University  
I.D.A Memorendum Report M-162
- 10) P.L. Dyer et G.C. Baldwin, La Recherche - Vol 18 1237 (1987)
- 11) Y.U.W. Petrov and A.I. Shlyakhter - Sov. J. Nucl. Phys.Vol 23, No.6 June 1976
- 12) YU.V. Petrov Symposium on Neutron Studies of Nuclear Reactions in Vienna (1960)
- 13) R.V. Artyunvan, L.A. Bolshov and E.V. Tkalya, Sov. Phys. Dokl 33 (3) March 1988
- 14) R.V. Artyunvan and L.A. Bol'shov Sov. Phys. Dokl 34 (4) April 1989.  
V.I. Gol'danskii and V.A. Namiot YETP Lett. Vol 23 N8 9.5 May 1976



## FORMES NUCLEAIRES ET PHYSIQUE ATOMIQUE

*Gerhard Huber, Institut für Physik  
Universität Mainz, R.F. Allemagne*

### Résumé

Ce cours donne une introduction au déplacement isotopique et aux variations du rayon quadratique moyen de charge pour des noyaux instables, mesurés par des méthodes optiques laser. S'y ajoutent spins et moments statiques mesurés par les memes procédés atomiques. Les résultats présentés servent à démontrer quelques aspects récents, mais aussi à caractériser les régions de formes rigides se prêtant à des modèles nucléaires cohérents au contrast des formes instables et dont la bonne compréhension fait à présent défaut.

### Abstract

This lecture presents a introduction to the optical isotope shift and the mean squared charge radius of unstable nuclei, observed by laser optical methods which also give access to spins and static moments. Some recent aspects of experimental results are given. A survey on regions of stable shapes well described by nuclear models is shown as contrast to unstable shapes, which are still difficult to understand from isotope shift and static moments.

### Introduction

Until now experimental nuclear physics is always performed in presence of atomic electrons in targets, heavy ions and radioactive sources. Generally the large difference in hadronic and electronic binding energies allow to separate nuclear and atomic structure to a reasonable extent. In special cases however the nuclear structure can be observed by laser spectroscopy as minute changes in the atomic system. The interest in such a indirect nuclear study relies on the high sensitivity of laser spectroscopy. Using procedures on-line with the production it is possible to collect informations directly related to nuclear shape in a large region of the valley of  $\beta$ -instability<sup>1)</sup>. In principle this on-line laser spectroscopy of radioactive atoms allows to study nuclear groundstates and isomeric states as far as their lifetime and the production process allow to prepare sufficient amounts of atoms in the appropriate electronic states.



## Hyperfine Structure and Isotope Shift

The nuclear structure information transferred to the atomic shells is visible in the hyperfine structure (HFS) of atomic levels and the optical transitions between them and the isotope dependent shift (IS) of some spectral lines. Formally the hyperfine energy can be expressed as products of atomic and nuclear factors

$$(1) W_{\text{HFS}} = A \cdot K/2 + B \cdot (3K(K+1) - 4I(I+1)J(J+1))/8I(2I-1)(2J-1)$$

$$\text{with } K = F(F+1) - I(I+1) - J(J+1)$$

$$\text{and } A = \mu_I/I \cdot \langle H(0) \rangle/J \quad B = eQ_S \cdot \langle \varphi_{ZZ} \rangle$$

where I, J are nuclear and electronic spins,  $\mu_I$ ,  $eQ_S$  are the static nuclear magnetic dipole and electric quadrupole moments projected on the nuclear spin I axis and finally  $\langle H(0) \rangle$ ,  $\langle \varphi_{ZZ} \rangle$  represent the atomic magnetic field and the electric field gradient projected on the spin J axis.

For a pure electronic state  $|nlj\rangle$  the magnetic A factor reads

$$(1a) A_{nlj} = \mu_I/I \cdot \mu_O/4\pi \cdot 2\mu_B l(l+1)/j(j+1) \langle r^{-3} \rangle_{nl} \times \\ F_j(Z_i) (1-\delta) (1-\epsilon)$$

for orbital momentum  $l \neq 0$  and

$$(1a^*) A_{ns} = \mu_I/I \cdot \mu_O/4\pi \cdot 2\mu_B 8\pi/3 \langle \psi^2(0) \rangle_{ns} \times \\ F_{1/2}(Z) (1-\delta) (1-\epsilon)$$

for orbital momentum  $l = 0$

where the factors in the lower line represent the relativity correction for the atomic factor  $\langle r^{-3} \rangle_{nl}$  or  $\langle \psi^2(0) \rangle_{ns}$  then the Breit- Crawford- Schawlow correction for the electron density by the finite nuclear size and finally the Bohr- Weiskopf effect for the extended nuclear magnetisation.

The atomic factors may be given by the semiempirical Goutsmit Fermi Segrè relations

$$(1r) \langle r^{-3} \rangle_{nl} = a_o^{-3} Z_i Z_a^2 / n_{\text{eff}}^3 \\ (1s) \langle \psi^2(0) \rangle_{ns} = Z_i Z_a^2 / a_o^3 (1 - d\sigma/dn) / n_{\text{eff}}^3 \\ \text{with } n_{\text{eff}} = n - \sigma = (Ry \cdot Z_a^2 / E_n)^{1/2}$$

The B factor containing the electric quadrupole moment is expressed by

$$(1b) B_{nlj} = eQ_S \cdot e/4\pi\epsilon_O (2j-1)/(2j+2) \langle r^{-3} \rangle_{nl} R_{1j}(Z_i) \\ (1b^*) Q_S^{\text{corr}} = Q_S/(1-R)$$

with the relativity correction  $R_{1j}(Z_i)$  and the so-called Sternheimer correction R for the quadrupole core polarisation of the inner atomic shells.

The optical isotope shift IS is the sum of a purely atomic part called mass shift and a nuclear part called volume shift.

The first part is a consequence of the nuclear motion in the center of gravity system. In one lepton systems this (normal) mass shift is expressed by the reduced mass but in many electron atoms the nuclear kinetic energy is influenced additionally by electron correlations giving rise to the specific mass shift, which cannot be calculated with sufficient confidence to isolate the volume part of the IS. Instead a comparison with IS in other transitions, the so-called King plot must be used.

The volume shift is described by

$$(2) \quad dE_{\text{vol}} = \frac{2\pi}{3} Z e^2 \langle \Psi_S(0) \rangle^2 d \langle r^2 \rangle_{\text{ch}}^{AA'} f(Z)$$

where  $\langle \Psi_S(0) \rangle^2$  is the electron density at the nucleus

and  $d \langle r^2 \rangle_{\text{ch}}^{AA'}$  the variation of the rms charge radius between the isotopes A and A'.

For heavy elements this volume shift is dominating the IS, whereas the mass shift prevail in light elements. The higher moments of the charge radius also entering the IS of heavy elements are discussed in the literature.

### Static Moments and Nuclear Shape

The nuclear shape and more precisely the nuclear deformation influences indirectly spin and magnetic moment but the deformation parameter  $\beta$  can be directly measured via the quadrupole moment. The intrinsic quadrupole moment is given by

$$(3) \quad Q_0 = 6/(5(5\pi)^{1/2}) \langle r_0^2 \rangle Z\beta(1+0.36\beta)$$

whereas the spectroscopic moment  $Q_s$  measured in the HFS is the projection of the intrinsic quadrupole moment on the spin axis. In strong coupling this reads

$$(3a) \quad Q_s = Q_0 I(2I-1)/(I+1)(2I+3)$$

The mean squared charge radius is also dependent on deformation

$$(4) \quad \langle r^2 \rangle = \langle r_0^2 \rangle \left( (1 + 5/4\pi \cdot \sum_i \langle \beta_i^2 \rangle + 0.3 \langle \beta^3 \rangle \cos \gamma (1 - 4\sin^2 \gamma)) \right)$$

Here the scalar  $\beta^2$  includes static and dynamic contributions to be summed over all modes i. In the case of triaxial nuclei a moderate term containing the parameter  $\gamma$  must be respected.

### Collinear Laser Spectroscopy

This experimental method has been described in its principle many times. An ion beam from an on-line mass separator is neutralized in an alkali vapour and merged with a laser beam. At resonance the fluorescence light is observed with a photon counting photo-multiplier.

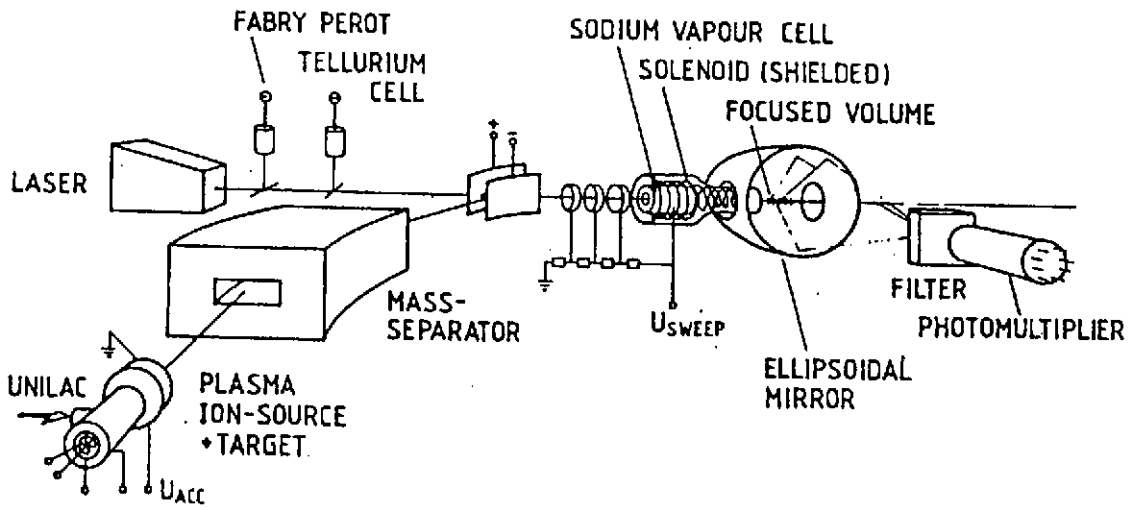


Fig. 1: Scheme of a collinear set-up at the GSI mass separator<sup>2)</sup>  
The ISOLDE set-up<sup>3)</sup> differs in details only

After the acceleration by the mass separator ( 54kV ) the longitudinal velocity spread is reduced to

$$(5) \quad dv_{\text{beam}} = 1/2 dv_{\text{source}} \cdot (dE/E)^{1/2}$$

since the energy spread is conserved during acceleration

$$(6) \quad dE = 1/2 M (dv_{\text{source}})^2 = M (dv_{\text{beam}} \cdot v_{\text{accl}})^2$$

By this the residual Doppler width in collinear excitation of the resonance fluorescence is close to the natural width. These narrow resonances with the single mode dye laser are Doppler shifted by  $f_{\text{optical}} \cdot v_{\text{accl}}/c$  and can be tuned easily via a sweep voltage at the charge exchange cell. Many variations of this experimental method have been adopted in special cases and are described in the literature<sup>1)</sup>. A combination of collinear spectroscopy with a pulsed laser ion source has been proposed as well<sup>4)</sup>.

## Experimental results

As an illustration of the behaviour of the charge radii one may discuss the rubidium<sup>5)</sup> and strontium<sup>6)</sup> isotope chain, both crossing the  $N = 50$  neutron shell at almost spherical shape and extending to strongly deformed neutron deficient and neutron rich nuclei.

The agreement between experimental charge radii analyzed via relation ( 4 ) and microscopic calculations is restricted to nuclei with stable spherical or strongly deformed shape. In the transitional region the experiments show larger rms charge radii than can be reproduced by calculation, even when surface vibrations are added to the static deformation.

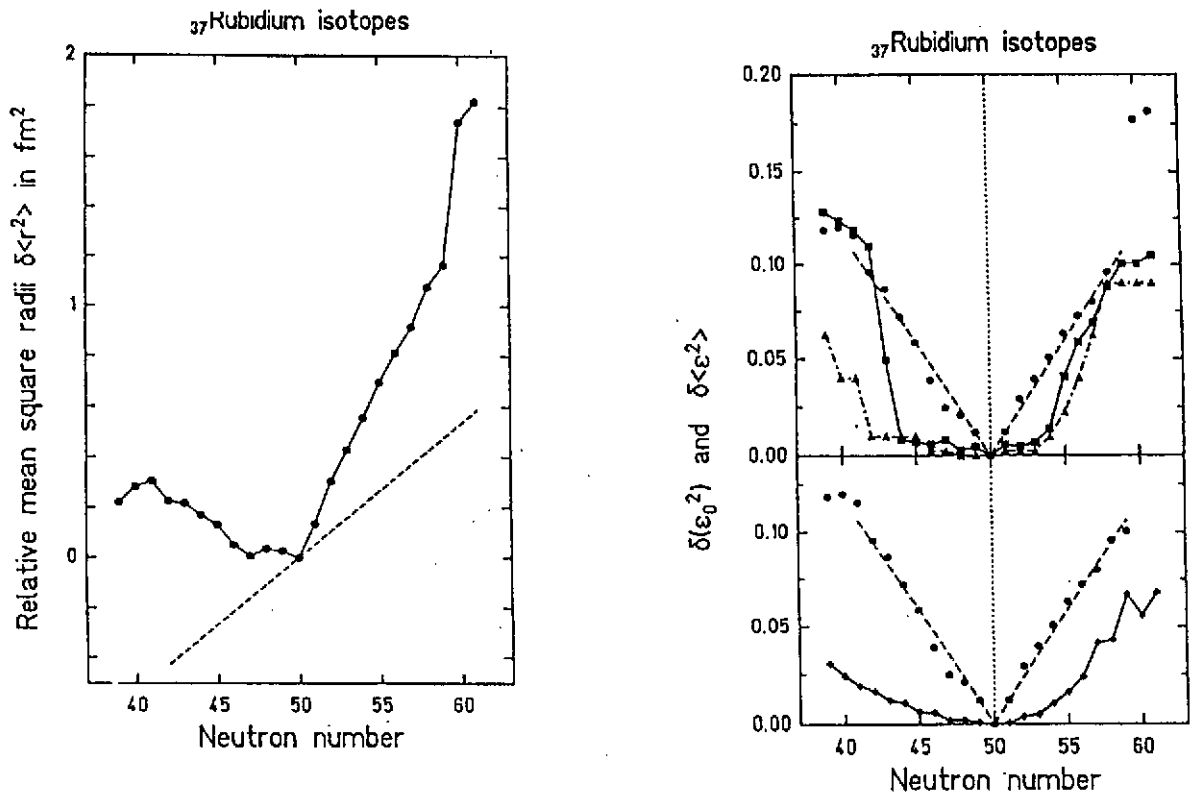


Fig. 2: Isotope shift data on Rb shown with the spherical droplet model (dotted line) on the left part. The deformation contribution according to (4) is compared with various model calculations. Agreement is found for  $N = 50$  and  $N > 58$  only.

### Mean square nuclear charge radii

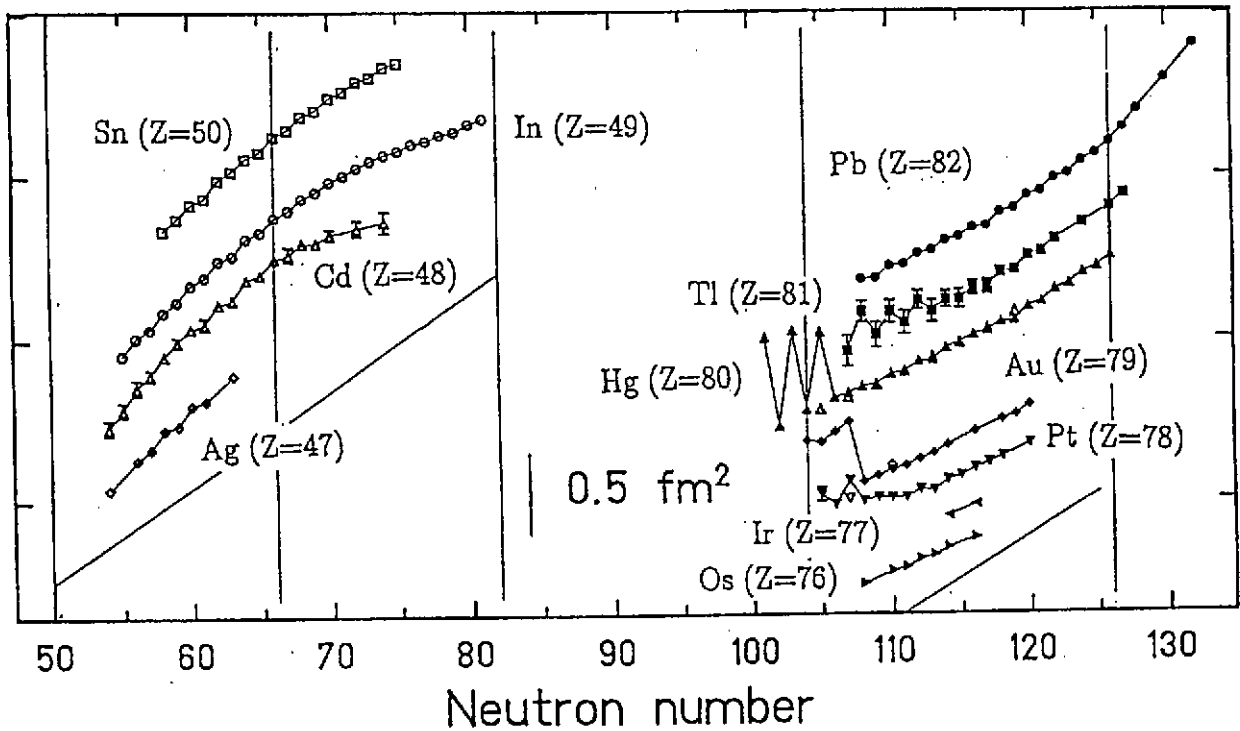


Fig. 3: Rms Charge radii close to the magic proton numbers  $Z = 50, 82$ . The parabolic slope between  $N = 50 - 82$  is missing for the heavy elements. Shape isomerism and instability is seen instead.

The enhancement of the rms charge radius away from magic numbers gives rise to the parabolic slope of the isotope shift at magic proton numbers and is well studied for tin, indium and partly cadmium and silver<sup>7)</sup>. For heavy elements at  $Z = 82$  however shape softness and instability and the well known shape isomerism for light mercury isotopes is observed<sup>8)</sup>. At the same time any regular "parabolic" trend in the rms radii is missing in contrast to all lighter magic proton shells.

## References

- (1) E.W.Otten, Nuclear Radii and Moments of unstable Nuclei, in Treatise on Heavy Ion Physics, D. A. Bromley (Ed.) Vol. 8, 515 (1989) Plenum Press, New York
- (2) Th Kuehl et. al. Nucl.Instr.Meth. B26 419 (1987)
- (3) A. C. Mueller et. al. Nucl. Phys. A403 234 (1983)
- (4) Arianer et. al. COMPLIS Cern proposal ISC91-7/P5
- (5) C. Thibault et. al. Phys. Rev. C23, 2720 (1981)
- (6) F. Buchinger et. al. Phys. Rev. C
- (7) In : J. Eberz et. al. Nucl. Phys. A464 9 (1987)  
Sn : J. Eberz et. al. Z. Phys. A326 121 (1987)  
M. Anselment et al. Phys. Rev. C34 1052 (1986)  
Cd : F. Buchinger et. al. Nucl. Phys. A462 305 (1987)  
Ag : U. Dinger et. al. Nucl. Phys. A503 331 (1989)
- (8) Pb : Dinger et al. Z. Phys. A328 253 (1987)  
Tl : Dinger et al. Hyp. Int. 59 (1990)  
Hg : Ulm et al. Z. Phys. A325 274 (1986)  
Au : Wallmeroth et al. Nucl. Phys. A493 224 (1989)  
Pt : Hilberath et al. Z. Phys. A332 107 (1989)  
Duong et al. Phys. Lett. B217 401 (1989)  
Ir,Os : Heilig & Steudel At. Data & Nucl. Tables 14 613 (1974)

## Experiments with Shell Structure in Metal Clusters

*S. Bjørnholm<sup>1</sup>, J. Borggreen<sup>1</sup>, K. Hansen<sup>1</sup>,  
T. Martin<sup>2</sup>, H.D. Rasmussen<sup>1</sup> and J. Pedersen<sup>1</sup>,*

The Niels Bohr Institute, Copenhagen<sup>1</sup>,  
Max-Planck-Institut für Festkörperforschung, Stuttgart<sup>2</sup>

**Résumé:** Les électrons de conduction à l'intérieur d'une gouttelette métallique forment un système quantique dont la structure est analogue à celle du noyau atomique. Les gouttelettes forment un système périodique entier des "noyaux-géants". Ceci s'explique à partir de la règle de quantisation de Bohr, appliqué aux électrons en mouvement classique à l'intérieur de la gouttelette en orbites triangulaires et carrés.

**Abstract:** The conduction electrons in small metal drops form ordered quantum states in analogy to the nucleons in the nucleus. The droplets form an entire periodic system of "giant nuclei" that can be understood by applying Bohr's quantization rule to electrons moving classically inside the droplets in triangular and square orbits.

### Introduction

Free and independent electrons bonded by the spherical surface of a small metallic drop will quantize into a total quantum state that exhibits shell structure<sup>1-5</sup>. There is here an analogy to the atomic electrons surrounding the nucleus and even more, an analogy to the ordering of protons and neutrons in the nucleus itself as described by the nuclear shell model<sup>6</sup>. The most significant difference is the absence of any spin-orbit splitting in the metal clusters. In the study of how metallic clusters grow, one therefore leans heavily on theories and experience from atomic and in particular from

*S. Bjørnholm et al. Shell Structure in Nuclei and ...*

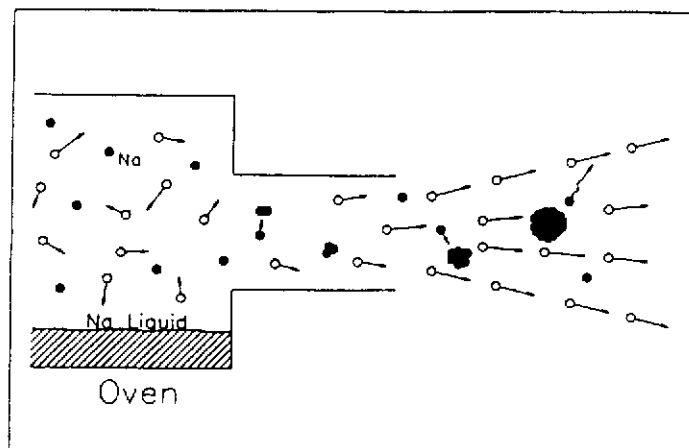
nuclear physics<sup>7,8</sup>. In addition, since metal clusters readily exceed nuclei in the number of elementary constituents they contain, the metal clusters provide a basis for significant extensions of the quantum many body concepts developed to describe nuclear shell structure.

We shall here present measurements of the size distribution of sodium metal clusters, with up to 3000 atoms per cluster, obtained by expanding hot sodium vapour through a fine nozzle. Steps in the abundance distributions occur locally at sizes that differ in radius by  $0.61 r_{WS}$ , where  $r_{WS}$  is the Wigner-Seitz radius (i.e. radius of sphere representing the volume available to each atom or electron). For a cold electron gas the Pauli exclusion principle imposes a unique relation between  $r_{WS}$  and the most energetic (Fermi) electron. The action of a classical electron moving with this energy will increase by one Planck unit  $h$  for each increment in radius of the above magnitude, provided it moves inside the cluster surface in something intermediate between a closed triangular and a closed square orbit. Quantization of such classical closed orbits can therefore explain the observed periodicity. The experimental data further show clear evidence of a quantum beat mode, reflecting alternating constructive and destructive interference between quantized triangular and square orbits, respectively. The altogether 22 shell periods observed are divided into two groups separated by a minimum in the amplitude of the shell effect. In addition one sees a shift in phase in going from group one to group two, as expected for a beat mode.

### **The experiment**

Metal droplets are produced by expansion of metal vapour through a fine nozzle, the same way water droplets are formed by letting steam through a valve, Fig. 1.

The sodium vapour is generated in a stainless steel vessel held at 700-800 °C and the expansion is assisted by pressurizing the vessel with a large surplus of argon or xenon gas. The mixture is expanded into a three meter long, differentially pumped flight tube, resulting in a narrow beam of free-flying metal clusters with velocities close to the initial thermal speed of the



**Fig. 1 - Production of sodium clusters, i.e. giant atoms.** In the expansion of an inert gas through a 0.1 -0.2 mm diameter nozzle, random thermal motion is converted to uniform translational motion, resulting in strong cooling of the inert gas. Introducing atomic sodium vapor into this medium, the sodium atoms aggregate into clusters with a broad, uniform size distribution.

argon or xenon atoms. In the expansion and clustering process, lasting about 100 nanoseconds, the noble gas medium cools to a few tens of Kelvin. In the sodium clusters, on the other hand, there will be a competition between heating, due to condensation, and cooling, due to collisions. We believe that the resulting internal temperature in the freshly formed clusters is just some 100-200 °C below the oven temperature. In the ensuing free flight for about one millisecond the droplets will therefore loose sodium atoms by stepwise evaporation, cooling to about 100-200 °C. This evaporation process is sensitive to shell-like variations in the atomic separation (free) energies; and these variations are thought to be responsible for the step-like modifications of the experimentally observed size distributions, while presumably the pre-evaporation size distributions are completely uniform.

One meter downstream the size distribution is sampled by time-of-flight mass spectrometry. Ultraviolet photons with energies just about the ionization threshold and an energy spread of 1 eV (compared to a total Fermi energy



*S. Bjørnholm et al. Shell Structure in Nuclei and ...*

in sodium of 3.24 eV), are used to produce a representative sample, in the form of ions, from the otherwise neutral size distribution. Figure 2, upper part, shows an example of an abundance distribution  $I_N$  vs.  $N$  obtained in this way. The quantity  $N$  is the number of atoms or conduction electrons in the cluster.

**Magic numbers**

One sees clearly in Fig. 2 how the global bell-shaped distribution is scarred with saw-tooth or *s*-shaped irregularities at certain "magic" sizes.

Since the interest focusses on these, it is convenient to display the experimental result in terms of relative intensity changes, i.e.:

$$\Delta_1 \ln I_N = \ln(I_{N+1}/I_N) \approx 2 \frac{(I_{N+1} - I_N)}{(I_{N+1} + I_N)}. \quad (1)$$

As one sees from Fig. 2, lower part, this makes the magic numbers stand out very clearly as dips in the curve. At the same time, one sees how the dips become smaller and broader with increasing magic number,  $N_0$ . For higher  $N_0$ -values the dips signalling shell closures will drown in noise due to finite counting statistics. In this situation we have found it useful to make a compromise between "band pass" in terms of the size interval sampled and statistical noise, by computing a properly weighted logarithmic derivative for properly spaced mass points  $N$ ,

$$\langle \Delta_1 \ln I_N \rangle_{K_0} = \frac{\sum_{K=2K_0/3}^{K_0} 2 \frac{(I_{N+1+K} - I_{N-K})(2K+1)}{I_{N+1+K} + I_{N-K}}}{\sum_{K=2K_0/3}^{K_0} (2K+1)^2}, \quad (2)$$

choosing values of  $K_0 = 0.03 N$ . The derivative is thus sampled over intervals of  $2K_0 + 1$ , i.e.  $\pm 3\%$  of the actual size. In this way it becomes realistic to scale up the measured derivatives in order to display very small irregularities

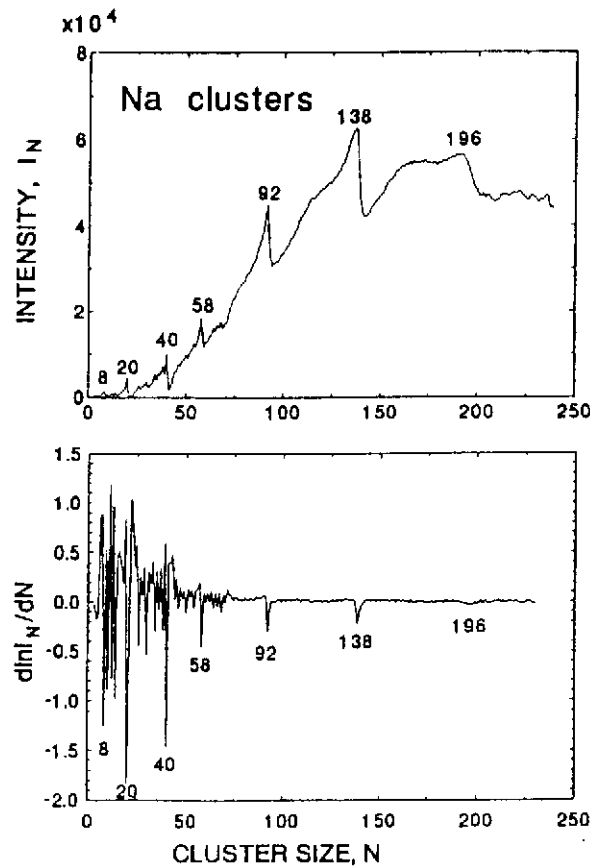


Fig. 2 - Mass spectra. Top panel: Abundance distribution for sodium clusters produced by adiabatic expansion and measured after a one meter free flight by time-of-flight mass spectrometry. In this measurement the individual mass peaks are fully resolved. Each point represents the integrated mass peak, corrected for background. Bottom panel: Logarithmic derivative  $\Delta_1 \ln I_N$  of the results in top panel according to eq. (1).

in the intensity pattern. Figure 3 shows the results, plotted as a function of the linear dimensions of the clusters,  $\sim N^{1/3}$ . At each dip the magic number  $N_0$  is indicated. The dips are very nearly equidistantly spaced in the plot (Fig. 3), indicating that each new period require the same increment in drop radius  $\Delta R = r_{ws} \Delta N_0^{1/3}$  to be completed.

A closer test of the linearity is made in Fig. 4, where  $N_0^{1/3}$  is plotted

S. Bjørnholm et al. Shell Structure in Nuclei and ...

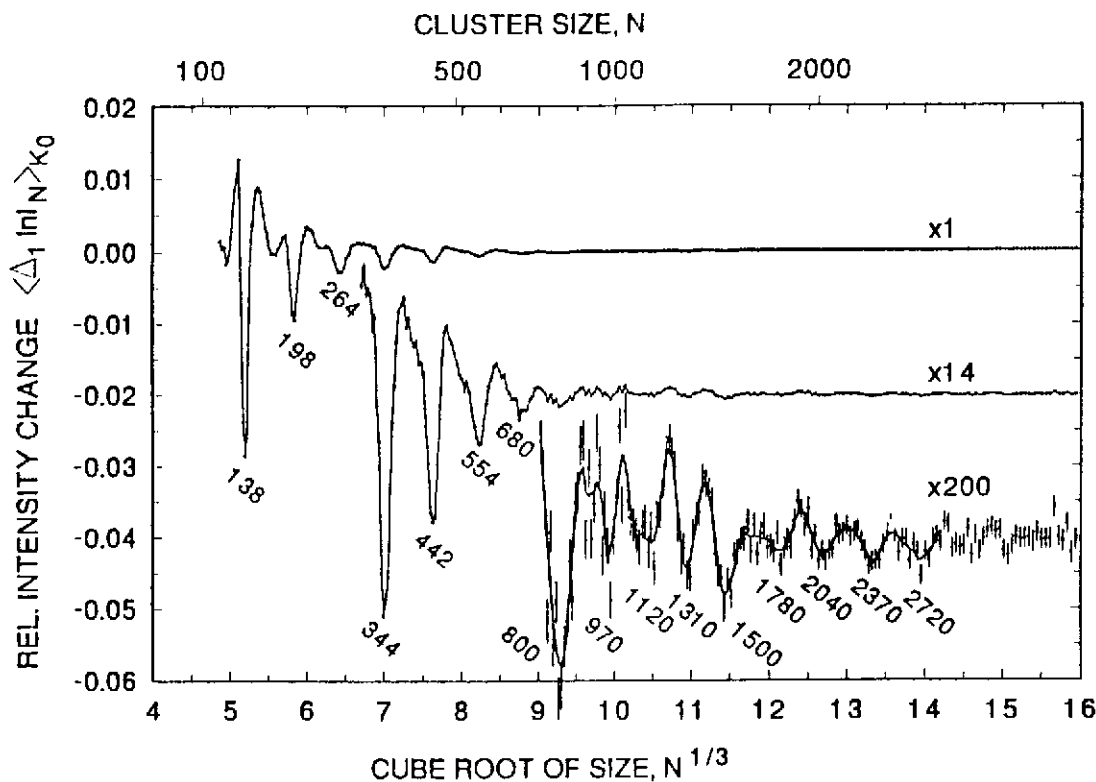


Fig. 3 - Magic numbers. Relative changes in the cluster abundance distributions,  $\langle \Delta_1 \ln I_N \rangle_{K_0}$ , calculated from the measured mass abundance spectra  $I_N$  according to eq. (2) and plotted as a function of  $N^{1/3}$ . In these measurements the individual masses are not resolved in the time-of-flight spectra. Time-of-flight is converted to mass by extrapolation from the low-mass region, where peaks are resolved, and the intensity per mass  $I_N$  calculated without background correction. (Some background originates from doubly ionized clusters. This has been kept at a minimum by adjustment of the ionizing light intensity to a relatively low level).

against a running index  $n$ , accounting for the period (or shell) number.

From the slope of the straight lines in Fig. 4 one finds that the increment in radius per period is  $\Delta R = (0.61 \pm 0.01) r_{ws}$ . The increment  $\Delta L$  in circumference  $2\pi\Delta R$  is then  $(3.83 \pm 0.06) r_{ws}$ . The de Broglie wavelength of an electron with the Fermi energy<sup>9</sup> is  $\lambda_F = (32\pi^2/9)^{1/3} r_{ws} = 3.28 r_{ws}$ , which is not so far from the increment in the circumference or, equivalently,

*S. Bjørnholm et al. Shell Structure in Nuclei and ...*

in the length of a full circular orbit. However, triangular and square orbits are in much closer agreement with the de Broglie quantization rule  $\Delta L = \lambda_F$ , having length increments of  $3\sqrt{3}\Delta R = (3.17 \pm 0.06)r_{ws}$  and  $4\sqrt{2}\Delta R = (3.45 \pm 0.06)r_{ws}$ , respectively. This is the first very significant observation resulting from simply measuring the positions  $N_o$  of the dips in Fig. 3.

The second result is the observation, Fig. 4, that the magic numbers, or rather the  $N_o^{1/3}$ -values, fall on two straight lines displaced by one-half unit of  $n$ , the shell index. The sum of two cosine functions of  $n$  with some 7-10 % difference in wave numbers  $k_\Delta$  and  $k_\square$ , respectively would show such a phase shift:

$$\cos(k_\Delta n) + \cos(k_\square n) = 2 \cos\left(\frac{k_\Delta + k_\square}{2} n\right) \cos\left(\frac{k_\Delta - k_\square}{2} n\right). \quad (3)$$

Combined with the first result, this strongly suggests that quantized triangular and square orbits together are responsible for the observed periodicities in the abundance distributions.

### Intensities

An interference pattern of the type eq. (3) should show up as a long wavelength modulation of the short wavelength periodicities visible in Figs. 2 and 3. Instead, one sees there a seemingly monotonous decrease in the amplitudes of the shell dips. There are two reasons for this decrease.

Shell structure is due to periodic variations in an otherwise uniform single particle electron level density. In a constant density medium with constant Fermi energy, or, equivalently, constant width of the conduction band, the spacing  $\hbar\omega_{shell}$  between consecutive modulations must decrease as  $1/n$ . This will cause an  $N_o^{-1/3}$  decrease in the expected dips. If furthermore the amplitudes of the shell modulations decrease as  $N_o^{-1/6}$ , one arrives<sup>8</sup> at a decrease varying as  $N_o^{-1/2}$  - even at zero absolute temperature.

The other, more important, reason for the strongly decreasing dip amplitudes

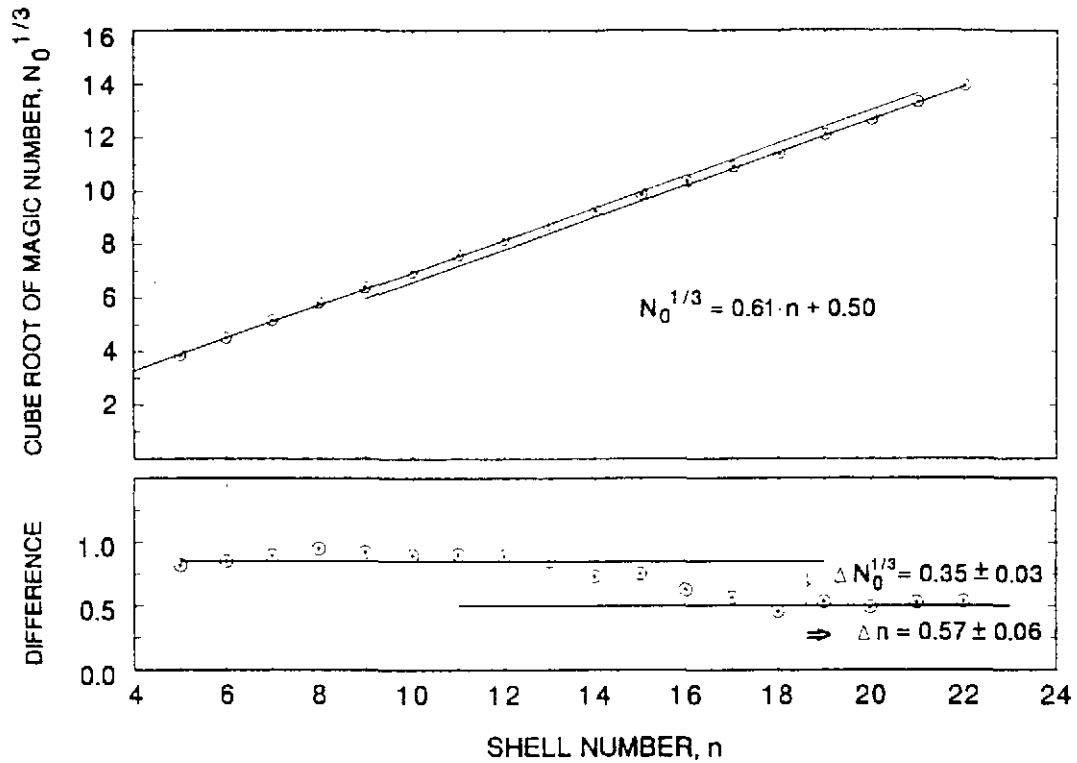


Fig. 4 - The phase shift. Cube root of the magic numbers from Fig. 3, signifying shell closures, plotted against shell number  $n$ . (Top panel). For higher shell numbers the points fall on two straight lines, phase-shifted by one half shell number. This is shown more clearly in the panel below where the points result from subtraction of a straight line from the data above.

is temperature<sup>10-12</sup>, which tends to wash out the observable shell structure – exponentially<sup>8</sup> in the effective temperature parameter  $\tau$ ,

$$\tau = k_B T \frac{2\pi^2}{\hbar\omega_{shell}}, \quad (4)$$

with

$$\hbar\omega_{shell} \approx 2\varepsilon_F/n \propto N^{-1/3}. \quad (5)$$

Here  $k_B$  is Boltzmann's constant,  $T$  is the real temperature at the time of

*S. Bjørnholm et al. Shell Structure in Nuclei and ...*

sampling the abundance distributions, estimated<sup>13</sup> to be 400-500 K, while  $\epsilon_F = 3.24$  eV is the Fermi energy.

In order to compensate for these effects we have scaled the experimental logarithmic derivatives,  $\langle \Delta_1 \ln I_N \rangle_{K_0}$ , cf. Fig. 3, with the factor  $N^{1/2} \exp(cN^{1/3})$ , setting  $c = 0.65$ . The result is presented in Fig. 5.

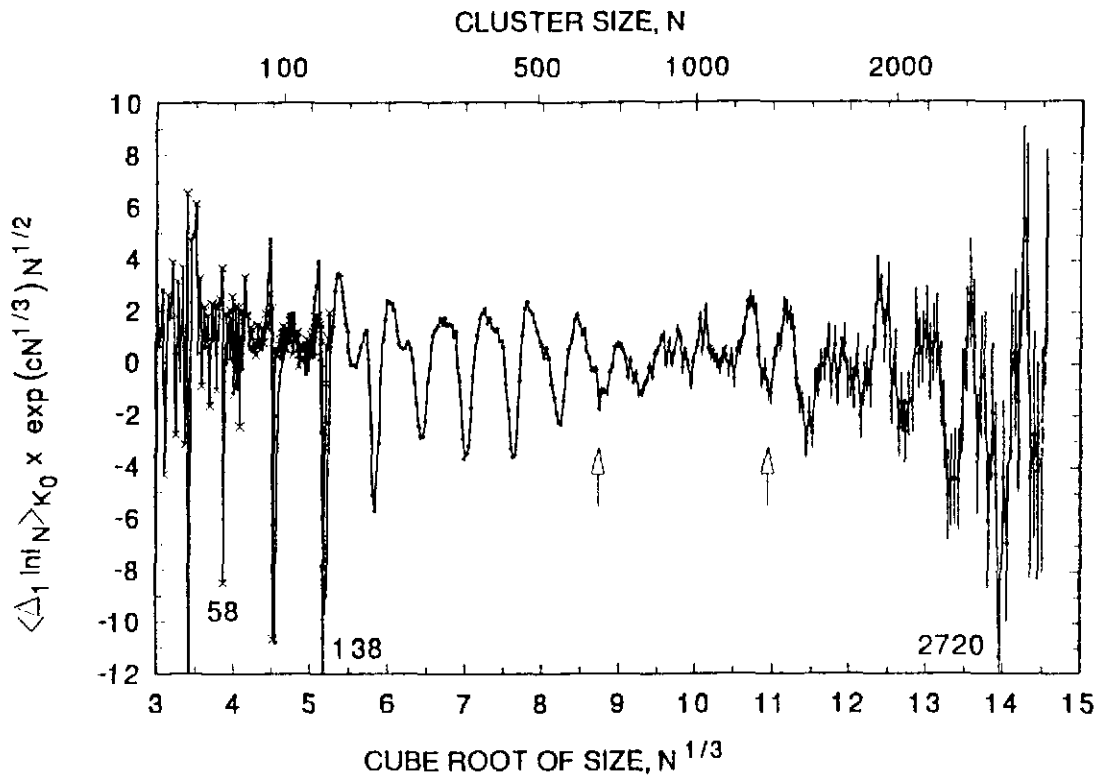


Fig. 5 - The quantum beat. Relative changes  $\langle \Delta_1 \ln I_N \rangle_{K_0}$  in experimental cluster abundance  $I_N$ , corrected for the effect of temperature and shell compression, as a function of linear cluster dimensions  $N^{1/3}$ . The model considerations behind these corrections are described in refs.<sup>8,10-12</sup>. The highest shell in the first group (supershell) according to the phase shift plot, Fig. 4, and the first shell in the second group are indicated by arrows. The measurements from Fig. 2, lower part, are also shown (crosses). The logarithmic amplitudes  $\Delta_1 \ln I_N$  are here summarily scaled by an extra factor of 0.2 to account for the superior mass resolution and the use of eq. (1) instead of eq. (2) for these data.

Since the scaling function is monotonously increasing, it cannot by itself

*S. Bjørnholm et al. Shell Structure in Nuclei and ...*

introduce the large scale modulations seen in the plot. They indeed have the character of a beat mode as expected from eq.(3) and from the results of the previous section.

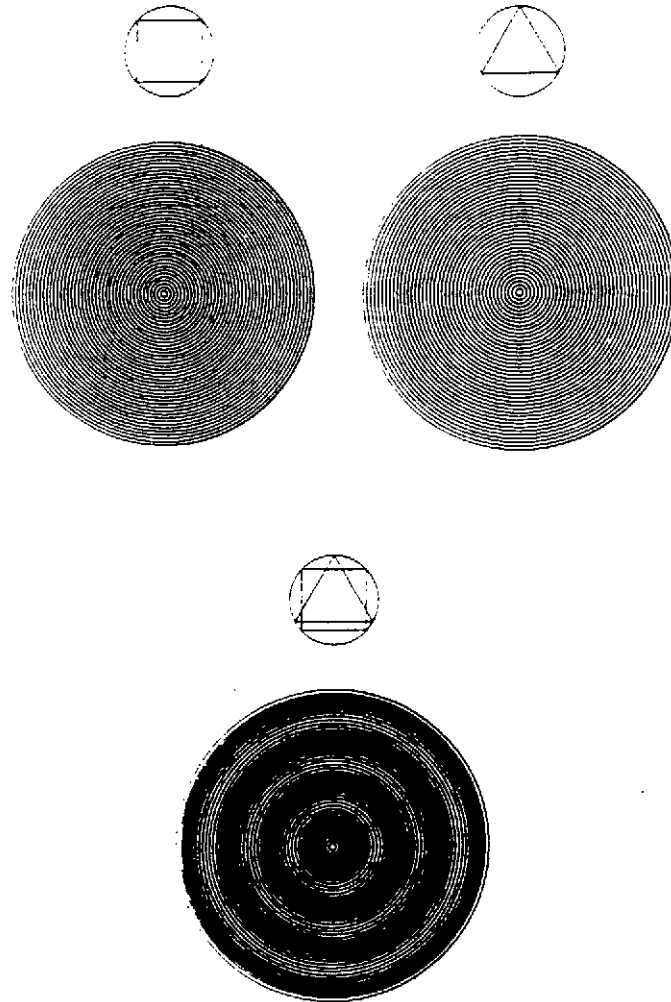
Correcting the experimental abundance modulations for the influence of finite temperature and for the compression of the shells with increasing size thus corroborates the previous results, obtained solely by examining the sequence of magic numbers.

### **The quantum beat**

From this analysis one obtains an understanding of the periodic abundance variations with cluster size as the result of quantization of triangular and square electron orbits inside the sodium droplets, in the spirit of Bohr<sup>14</sup> and de Broglie<sup>15</sup>. The presence of two orbits, and hence two slightly differing periods, results in a beat pattern superposed on the "fundamental", primary shell periodicity. The beat mode has a minimum around shell no. 16, where there are about 1100 conduction electrons in the cluster. An illustration of how the combination of "preferred" cluster radii for electrons orbiting with equal energy in triangular and square orbits, respectively, can lead to an interference pattern<sup>16</sup> is given in Fig. 6.

### **Modern theories**

The attempt to discuss the experiment in the simplest possible terms is deliberate. It does not imply that modern quantum theories have overlooked the effects shown or are inadequate for their description. Indeed, we were inspired by several newer theories of shell structure in nuclear systems, in particular refs.<sup>8,17</sup>, in first mounting the experiment. Also, the prior theoretical treatment of size and temperature effects<sup>8</sup>, have guided the analysis of the admittedly very weak abundance modulations. Some theoretical developments<sup>10,11,18</sup> have occurred in parallel with the experimental campaign, helping to sharpen and focus the effort.



*Fig. 6 - Correspondence principle. For a particle with Fermi-energy, triangular orbits will have integer action values for a set of discrete drop radii (top right). Analogously, square orbits require another set of discrete radii in order for the action to be an integer multiple of  $h$  (top left). The drop sizes that meet both requirements exhibit a beat pattern (bottom center).*

The modern theories<sup>18</sup> are particularly helpful in answering why just two orbits, triangles and squares, suffice to understand the experiment, and why pentagons, hexagons, etc., etc. can be neglected. In a more complete theory, all closed orbits indeed contribute to the final spectrum of discrete quantal energy eigenstates. But the experiment averages over this forest of discrete



*S. Bjørnholm et al. Shell Structure in Nuclei and ...*

states, being only sensitive to the gross features in the level density, and these features are found to be dominated by contributions from the two shortest closed orbits (with non-zero angular momentum).

### Particles and waves

Periodicities due to quantum shell structure have been identified in a large number of experiments<sup>1,2,19,20</sup>, the most recent one<sup>21</sup> extending to cluster sizes almost as large as the ones described here. Of special interest is ref.<sup>19</sup>. Working with cold sodium clusters at about 100 K, the authors find quantum shell periodicities for clusters with 1400 atoms or less, while periodicities in the size interval from  $N = 1400$  all the way up to  $N = 20000$  give evidence of geometrical packing of sodium ions into icosahedral quasicrystals. This last aspect has no analogue in nuclear systems and is an example of the coexistence in one experiment of wave-order and particle-order, respectively. Combined with the present, high-temperature experiment it also illustrates how the periodicities that one encounters in connection with the growth of clusters towards macroscopic dimensions can depend rather strongly on temperature, reflecting basically the difference between soft (perhaps liquid) and solid end products.

The authors wish to thank O. Echt, W.D. Knight and B.R. Mottelson for most valuable advice and encouragement.

### References

1. W.D.Knight, K. Clemenger, W.A. de Heer, W.A. Saunders, M.Y. Chou, and M.L. Cohen, *Phys. Rev. Lett.* **52**, 2141 (1984), and W.A. de Heer, W.D. Knight, M.Y. Chou, and M.L. Cohen, *Solid State Physics* **40**, 93 (1987)
2. I. Katakuse, T. Ichihara, Y. Fujita, T. Matsuo, T. Sakurai, and H. Matsuda, *Int. J. Mass Spectrom. Ion Proc.* **67**, 229 (1985)
3. W. Ekardt, *Phys. Rev.* **B29**, 1558 (1984)
4. O.E. Beck, *Solid State Commun.* **49**, 381 (1984)
5. M.Y. Chou, and M.L. Cohen, *Phys. Lett.* **A133**, 420 (1986)

*S. Bjørnholm et al. Shell Structure in Nuclei and ...*

6. M.G. Mayer, and J.H.D. Jensen, *Elementary Theory of Nuclear Shell Structure*, 1 (Wiley, New York, 1955)
7. A. Bohr, and B.R. Mottelson, *Nuclear Structure*, Vol. I, 2 (Benjamin, New York, 1969).
8. A. Bohr, and B.R. Mottelson, *Nuclear Structure*, Vol. II, 2 (Benjamin, London, 1975)
9. N.W. Ashcroft, and N.D. Mermin, *Solid State Physics*, 1 (Saunders College, Philadelphia, 1976).
10. M. Brack, O. Genzken, and K. Hansen, *Z. Phys.*, to appear (1991)
11. M. Brack, O. Genzken, and K. Hansen, *Z. Phys.*, to appear (1991)
12. S. Bjørnholm, J. Borggreen, O. Echt, K. Hansen, J. Pedersen, and H.D. Rasmussen, *Z. Phys.* to appear (1991)
13. C. Brechignac, Ph. Cahuzac, J. Leygnier, and J. Weiner, *J. Chem. Phys.* **90**, 1492 (1989)
14. N. Bohr, *Phil. Mag.* 26, 1 (1913)
15. L. de Broglie, *C.R. Acad.Sci.Paris*, **179**, 39 and 676 (1924)
16. S. Bjørnholm, in *Clusters of Atoms and Molecules* (ed. Haberland, H.) Ch. 2.4, pp.24 (Springer, Berlin, to appear 1991)
17. R. Balian, and C. Bloch, *Ann. Phys.* **69**, 76 (1972)
18. H. Nishioka, K. Hansen, and B.R. Mottelson, *Phys. Rev.* **B42**, 4377 (1990)
19. T.P. Martin, T. Bergmann, H. Göhlich, and T. Lange, *Chem. Phys. Lett.* **172**, 209 (1990)
20. S. Bjørnholm, J. Borggreen, O. Echt, K. Hansen, J. Pedersen, and H.R. Rasmussen, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 1627 (1990)
21. T.P. Martin, S. Bjørnholm, J. Borggreen, C. Bréchignac, P. Cahuzac, K. Hansen, and J. Pedersen, *Chem.Phys.Lett.* submitted (1991)



## METAL CLUSTERS: THEORETICAL APPROACHES

M. Brack

*Institut für Theoretische Physik, Universität, D-8400 Regensburg, W-Germany*

### Résumé

Nous présentons une petite revue des méthodes théoriques utilisées pour la description des agrégats métalliques. En particulier, nous discutons du modèle auto-consistant du "jellium" dans le cadre de la théorie des fonctionnelles de densité et de quelques résultats récents concernant la structure des "super-couches" dans les agrégats de sodium.

### Abstract

We present a brief review of the theoretical concepts used for the description of metal clusters. In particular, we discuss the selfconsistent jellium model within the framework of density functional theory and some recent results on the super-shell structure in Na clusters.

### 1. INTRODUCTION

It cannot be the aim of these lectures to give a detailed account of *all* theoretical aspects of metallic clusters. This would be a truly interdisciplinary task, involving quantum chemistry, molecular dynamics, atomic, molecular and solid state physics, and many aspects of nuclear physics as well. For the more phenomenological models used in cluster physics, we refer to the review article by de Heer *et al.* (1987b). A more detailed description of the selfconsistent theories discussed below, as well as a review of experimental results and their comparison with theory, will be found in a forthcoming article by de Heer and Brack (1992). The figures shown below as illustrations were taken from work in which the author was personally involved; they were selected purely for reasons of convenience.

We shall try, in Sec. 2, to give an overview of some of the facettes of the quantum many body problem given to us in the form of metal clusters, by going through a

series of successive approximations and simplifications used in various approaches, starting from purely microscopic quantal 'ab initio' descriptions and ending up with semiclassical mean field theory.

In the remaining part of these lectures we shall concentrate on the selfconsistent mean field approach. The most powerful tool here is the density functional theory (DFT) which is excessively used in cluster physics; we shall therefore devote Sec. 3 to a short presentation of the corresponding formalism.

Finally, in Sec. 4, we discuss the so-called selfconsistent jellium model for the description of metal clusters and present some selected results. Although this model greatly simplifies the physical situation by neglecting totally the geometric structure of the ions which make up the body of the clusters, it retains the quantal description of the valence electrons responsible for the shell structure, which is observed in many experiments and which bears so much resemblance to nuclear physics.

## 2. FROM THE QUANTAL MANY-BODY PROBLEM TO SEMI-CLASSICAL JELLIUM DROPS: A hierarchy of approximations

### 2.1) The quantal many body problem

Let us start by writing down the exact Hamiltonian for a neutral cluster consisting of  $N$  nuclei with  $Z$  electrons each:

$$\hat{H} = \sum_{\alpha=1}^N \left\{ \frac{\mathbf{P}_{\alpha}^2}{2M} + \sum_{i=1}^Z \left( \frac{\mathbf{p}_{\alpha i}^2}{2m} - \frac{Ze^2}{|\mathbf{r}_{\alpha i} - \mathbf{R}_{\alpha}|} \right) + \frac{1}{2} \sum_{\beta=1}^N \left( \frac{(Ze)^2}{|\mathbf{R}_{\alpha} - \mathbf{R}_{\beta}|} + \sum_{i,j=1}^Z \frac{e^2}{|\mathbf{r}_{\alpha i} - \mathbf{r}_{\beta j}|} \right) \right\}, \quad (1)$$

where  $M$ ,  $\mathbf{P}_{\alpha}$ ,  $\mathbf{R}_{\alpha}$  are the mass, momenta and coordinates, respectively, of the nuclei, and  $m$ ,  $\mathbf{p}_{\alpha i}$ ,  $\mathbf{r}_{\alpha i}$  those of the electrons in the  $\alpha$ -th nucleus. (Self interactions must be left out of the double sums.) This constitutes a system of  $N(Z+1)$  charged particles interacting via the Coulomb forces. Although the Hamiltonian (1) is exactly known, it is impossible to solve the corresponding Schrödinger equation.

Luckily, the different scales of nuclear and electronic masses allow a rather sharp separation of their treatment: the motion of the nuclei may be treated classically (see Sec. 2.3) or neglected altogether (see Sec. 2.2), whereas the electrons must be treated quantum-mechanically since they lead to the all-dominant shell effects.

In simple metals such as alkalis and to some extent also in Ag, Al, etc., the delocalisation of the valence electrons allows a further separation: to treat only the

$w$  valence electrons of each atom quantum-mechanically and to include the 'core electrons' with the nuclei into a compact ion of charge  $+we$ . The assumption: "atom = ion +  $w$  valence electrons" is quite good for simple metals, esp. alkalis, and provides the basis for the largest part of metal cluster calculations. The Hamiltonian then is reduced to that of  $N$  interacting ions ( $\hat{H}_N$ ) and  $wN$  interacting electrons in an external field ( $\hat{H}_{el}$ ):

$$\hat{H} = \hat{H}_N + \hat{H}_{el}, \quad (2)$$

with

$$\hat{H}_N = \sum_{\alpha=1}^N \left\{ \frac{\mathbf{P}_{\alpha}^2}{2M} + \frac{1}{2} \sum_{\beta(\neq\alpha)=1}^N \frac{(we)^2}{|\mathbf{R}_{\alpha} - \mathbf{R}_{\beta}|} \right\}, \quad (3)$$

$$\hat{H}_{el} = \sum_{i=1}^{wN} \left\{ \frac{\mathbf{P}_i^2}{2m} + V_I(\mathbf{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_{j(\neq i)=1}^{wN} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \right\}, \quad (4)$$

where the ionic potential

$$V_I(\mathbf{r}) = - \sum_{\alpha=1}^N \frac{we^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_{\alpha}|}. \quad (5)$$

ouples the electronic and ionic degrees of freedom. The effect of the core electrons is usually taken into account by replacing the pure Coulomb potential in (5) by a suitable pseudopotential, as is has been done successfully in solid state theory (see, e.g., Ashcroft and Mermin, 1976):

$$V_I(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha=1}^N V_{ps}(|\mathbf{r} - \mathbf{R}_{\alpha}|). \quad (6)$$

Even if the nuclear part of  $\hat{H}$  is ignored or treated by classical equations of motion (Sect. 2.3), the electron-electron interactions in (1) or (4) constitute an unsolvable many body problem. The most common solution for dealing with it is the *mean field* approximation: The wavefunctions of the electrons are taken to be those of non-interacting particles, i.e. Slater determinants. Determining them by an energy variation principle leads to the familiar Hartree-Fock (HF) approximation (see the lectures of J.-F. Berger). Hereby the average part of the electronic repulsion is included in a mean field or potential which, due to the finite range of the Coulomb interaction, is *nonlocal*. Extensions of the HF approximation are obtained by inclusion of (many) particle - (many) hole excitations in perturbation theory ('configuration mixing' and interaction).

An alternative version of the mean field approach is obtained from density functional theory in which correlations — also exchange contributions going beyond the HF approximation — can be included approximately in a *local* mean field (see Sec. 3). Both versions of mean field theory have been widely used for many-fermion systems in all branches of physics.

The mean-field concept explains most of the electronic shell effects and many other properties of metallic clusters, at least semi-quantitatively, and will be further sketched in Secs. 2.4 - 2.5 below.

### 2.2) 'Ab initio' quantum chemistry

The ambitious goal of the quantum chemical 'ab initio' approach is to treat all the electronic degrees of freedom in (1) fully quantum-mechanically. This can only be done at the cost of 'freezing' the positions  $\mathbf{R}_\alpha$  of all nuclei. The Born-Oppenheimer approximation then is used to vary adiabatically the positions of the nuclei, letting the electrons adjust their motion at any time to the momentaneous external field of the nuclei. Since the quantal many-electron problem is still too complicated, one starts from the Hartree-Fock approximation for the electronic wavefunctions and then treats their correlations perturbatively in a hierarchy of  $n$ -particle- $n$ -hole configuration interactions. This approach is, for practical reasons, limited to small clusters ( $N$  up to about 20) and to a strict  $T=0$  treatment; no zero point motion of the nuclei is included. (See a recent review article of Koutecky *et al.*, 1991, on this subject.)

### 2.3) Molecular dynamics and simulated annealing

The 'molecular dynamics' method is more ambitious in one point: to include the dynamics of the nuclei by solving their classical equations of motion. The price to pay is that the electrons cannot all be treated quantum-mechanically. Usually, they are treated in density functional theory (see Sect. 3). Car and Parrinello (1985) formulated a theory which couples the classical Newton equations for the nuclei to the quantum-mechanical Kohn-Sham equations of the electrons. In the applications to metal clusters, a further simplification is made by only treating the valence electrons explicitly, i.e., by using the electronic Hamiltonian (4) above. In this method, finite temperature effects can be included (Andreoni, 1991).

Often, however, a finite temperature is only used to allow the system to relax into the lowest minimum of its total energy and to determine in this way the optimal

ground state configuration. This is usually achieved by the 'simulated annealing' technique (Kirkpatrick *et al.*, 1983). A slightly modified version of this technique was used by Manninen (1986) to calculate for the first time the structure of small Na clusters with  $N \leq 8$ .

Small Al clusters with  $N$  up to 10 have recently been calculated by Jones (1991) and a series of small Na clusters ( $N \leq 10$ ) by Röthlisberger and Andreoni (1991). The results obtained so far by the molecular dynamics method for the ground-state geometry of metal clusters are not much different from those found in the quantum-chemical 'ab initio' calculations.

#### 2.4) Static mean field models

The next step is to ignore totally the motion of the nuclei, using only the electronic Hamiltonian (4) — including, eventually, the potential energy part of (3) — and treating Coulomb exchange and correlations of the electrons in density functional theory. This represents the static limit of molecular dynamics. The ionic structure is represented by the external potential  $V_I$  (5) or a corresponding pseudopotential (6).

The solution of this mean field problem still requires a fully 3-dimensional solution of the electronic Kohn-Sham equations; the optimal geometry of the ions entering the potential  $V_I$  must hereby be guessed. Several kinds of simplification have been used in order to avoid, on one hand, the systematic search of the ground state geometry — which would lead back to some form of molecular dynamics — and, on the other hand, the difficulties of solving a 3-dimensional Schrödinger equation; mostly, a spherical symmetry of the system was imposed (see, e.g., Iñiguez *et al.*, 1989).

The most dramatic and efficient simplification is to average out totally the ionic structure, replacing the charge distribution of the ions by a constant background charge in a finite (spherical or deformed) volume. This is the 3-dimensional, finite-size version of the *jellium model* which has already long ago been successfully used for the description of metallic bulk and surfaces properties (Lang and Kohn, 1970 - 1973).

The total neglect of the ionic structure is more justified than one perhaps might think at first sight: the pseudopotentials have no singularities and their sum in  $V_I$  is, indeed, a rather smooth function. This is the combined effect of screening and the Pauli principle, coming from the inner core electrons which fill the lowest orbitals in



the Coulomb-like potentials of the individual nuclei. We refer to textbooks on solid state physics (see, e.g., Ashcroft and Mermin, 1976) for a more detailed discussion.

For finite clusters a wealth of papers, initiated by Ekardt (1984) and Beck (1984), has shown that a selfconsistent and essentially parameter-free microscopic jellium model calculation can account qualitatively, and in many cases even quantitatively, for many experimentally observed properties of metal clusters, in particular those of alkali metals (see also the lectures of S. Bjørnholm). Deformation (axial or triaxial) of the jellium background or a finite temperature of the electrons can be included at reasonable cost in the jellium model. Some of these calculations will be reviewed in Sec. 4.

The justification of the jellium model for the description of microclusters is, and will remain, an object of much debate and research. However, its undoubted virtue is that it can be applied also to large clusters with many hundreds or thousands of atoms, where the more structural models cannot be applied for practical reasons. The most beautiful example is the correct explanation of shells and supershells in large alkali clusters which will be given further account in Sec. 4.4.

### 2.5) Semiclassical and classical approaches

One more simplification can be made which leads to a considerable gain of efficiency in treating very large systems: the neglect of shell effects. This is done automatically by the explicit use of semiclassical approximations to the kinetic energy functional  $\tau[\rho]$ . The density functional formalism can then be exploited for direct density variational calculations: one no longer varies many electronic single-particle wavefunctions, but one single function, the electronic density  $\rho(\mathbf{r})$  (or, if relevant, two spin densities). Hereby the single-particle structure, and with it the shell effects, are sacrificed. But the advantage is an enormous gain in simplicity and calculational speed, and still such a model gives interesting results of average properties of the considered system. The famous prototype of such a model is the Thomas-Fermi (TF) model of the atom.

Extensions of the TF model (TFWDG, ETF,...) have been developed since long ago and been successfully used for finite fermion systems in many branches of physics. The variation of the density  $\rho(\mathbf{r})$  can either be done exactly, leading to an Euler-Lagrange type (integro-)differential equation, or in restricted variational spaces using

trial density functions. In fact, the first selfconsistent jellium model calculations for spherical metallic clusters have been done using such a semiclassical density variational method by Cini (1975). Later semiclassical calculations have been done by Snider and Sorbello (1983), Brack (1989), Serra *et al.* (1989, 1990) and by Engel and Perdew (1991).

Many average properties of metal clusters can be described in such density variational calculations. A more formal and fundamental interest of this approach is the possibility to connect the microscopic models to purely classical ones. In the large- $N$  limit, the clusters behave like classical spheres or liquid droplets; this transition can, indeed, be quantitatively pursued. In fact, a systematic 'leptodermous' expansion (see Myers and Swiatecki, 1969, for the nuclear case) of the semiclassical density variational results for spherical clusters allows for a selfconsistent determination of their surface and curvature energies, leading to the selfconsistent foundation of a classical liquid drop model, as it has been done in nuclear physics. Likewise, the asymptotic behaviour of electronic ionization potentials and affinities and their classical limits, which have received much attention in the literature, can be studied rigorously using this technique (see, e.g., Seidl *et al.*, 1991, and the literature quoted therein). Also, the collective multipole excitation frequencies obtained in a random phase (RPA) description can be shown in the classical limit (Brack, 1989) to go over to the so-called surface plasmon frequencies calculated by Mie (1908) (see also Sec. 4.2 and Fig. 2 below).

### 3. DENSITY FUNCTIONAL THEORY

We start from the Hamiltonian of a system of  $Z$  electrons moving in an external potential  $V_{ext}(\mathbf{r})$  and interacting through the Coulomb forces:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^Z \left\{ \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + V_{ext}(\mathbf{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_{j(\neq i)=1}^Z \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \right\}. \quad (7)$$

The exact wavefunction  $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_Z)$  belonging to this Hamiltonian can in general not be calculated. From it we define the one-body density matrix<sup>1</sup>  $\rho_1(\mathbf{r}', \mathbf{r})$ :

$$\rho_1(\mathbf{r}', \mathbf{r}) = \int d^3r_2 \int d^3r_3 \dots \int d^3r_z \Psi^*(\mathbf{r}', \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_z) \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_z). \quad (8)$$

---

<sup>1</sup>For the sake of simplicity, and since they will not really be needed here, we do not exhibit the spin degrees of freedom.

Its diagonal part is the density  $\rho(\mathbf{r})$  which shall be normalized to the number  $Z$  of electrons:

$$\rho(\mathbf{r}) = \rho_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}), \quad \int \rho(\mathbf{r}) d^3r = Z. \quad (9)$$

In both Hartree-Fock (HF) theory and density functional theory, the density  $\rho(\mathbf{r})$  is written in terms of single-particle wavefunctions  $\varphi_i(\mathbf{r})$ :

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^Z |\varphi_i(\mathbf{r})|^2. \quad (10)$$

In HF theory the ground-state wavefunction of the  $Z$ -body system is approximated by a Slater determinant  $\Phi$  built from a complete set  $\{\varphi_\alpha(\mathbf{r})\}$  of single-particle wavefunctions:

$$\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_Z) = \det |\varphi_i(\mathbf{r}_j)|_{i,j=1,2,\dots,Z}. \quad (11)$$

The density matrix (8) then takes the form

$$\rho_1(\mathbf{r}', \mathbf{r}) = \sum_{i=1}^Z \varphi_i^*(\mathbf{r}') \varphi_i(\mathbf{r}), \quad (12)$$

from which Eq. (10) follows. The choice of the single-particle wavefunctions  $\varphi_i$  is governed by a variational principle: One makes the expectation value of the total Hamiltonian (7) between the Slater determinants (11) stationary with respect to the wavefunctions  $\varphi_i$ , subject to the condition of their orthogonalization by means of Lagrange multipliers  $\varepsilon_i$ . This leads to the so-called HF equations which are discussed extensively in J.-F. Berger's lectures.

Density functional theory (DFT) goes beyond the HF approach in that correlations are taken into account which are not contained in the HF energy — however, at the cost of an approximate treatment of the Coulomb exchange terms. The basic idea of DFT is almost as old as quantum mechanics and has already been used by Thomas (1927) and Fermi (1928) in their famous work: to calculate the total energy of a system by an integral over an expression depending only on the local density  $\rho(\mathbf{r})$ :

$$E_{tot} = \int \mathcal{E}[\rho(\mathbf{r})] d^3r = E[\rho]. \quad (13)$$

Mathematically speaking, the energy is assumed to be a functional of the local density  $\rho(\mathbf{r})$ , denoted by  $E[\rho]$ . The formal basis of the ensuing theory was laid by Hohenberg and Kohn (1964) in their famous theorem which they proved for a non-degenerate

electronic system. A more general proof, independent of ground-state degeneracy and of the so-called  $V$ -representability assumed by Hohenberg and Kohn, was given by Levy (1989) for this theorem which states that *the exact ground-state energy of a correlated electron system is a functional of the local density  $\rho(\mathbf{r})$* , and that this functional has its variational minimum when evaluated for the exact ground-state density. This means that, ideally, the variational equation

$$\frac{\delta}{\delta\rho(\mathbf{r})} \left[ E[\rho(\mathbf{r})] - \lambda \int \rho(\mathbf{r}) d^3r \right] = 0, \quad (14)$$

using the Lagrange multiplier  $\lambda$  to fix the number of particles according to (9), would lead to the knowledge of the exact ground-state energy and density — if the exact functional  $E[\rho]$  were known (which, alas, it is not).

We do not need to go into further details about this basic theorem and the general formalism of DFT, since this is the subject of many excellent reviews. [For a recent review on DFT and its applications in atomic, molecular and solid state physics, see Jones and Gunnarsson (1989); further reviews are quoted therein.] For further reference, let us just sketch the main steps and list the most important formulae. The usual way to break up the energy functional (13) for the Hamiltonian given by Eq. (7) is:

$$E[\rho] = T_s[\rho] + \int \left\{ V_{ext}(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}) + \frac{1}{2}V_H[\rho(\mathbf{r})] \right\} d^3r + E_{xc}[\rho]. \quad (15)$$

Hereby  $T_s[\rho]$  contains that part of the kinetic energy which corresponds to a system of *independent* particles with density  $\rho$ , and  $V_H(\mathbf{r})$  is the Hartree (or direct, or classical) Coulomb potential

$$V_H(\mathbf{r}) = e^2 \int \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3r'. \quad (16)$$

The last term in (15) is the so-called *exchange-correlation energy*; it contains the exchange part of the Coulomb energy plus all the contributions due to the other correlations (hereby also a correlation part of the kinetic energy), i.e. due to the fact that the exact wavefunction is not a Slater determinant.

$E_{xc}[\rho]$  is not known exactly for any finite interacting fermion system, and it is a matter of state-of-the-art of DFT to use more or less fancy approximations to it. The same holds for the kinetic energy functional  $T_s[\rho]$  which is not known explicitly for many-fermion systems. The approximations derived from the Thomas-Fermi model

and its extensions (ETF etc.) allow to perform the direct density variation (14), as briefly sketched in Sec. 2.5 above.

In order to avoid the difficulty of finding an explicit density functional for the kinetic energy, Kohn and Sham (1965) proposed to write the density  $\rho(\mathbf{r})$  in the form of Eq. (10) in terms of some trial single-particle wavefunctions  $\varphi_i(\mathbf{r})$ . This is, in fact, possible for any realistic, non-negative normalizable density (Gilbert, 1975). The non-interacting part of the kinetic energy density  $\tau(\mathbf{r})$  can then be given in the form

$$\tau(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^Z |\nabla\varphi_i(\mathbf{r})|^2 \quad (17)$$

in terms of the same  $\varphi_i(\mathbf{r})$ . The variation (14) of the energy functional can now be done through a variation of the trial functions  $\varphi_i(\mathbf{r})$  with a constraint on their norms like in the HF method, except that the HF ground-state energy  $\langle\Phi|\hat{H}|\Phi\rangle$  here is replaced by  $E[\rho]$  (15). This leads to the Kohn-Sham (KS) equations

$$\{\hat{T} + V_{KS}(\mathbf{r})\} \varphi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i \varphi_i(\mathbf{r}) \quad (18)$$

in which the *local* potential  $V_{KS}(\mathbf{r})$  is a sum of three terms:

$$V_{KS}(\mathbf{r}) = V_{KS}[\rho(\mathbf{r})] = V_{ext}(\mathbf{r}) + V_H[\rho(\mathbf{r})] + V_{xc}[\rho(\mathbf{r})]. \quad (19)$$

The first two parts are clear from above; the third term is the variational derivative of the exchange-correlation energy:

$$V_{xc}[\rho(\mathbf{r})] = \frac{\delta}{\delta\rho(\mathbf{r})} E_{xc}[\rho]. \quad (20)$$

Since both  $V_H$  and  $V_{xc}$  depend on the density, the KS equations (18) are nonlinear and must be solved selfconsistently; this is usually done iteratively like in the HF method. The important difference, however, is that the potential  $V_{KS}(\mathbf{r})$  is *local* and the KS equations therefore are much easier to solve.

A remark is necessary concerning the interpretation of the wavefunctions  $\varphi_i(\mathbf{r})$  and the energies  $\varepsilon_i$  obtained from the KS equations: they do *not* have the same physical meaning as in HF theory. The ansatz (10) for the density does *not* imply that the total wavefunction of the system here is taken to be a Slater determinant. In fact, one does not know the total wavefunction in DFT; the wavefunctions  $\varphi_i(\mathbf{r})$  are just a variational tool to obtain an approximated ground-state density. Likewise, the  $\varepsilon_i$  do

not, in general, have the meaning of single-particle energies. An exception is made by the energies of the highest occupied KS level ( $\epsilon_{HO}$ ) and the lowest unoccupied KS level ( $\epsilon_{LU}$ ) on either side of the Fermi energy: they can be used to estimate ionization potentials and electron affinities, respectively (see, e.g., Levy and Perdew, 1985, and references quoted therein).

The DFT can easily be extended to take the electron spin explicitly into account by introducing a spin-up density and a spin-down density. This leads, instead of (18), to two coupled equations for the two spin densities. Since there is no need, so far, to make use of this spin density formalism for metallic clusters, we refer to the literature for further details (see, e.g., Jones and Gunnarsson, 1989; Dreizler and Gross, 1990).

Another extension of DFT concerns the inclusion of a finite temperature  $T > 0$  of the electrons. Mermin (1965) derived the Hohenberg-Kohn theorem and the Kohn-Sham formalism at  $T > 0$  for a grand canonical system of electrons. Later Evans (1979) showed that the DFT also applies to canonical systems. In essence, one goes over from the (internal) energy  $E[\rho]$  (15) of the system to the *free energy*  $F[\rho]$ :

$$F[\rho] = E[\rho] - TS_s[\rho], \quad (21)$$

where  $S_s$  is noninteracting part of the entropy. The exchange-correlation energy  $E_{xc}[\rho]$  will, in general, depend explicitly on  $T$  (i.e., not only through the density). The Kohn-Sham formalism then is obtained by including into the definition of the densities (10,17) the finite-temperature occupation numbers  $n_i$ :

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_i |\varphi_i(\mathbf{r})|^2 n_i, \quad \tau(\mathbf{r}) = \sum_i |\nabla \varphi_i(\mathbf{r})|^2 n_i, \quad \sum_i n_i = N \quad (22)$$

and by minimizing  $F[\rho]$  with respect to both the  $\varphi_i$  and the  $n_i$ . Since  $S_s$  does not depend explicitly on the wavefunctions  $\varphi_i$ , their variation gives exactly the same form (18) of the KS equations, the only difference being that the potential  $V_{KS}$  becomes temperature dependent. Variation of the  $n_i$  gives their explicit form in terms of the  $\epsilon_i$ ; the result depends on whether one treats the system as a canonical or a grand canonical ensemble. (In the latter case, where the chemical potential  $\mu$  is used to constrain the average particle number  $N$ , one obtains the familiar Fermi occupation numbers.) For an extensive discussion of the finite-temperature DFT and calculations, we refer to a review article by Gupta and Rajagopal (1982). Its application to metallic clusters is discussed in Sec. 4.4 below.

The Kohn-Sham approach is very appealing since, ideally, it allows to reduce the correlated many-body problem to the solution of a selfconsistent one-body problem of Hartree type. The reality is that only approximate functionals for the exchange-correlation part of the energy are at hand. The simplest and most frequently applied functionals for  $E_{xc}[\rho]$  make use of the *local density approximation* (LDA): One performs more or less sophisticated many-body calculations for a hypothetical infinite system of electrons with constant density  $\rho$ , whereby the diverging Hartree energy is cancelled by embedding the electrons in a jellium-like background of opposite charge density. The resulting energy per electron is used to extract the corresponding xc-part  $e_{xc}(\rho)$  which is a function of the variable  $\rho$ . The LDA for a finite system with variable density  $\rho(\mathbf{r})$  then consists in assuming the local xc-energy density to be that of the corresponding system with density  $\rho = \rho(\mathbf{r})$ :

$$E_{xc}^{LDA}[\rho] = \int \rho(\mathbf{r})e_{xc}(\rho(\mathbf{r})) d^3r . \quad (23)$$

By construction, this approximation is exact in those regions of space where the density  $\rho(\mathbf{r})$  is constant, and it is badly justified where the density varies strongly, as e.g. in the surface region of metal clusters. In spite of its simplicity, the LDA in connection with the Kohn-Sham approach has met a considerable success in almost all branches of physics. (See, e.g., Jones and Gunnarsson, 1989, for its applications to electronic systems.) The extension to the spin density formalism is straightforward; it is usually termed 'local spin density' (LSD) formalism.

A lot of research has been done in going beyond the LDA and LSD schemes. Both gradient expansions and explicitly nonlocal forms of  $E_{xc}[\rho]$  have been developed and extensively studied. They have, however, only occasionally been applied to metallic clusters and so far not appeared to bring significant improvements over results obtained with the LDA; we therefore refrain from discussing them explicitly here.

One serious break-down of the LDA concerns the asymptotic behaviour of the KS potential for Coulombic systems. In HF theory, where the Coulomb exchange is treated exactly, it is well-known that the mean field asymptotically falls off like  $1/r$  far outside the surface of a spherical system; this is simply the field, seen by one electron which is taken far away, of the remaining spherical charge distribution. This is no longer so in the KS theory when the exchange is treated in local density ap-

proximation. In fact, the Hartree potential  $V_H$  (16) contains spurious self interaction contributions of the electrons which are exactly cancelled when the Fock potential is added to it. However, with the LDA one makes a crude approximation to the Fock potential, whereas the Hartree potential is left intact, so that this cancellation cannot take place. As a consequence, one obtains too much screening and the KS potential falls off much faster than  $1/r$ . A 'self interaction correction' (SIC), which restores the correct asymptotic behaviour of the KS potential, has therefore been introduced and tested for atomic systems (Perdew and Zunger, 1981). It makes, however, the KS potential state-dependent and thereby complicates the selfconsistent calculations appreciably.

We should point out here that the HF approach with zero-range forces, as it is widely used in nuclear physics with the Skyrme type effective interactions, is formally *identical* to the Kohn-Sham approach with a local spin density functional (except for a straightforward generalization to take effective masses into account). Having this and the Hohenberg-Kohn theorem in mind, one should be aware of the fact that correlations *are* contained in what is usually called the HF energy, albeit in an implicit way through the fit of the HF energy to physical nuclear masses.

The application of the KS method to atomic clusters becomes very complex with increasing number of atoms. The variation of the positions of all atoms and a simultaneous, fully selfconsistent treatment of all electrons in large clusters exceeds the capacities even of modern computers. For clusters consisting of simple metal atoms, in particular alkalis, one therefore exploits the approximate separability into one or a few valence electrons and an ionic core to restrict the degrees of freedom. The idea thus is to treat only the valence electrons explicitly by DFT as interacting particles in the *pseudopotentials* created by the ions. If the ionic structure is neglected altogether and replaced by a homogeneous, positive background density, one arrives at the *jellium model* which has been surprisingly successful and will be discussed in the following section.



## 4. THE SELFCONSISTENT JELLIUM MODEL

### 4.1. Basic concepts

The basic idea of the selfconsistent jellium model is to replace the distribution of the ionic cores by a constant positive background or 'jellium' density<sup>2</sup>  $\rho_{I0}$  in a finite volume and to treat only the valence electrons explicitly in the mean field approximation, either microscopically as described in this section, or semiclassically (see Sec. 2.5). The jellium background may be either spherical, ellipsoidal or arbitrarily deformed.

Almost all jellium calculations so far have been performed within DFT. The total energy of the cluster is therefore expressed as a functional of the local electron density  $\rho(\mathbf{r})$  by:

$$E[\rho] = T_s[\rho] + E_{xc}[\rho] + \int \left\{ V_J(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}) + \frac{1}{2}\rho(\mathbf{r}) \left[ e^2 \int \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3r' \right] \right\} d^3r + E_J. \quad (24)$$

The notation here is as in Sec. 3 above;  $V_J$  and  $E_J$  are the potential and the total electrostatic energy, respectively, of the ionic jellium background. The energy  $E_J$  does not depend on the electron density but is included so that  $E$  represents the total binding energy of the cluster. The density  $\rho(\mathbf{r})$  must be normalized to the number  $wN$  of valence electrons:

$$\int \rho(\mathbf{r}) d^3r = wN, \quad (25)$$

where  $w$  is the valence factor (number of valence electrons per atom). By a variation of the energy  $E[\rho]$  (24) with respect to the  $\varphi_i^*(\mathbf{r})$ , one then arrives at the Kohn-Sham equations (18,19) with  $V_{ext}(\mathbf{r})$  replaced by the jellium potential  $V_J(\mathbf{r})$ .

Most applications of the jellium model to metal clusters so far were restricted to the *local density approximation* (LDA) for the exchange-correlation functional  $E_{xc}[\rho]$ . (For a recent Hartree-Fock calculation, see the remark at the end of Sec. 4.2 below.) Metal clusters (besides metal surfaces) present perhaps one of the most crucial testing grounds for the LDA, since their surfaces are typically much steeper than those of atoms or small molecules. However, the success of the LDA in conjunction with the jellium model in describing surface energies and work functions for metal surfaces

<sup>2</sup>Throughout this paper, we denote by  $\rho$  the *particle* densities and not the charge densities. The charges (in multiples of  $e$ ) appear explicitly in all formulae with their correct signs.

(Lang and Kohn, 1970, 1971; Monnier *et al.*, 1978) — at least of alkali-like metals — has encouraged, and some extent also justified, its application to metallic clusters.

One essential point of the jellium model is that it contains only one single parameter, namely the Wigner-Seitz radius  $r_s$ , which characterizes the metal. It is related to the jellium density  $\rho_{I0}$  by

$$\rho_{I0} = \left( \frac{4\pi}{3} r_s^3 \right)^{-1}. \quad (26)$$

Otherwise, the model is completely free of parameters since the electron density is determined variationally. Usually, one takes the bulk value for  $r_s$ , corresponding to the ionic lattice in the crystal. This is, naturally, only justified for large clusters. In microclusters there is some weak experimental evidence for a decreasing density (i.e. an increase of the volume). In the jellium model we have, however, no way to determine the finite-size variation of  $r_s$ , theoretically, so that the simplest choice is that of the bulk value.

A remark about the internal consistency of the jellium model might be appropriate at this place. If we consider the inner part of a large neutral cluster and neglect the surface effects, the energy per electron  $e(\rho)$  as a function of the (constant) density  $\rho$  is given by

$$e(\rho) = \kappa\rho^{2/3} + e_{xc}(\rho), \quad (27)$$

where the first part is the kinetic energy per electron. The Coulomb energies cancel exactly if the density  $\rho$  is chosen to be equal to the jellium density  $\rho_{I0}$ , which must be done to ensure charge neutrality. If we now search for a minimum of  $e(\rho)$  (27) with respect to varying  $\rho$  (and, with it,  $\rho_{I0}$ !), we find it for values  $r_s \simeq 4 - 4.3$  a.u., depending somewhat on the detailed LDA xc-functional used. For the LDA functional of Gunnarsson and Lundqvist (1976), e.g., which has often been used for metal cluster calculations, this minimum is at  $r_s = 4.08$  a.u. In such a variational calculation there is, of course, only one metal which has a stationary value of its density in the bulk region. It is perhaps no coincidence that the jellium model works best for alkali metals, in particular sodium, with  $r_s$  values close to this minimum.

A large majority of KS calculations so far has been performed assuming spherical symmetry of the clusters. The calculation then becomes one-dimensional and is relatively easy to do for not too large clusters. We shall briefly review these calculations in Sec. 4.2. In Sec. 4.3, calculations in two and three dimensions are discussed,

corresponding to axially and non-axially deformed clusters, respectively. Finally, in Sec. 4.4, we report on recent spherical calculations for very heavy clusters at finite temperatures, focusing especially on the so-called supershell structure.

#### 4.2. Spherical jellium model

In the spherical jellium model, the ionic background density  $\rho_I(r)$  is that of a uniformly charged sphere with radius  $R_I$ :

$$\rho_I(r) = \rho_{I0}\Theta(r - R_I), \quad R_I = r_s N^{1/3}, \quad (28)$$

where the value of  $R_I$  is fixed by the number  $N$  of ions. The jellium potential  $V_J(r)$ , which replaces the sum of individual ionic potentials (5) or (6), and the energy  $E_J$  are then easy to evaluate and given by

$$V_J(r) = \begin{cases} -\frac{wNe^2}{2R_I} \left[ 3 - \left( \frac{r}{R_I} \right)^2 \right] & \text{for } r \leq R_I \\ -\frac{wNe^2}{r} & \text{for } r \geq R_I \end{cases}, \quad (29)$$

$$E_J = \frac{3}{5} \frac{(wNe)^2}{R_I}. \quad (30)$$

If the electron density is also assumed to have spherical symmetry, the total KS potential (19) is spherical and the single-particle states  $\varphi_i(r)$  will have good angular momentum quantum numbers  $\ell_i, m_i$ ; their angular parts being given by  $Y_{\ell_i, m_i}(\theta, \phi)$  in polar coordinates  $(r, \theta, \phi)$ . Eqs. (18) can then be reduced to radial Schrödinger equations for the radial parts  $R_{n_i, \ell_i}(r)$  of the wavefunctions and solved numerically on a one-dimensional mesh in the variable  $r$ . This was performed for the first time by Ekardt (1984a,b) and independently by Beck (1984a,b). As a variational, though not fully selfconsistent, precursor of this model we mention that of Martins *et al.* (1981), who replaced the selfconsistent KS potential (19) by a simple variational square-well potential. All these authors used LDA functionals for the exchange-correlation part of the energy.

Later on, many spherical KS calculations in the jellium model were performed by various groups. By way of an example, we mention here a recent review by Balbàs and Rubio (1991) which summarizes over 30 papers published by groups at Valladolid, Valencia and other Spanish universities, encompassing also semiclassical density variational calculations and extensions of the jellium model. Some recent KS calculations for very large clusters will be reported in Sect. 4.4 below.

In Figure 1 we show as an illustration the density profile  $\rho(r)$  and the total mean field  $V(r)$  of the electrons for  $\text{Na}_{198}$ , obtained both microscopically (KS) and in semiclassical (ETF) density variational calculations.

Let us summarize briefly some of the main results and successes of the spherical jellium-KS calculations. (For more details, we refer the interested reader to the forthcoming review by de Heer and Brack, 1992.)

- Magic numbers for filled spherical major shells agree with few exceptions with the observed peaks in the mass abundance spectra (see also Sect. 4.4).

- Ionization potentials (IP) and electron affinities (EA) show a good overall behaviour; the jumps of the saw-teeth are usually at right places but often too large in absolute values. This is related to the bulk value of the work function  $W$  which is asymptotically reached in the  $N \rightarrow \infty$  limit but comes out too large in the jellium model as well-known since Lang and Kohn (1970, 1971). (See Seidl *et al.*, 1991, for a discussion of the asymptotic slopes of IP and EA when plotted versus  $1/R_I$ .)

- The optical response of alkali clusters can qualitatively be well described by the jellium model in the framework of linear response theory (RPA or its equivalent, the so-called time-dependent local density approximation, TDLDA). Beck (1984b) was the first to calculate in this way static electric dipole polarisabilities and Ekardt (1984a, 1985a,b, 1986) obtained dynamical dipole polarisabilities in TDLDA. The RPA sum rule approach was used in semiclassical density variational calculations by Brack (1989) and also by Serra *et al.* (1989) for the description of the collective multipole excitations of the valence electrons, the so-called surface plasmons, with are the analogues of the nuclear isovector giant resonances. Figure 2 shows as an example the multipole frequencies, obtained for spherical clusters, and their asymptotic limits, the classical Mie frequencies (Mie, 1908). An approximation to the RPA based on local currents ("local RPA"), which is an extension of the usual sum rule approach and allows to obtain rather good RPA spectra from ground-state densities (!), has been developed by Brack (1989) and Reinhard *et al.* (1990). First microscopic RPA calculations for spherical alkali clusters were performed by Yannouleas *et al.* (1989); Bertsch (1990) wrote the first fully selfconsistent KS+RPA code using the spherical jellium model. All TDLDA or RPA results for the lowest, and most collective, dipole excitation energy are too high by about 10 – 15% with respect to the experimental peak energies (de Heer *et al.*, 1987a; Bréchnignac *et al.*, 1989; Selby *et al.*, 1991;

Tiggesbäumker *et al.*, 1991) which are systematically red-shifted with respect to the classical Mie plasmon (cf. also Fig. 2). This goes along with a too low theoretical dipole polarisability and is presumably the fault of the LDA which fails in the cluster surface. In the region  $8 < N < 18$ , several experiments show a clear splitting of the dipole peak which can only be explained by a static deformation of the corresponding clusters.

Finally, we draw attention to recent Hartree-Fock plus RPA calculations for spherical Na clusters up to  $N = 92$  within the jellium model, where the Coulomb exchange is treated exactly but no further correlations are included, by Guet and Johnson (1991). Their dipole excitation spectra resemble very much those obtained in the KS + RPA calculations just mentioned; this seems to imply that the correlation part of the  $E_{xc}[\rho]$  LDA functional does not contribute appreciably to the dipole response.

### 4.3. Deformed jellium model

Some of the shortcomings of the spherical jellium model can be removed, or at least reduced, by relaxing the spherical shape of the clusters. Indeed, there is good experimental evidence that clusters are deformed in regions between the major spherical shell closures: The phenomenological Clemenger-Nilsson model (see de Heer *et al.*, 1987b, for a discussion of this model which is just a copy of the famous Nilsson model for deformed nuclei) allows to interpret the fine structure of mass abundance spectra and the splitting of the surface plasmons of clusters in the mass regions  $8 < N < 18$  and  $20 < N < 40$  (Selby *et al.*, 1989, 1991; Tiggesbäumker *et al.*, 1991). In the Nilsson model, the potential depends on one or two deformation parameters, and the equilibrium (or ground state) shape of each cluster is calculated simply by minimizing the sum of occupied single-particle energies. Obviously, such a model is not selfconsistent in two respects: first, the density distribution of the electrons is not guaranteed to have the same shape as that of the potential (although this is approximately the case at the shapes of minimal total energy), and second, the sum of single-particle energies is far from being equal to the total binding energy of an interacting system.

It is therefore of a basic theoretical interest to verify the phenomenological potential of the Clemenger-Nilsson model by microscopic, selfconsistent calculations in the framework of density functional theory. Since in the jellium model there is no real

selfconsistency between the ionic background density and that of the electrons, this must be put in explicitly. In the deformed selfconsistent jellium model, one therefore has to assume that the ionic background density follows, on the average, the shape of the electrons. Practically, one parametrizes the deformed shape of the jellium density, lets the electrons adjust themselves in the corresponding deformed ionic potential (including their interaction and exchange-correlation effects in Kohn-Sham approximation, as usual), and then one minimizes the total energy with respect to the jellium shape. This is, or course, consistent with the spirit of the Born-Oppenheim approach used in quantum chemical and molecular dynamics calculations (see Secs. 2.2, 2.3 above), except that the microscopic ionic structure here is averaged out. Allowing for axial or nonaxial shapes of the constant ionic background density, however, brings the jellium model one step closer to those more fundamental approaches in the sense that the average geometry of the ions can be varied.

One technical problem in the deformed jellium model is that the background jellium potential  $V_J(\mathbf{r})$  is no longer a simple analytical function as in the spherical case, cf. Eq. (29). It must therefore be calculated numerically either by direct integration of the jellium density or by solving the Poisson equation. Similarly, the KS equations become more complex with decreasing symmetry of the cluster and have to be solved in two or three dimensions explicitly.

The existence of axially deformed equilibrium shapes within the framework of the selfconsistent jellium model has been confirmed in Kohn-Sham calculations for ellipsoidal clusters (Ekardt and Penzar, 1988, 1991; Penzar and Ekardt, 1990). These authors use an axially symmetric ellipsoidal jellium density with constant volume and half-axes  $z_0$ ,  $\rho_0$  given in terms of a single deformation parameter  $\delta$ , restricted by  $-2 < \delta < 2$ , and the cluster radius  $R_I$  (28)

$$z_0 = \left(\frac{2 + \delta}{2 - \delta}\right)^{2/3} R_I; \quad \rho_0 = \left(\frac{2 - \delta}{2 + \delta}\right)^{1/3} R_I; \quad (31)$$

The electronic density is assumed to have axial symmetry, too, and the Kohn-Sham equations are solved in spheroidal coordinates, using again the LDA functional of Gunnarsson and Lundqvist (1976) for the xc-energy. The total energy of the cluster must be calculated for each deformation  $\delta$ , and the ground state is found by minimizing the resulting energy with respect to  $\delta$ .

Results of this spheroidal model for IP's and EA's for sodium and copper clusters

(Ekardt and Penzar, 1988; Penzar and Ekardt, 1990) show that the shell structure in these quantities is appreciably reduced by the deformation effects and in reasonable agreement with experiment, but still somewhat exaggerated. Ekardt and Penzar (1991) also used their spheroidal model in TDLDA to calculate collective photoabsorption spectra of deformed clusters; as in the Clemenger-Nilsson model, the right order of magnitude of the splitting was found for the dipole peaks.

Triaxial deformations of small sodium clusters have recently been investigated in the selfconsistent KS framework by Lauritsch *et al.* (1991). Here, a triaxial ellipsoid with constant volume was assumed for the jellium density; the jellium density was given a diffuse surface with a width of approximately one atomic unit. The KS equations (in LDA) were then solved numerically on a three-dimensional mesh for each given deformation of the jellium background. Potential energy surfaces of these triaxially deformed clusters were presented as functions of the two Hill-Wheeler coordinates  $(\beta, \gamma)$  (Hill and Wheeler, 1953).  $\text{Na}_{12}$  was found to have its minimum for a triaxial shape, as can be seen from Figure 3, whereas  $\text{Na}_{14}$  is predicted to be axial with a prolate minimum; this confirms the results of the Clemenger-Nilsson model. An interesting phenomenon in the results of Lauritsch *et al.* (1991) is the occurrence of several almost degenerate shape isomers with different spherical, axial or non-axial shapes, separated by barriers of  $\sim 0.5 - 1$  eV. This shape isomerism reminds, indeed, of that found in *ab initio* quantum chemical and molecular dynamics calculations.

#### 4.4. Finite temperature calculations and supershells

In many experiments, clusters are produced at finite temperatures of up to several hundred Kelvin or even more (see the lectures by Bjørnholm). The manifestation of shell structure in the abundance spectra of cluster beam experiments is thought to be a result of evaporation of neutral atoms by the hot clusters: the closer the number of valence electrons gets to a magic number corresponding to a filled spherical shell, the more stable the cluster will be and the smaller the probability for evaporation of a further atom, so that finally, at the time of detection — when the beam has cooled off — the magic species are the most abundant.

The question therefore arises to which extent a finite temperature affects the magnitude of the electronic shell effects themselves. It is well-known from nuclear physics, that large enough temperatures smear out the shell structure in a finite

fermion system (Bohr and Mottelson, 1975, Brack and Cuentin, 1981). In particular, the observability of the so-called super-shell structure (Nishioka *et al.*, 1990) may become difficult due to these temperature effects.

At first sight one may think that even many hundred Kelvin are small on the scale of the electronic single-particle energies, so that their effect should be negligible. This is certainly true for microclusters with less than a hundred atoms, where the main spacing between electronic levels corresponds to several thousand Kelvin. However, in very large clusters in the mass region  $N \gtrsim 1000 - 2000$ , which now have become available in expansion sources, the spectra are much more compressed and the temperatures in question do have a noticeable effect. Furthermore, the detailed shape of the abundance spectra depends in a rather subtle way on the first and second differences of the total cluster (free) energies with respect to the atomic number,  $\Delta_1 F(N)$  and  $\Delta_2 F(N)$ , respectively, such that the temperature smearing effects can, indeed, become visible in the experimental results (Björnholm *et al.*, 1991).

These questions were addressed recently in finite-temperature Kohn-Sham-LDA calculations for sodium clusters in the spherical jellium model (Brack *et al.*, 1991a,b; Genzken and Brack, 1991). The electrons are treated as a canonical system in the heat bath of the ions; the canonical partition function is calculated exactly and from it, all relevant quantities such as the free energy, entropy and occupation numbers are derived selfconsistently. We refer to Brack *et al.* (1991b) for the details of these calculations and illustrate here the results with two figures.

A standard quantity for studying shell effects is the shell-correction energy

$$\delta F(N) = F(N) - \bar{F}(N), \quad (32)$$

where  $\bar{F}(N)$  is the *average* free energy of a cluster with  $N$  atoms. Here we have simply used a liquid drop model (LDM) expansion

$$\bar{F}(N) = F_{LDM}(N) = e_b N + a_s N^{2/3} + a_c N^{1/3}, \quad (33)$$

determining the surface energy  $a_s$  and the curvature energy  $a_c$  by a simple eye fit such that  $\delta F(N)$  is oscillating around zero; this is done separately at each temperature. The bulk energy is fixed at its theoretical value  $e_b = -2.2567$  eV, obtained for  $r_s = 3.96$  a.u., independently of temperature.

The results for  $\delta F(N)$  are plotted in Fig. 4 versus  $N^{1/3}$  at the three temperatures  $T = 0$  K, 400 K and 600 K. The magic numbers are given in the curve for  $T = 0$  K



at the corresponding minima. The amplitude of the shell effects is clearly reduced with increasing temperature. Two minor shells in the transition region at  $N = 506$  and  $N = 638$ , still visible at  $T = 0$  K, are wiped out at  $T > 0$ . All other minima become less sharp than at  $T = 0$ .

The salient feature of the curves in Fig. 4 is the beating pattern of the otherwise quite regular shell structure. Such a pattern was shown by Balian and Bloch (1971) to be a very general feature of quantal eigenmodes in a cavity. The method of Balian and Bloch was applied to metal clusters by Nishioka *et al.* (1990) who termed the beating pattern "super-shells"; they used a phenomenological Woods-Saxon potential for the valence electrons.

The shell-correction energy  $\delta F(N)$  is, however, not directly observable. As mentioned above, the mass abundances in expansion beams depend rather on the differences  $\Delta_1 F(N)$  and  $\Delta_2 F(N)$  which are even more sensitive to the temperature. In fact, these latter quantities were shown by Brack *et al.* (1991) to disappear completely for  $N \gtrsim 600$  at temperatures  $T \simeq 600$  K or above, putting in doubt the survival of the super-shell structure which only starts at  $N \gtrsim 1000$ .

In order to make the super-shells visible, nevertheless, Pedersen *et al.* (1991) proposed to scale up the mass yields by a factor depending exponentially on  $N^{1/3}$ . The temperature dependence of  $\delta F(N)$  — and thus also of the differences  $\Delta_1 F(N)$  and  $\Delta_2 F(N)$  in which the average energies practically cancel — can be schematically estimated (Bohr and Mottelson, 1975) to go like

$$\delta F(T) = \delta F(0) \frac{t}{\text{Sinh}t}; \quad t = T \frac{2\pi^2}{\hbar\omega}. \quad (34)$$

Expanding for large temperatures and using  $\hbar\omega \propto N^{-1/3}$ , this gives, indeed, a temperature suppression factor  $\propto \exp(-N^{1/3})$ . Therefore, Pedersen *et al.* (1991) in the analysis of their spectacular experiments multiplied the logarithmic derivatives of the mass yields  $I_N$  by  $\sqrt{N} \exp(cN^{1/3})$ , where  $c$  is a constant containing an effective temperature, and the root factor compensates the decrease of the shell correction at  $T = 0$  with increasing  $N$  (Bohr and Mottelson, 1975).

We refer to Bjørnholm's lectures for the details of this analysis and of its results in which the super-shell structure has, indeed, been put into evidence experimentally for the first time. In Figure 5, we have copied the relevant figure of Pedersen *et al.* (1991) and compare it to the theoretical KS results by Genzken and Brack

(1991). Here the negative second difference  $-\Delta_2 F(N)$  is shown, multiplied by the same enhancement factor (with the value of  $c$  readjusted by  $\sim 10\%$ ). Although the assumption  $-\Delta_2 F(N) \propto \Delta_1 \ln I_N$  is a very crude one (see Bjørnholm *et al.*, 1991, for a discussion on this point), the agreement of the two curves is striking. This demonstrates that the *finite temperature of the valence electrons* which alone contribute to the quantities shown here — the ionic parts of the free energies cancel in the differences  $\Delta_2 F(N)$  and  $\Delta_1 \ln I_N$  — plays an essential role in the mass yields and can be correctly taken into account in selfconsistent KS calculations even in the simple jellium model. No need to stress that no other, i.e. more structural, model will ever be used to calculate the super-shells in such large systems!

## REFERENCES

- Andreoni, W., 1991, Z. Phys. D 19, 31
- Ashcroft, N.W., Mermin, N.D., 1976, *Solid State Physics* (Holt-Saunders Intern. Editions)
- Balbàs, L.C., Rubio, A., 1991, Ann. Phys. (Spain) in print
- Balian, R., Bloch, C., 1971, Ann. Phys. (N. Y.) 69, 76
- Beck, D.E., 1984a, Solid State Commun. 49, 381
- Beck, D.E., 1984b, Phys. Rev. B 30, 6935
- Bertsch, G., 1990, Comput. Phys. Commun. 60, 247
- Bertsch, G.F., Tomanek, D., 1989, Phys. Rev. B 40, 2749
- Bjørnholm, S., Borggreen, J., Echt, O., Hansen, K., Pedersen, J., Rasmussen, H.D., 1991, Z. Phys. D 19, 47
- Bohr, A., Mottelson, B.R., 1975, *Nuclear Structure II* (Benjamin)
- Bréchnignac, C., Cahuzac, Ph., Leygnier, J., Pflaum, R., Roux, J.Ph., Weiner, J., 1989, Z. Phys. D 12, 199
- Brack, M., 1989, Phys. Rev. B 39, 3533
- Brack, M., Quentin, P., 1981, Nucl. Phys. A 361, 35
- Brack, M., Genzken, O., Hansen, K., 1991a, Z. Phys. D 19, 51
- Brack, M., Genzken, O., Hansen, K., 1991b, Z. Phys. D 21, 65
- Car, R., and Parrinello, M., 1985, Phys. Rev. Lett. 55, 2471
- Cini, M., 1975, J. Catal. 37, 187

- de Heer, W.A., Brack, M., 1992, review article in preparation for Rev. Mod. Phys.
- de Heer, W.A., Selby, K., Kresin, V., Masui, J., Vollmer, M., Chatelain, A., Knight, W.D., 1987a, Phys. Rev. Lett. 59, 1805
- de Heer, W.A., Knight, W.D., Chou, M.Y., Cohen, M.L., 1987b, Solid State Physics 40, 93
- Dreizler, R., Gross, E.K.U., 1990, *Density Functional Theory* (Springer, Berlin)
- Ekardt, W., 1984a, Phys. Rev. Lett. 52, 1925
- Ekardt, W., 1984b, Phys. Rev. B 29, 1558
- Ekardt, W., 1985a, Phys. Rev. B 31, 6360
- Ekardt, W., 1985b, Phys. Rev. B 32, 1961
- Ekardt, W., 1986, Phys. Rev. B 34, 526
- Ekardt, W., Penzar, Z., 1988, Phys. Rev. B 38, 4273
- Ekardt, W., Penzar, Z., 1991, Phys. Rev. B 43, 1322
- Engel, E., Perdew, J.P., 1991, Phys. Rev. B 43, 1331
- Evans, R., 1979, Adv. in Phys. 28, 143
- Fermi, E., 1928, Z. Phys. 48, 73
- Genzken, O., Brack, M., 1991, Phys. Rev. Lett., in print
- Gilbert, T.L., 1975, Phys. Rev. B 12, 2111
- Guet, C., Johnson, W.R., 1991, Preprint C.E.N.G. - DRFMC/SPHAT
- Gunnarsson, O., Lundqvist, B.I., 1976, Phys. Rev. B 13, 4274
- Gupta, U., Rajagopal, A.K., 1982, Physics Reports 87, 259
- Hill, D.L., Wheeler, J.A., 1953, Phys. Rev. 89, 1102
- Hohenberg, P., Kohn, W., 1964, Phys. Rev. 136, B864
- Iñiguez, M.P., Lopez, M.J., Alonso, J.A., Soler, J.M., 1989, Z. Phys. D 11, 163
- Jones, R.O., 1991, Phys. Rev. Lett. (in print)
- Jones, R.O., Gunnarsson, O., 1989, Rev. Mod. Phys. 61, 689
- Kirkpatrick, S., Gelatt, C.D., and Vecchi, M.P., 1983, Science 220, 671
- Kohn, W., Sham, L.J., 1965, Phys. Rev. 140, A1133
- Koutecký, J., *et al.*, 1991, J. Chem. Phys., in print
- Lang, N.D., Kohn, W., 1970, Phys. Rev. B 1, 4555
- Lang, N.D., Kohn, W., 1971, Phys. Rev. B 3, 1215
- Lang, N.D., Kohn, W., 1973, Phys. Rev. B 7, 3541
- Lauritsch, G., Reinhard, P.-G., Meyer, J., Brack, M., 1991, Phys. Lett. A, in press

- Levy, M., 1979, Proc. Natl. Acad. Sci. (USA) 76, 6062
- Levy, M., Perdew, J.P., 1985, Phys. Rev. A 32, 2010
- Manninen, M., 1986, Phys. Rev. B 34, 6886
- Martins, J.L., Car, R., Buttet, J., 1981, Surf. Sci. 106, 265
- Mermin, N.D., 1965, Phys. Rev. 137, 1441A
- Mie, G., 1908, Ann. Phys. (Leipzig) 25, 377
- Monnier, R., Perdew, J.P., Langreth, D.C., Wilkins, J.W., 1978, Phys. Rev. B 18, 656
- Myers, W.D., Swiatecki, W.J., 1969, Ann. Phys. (N.Y.) 55, 395
- Nishioka, H., Hansen, K., Mottelson, B.R., 1990, Phys. Rev. B 42, 9377
- Pedersen, J., Bjørnholm, S., Borggreen, J., Hansen, K., Martin, T.P., Rasmussen, H.D., 1991, Preprint NBI-91-22, submitted to Nature
- Penzar, Z., Ekardt, W., 1990, Z. Phys. D 17, 69
- Perdew, J.P., Zunger, A., 1981, Phys. Rev. B 23, 5048
- Röthlisberger, U., Andreoni, W., 1991, Z. Phys. D 20, 243
- Reinhard, P.-G., Brack, M., Genzken, O., 1990, Phys. Rev. A 41, 5568
- Seidl, M., Meiwes-Broer, K.-H., Brack, M., 1991, J. Chem. Phys. 95, 1295
- Selby, K., Vollmer, M., Masui, J., Kresin, V., de Heer, W.A., Knight, W.D., 1989, Phys. Rev. B 40, 5417
- Selby, K., Kresin, V., Masui, J., Vollmer, M., de Heer, W.A., Scheidemann, A., Knight, W.D., 1991, Phys. Rev. B 43, 4565
- Serra, Ll., Garcias, F., Barranco, M., Navarro, J., Balbas, C., Mañanes, A., 1989, Phys. Rev. B 39, 8247
- Serra, L., Garcias, F., Barranco, M., Barberan, N., Navarro, J., 1990, Phys. Rev. B 41, 3434
- Snider, D.R., Sorbello, R.S., 1983, Phys. Rev. B 28, 5702
- Thomas, L.H., 1927, Proc. Cambr. Philos. Soc. 23, 542
- Tiggesbäumker, J., Köller, L., Lutz, H.O., Meiwes-Broer, K.-H., 1991, XIII. International Symposium on Molecular Beams, El Escorial, Spain; and to be published
- Yannouleas, C., Broglia, R.A., Brack, M., Bortignon, P.F., 1989, Phys. Rev. Lett. 63, 255

## FIGURE CAPTIONS

### Figure 1:

Variational densities  $\rho(r)$  (in units of  $\rho_{I0}$ ) and selfconsistent total potentials  $V(r)$  for the neutral  $\text{Na}_{198}$  cluster ( $r_s = 4.0$ ). Solid lines: KS results by Ekardt (1984b). Dash-dotted and dashed lines: semiclassical results using the functional  $\tau_{ETF}[\rho]$  up to 2nd and 4th order in  $\hbar$ , respectively, by Brack (1989).

### Figure 2:

Energies of surface plasmons of multipolarity  $L$  for spherical Na clusters versus jellium radius  $R_I$ . Solid lines: RPA sum-rule approximation  $\hbar\omega_L = \sqrt{m_3/m_1}$  in terms of Tassie operators  $Q_L = r^L Y_{L0}$  ( $L \neq 0$ ) and  $Q_0 = r^2$  ( $L = 0$ ). Dashed lines: centroid of collective spectrum obtained in "local RPA" (see text). All quantities evaluated in terms of semiclassical ETF densities (Brack, 1989). On the right margin: classical Mie frequencies.

### Figure 3:

Potential energy surface of  $\text{Na}_{12}$  (equidistance 0.01 Ry for dashed and 0.05 Ry for full lines) in the  $\beta, \gamma$  plane. The minimum at  $\beta = 0.54$ ,  $\gamma = 15^\circ$  is at -1.768 Ry (Lauritsch *et al.*, 1991).

### Figure 4:

Free energy shell-correction  $\delta F(N) = F(N) - F_{LDM}(N)$  for spherical Na clusters versus  $N^{1/3}$  for three different temperatures  $T$ , obtained in selfconsistent KS calculations (Genzken and Brack, 1991). LDM parameters used at  $T = 0$  K:  $a_s = 0.6259$ ,  $a_c = 0.2041$ ; at  $T = 400$  K:  $a_s = 0.5918$ ,  $a_c = 0.3796$ ; and at  $T = 600$  K:  $a_s = 0.5755$ ,  $a_c = 0.4204$  (all in eV). Numbers near the bottom are the magic numbers of filled major spherical electronic shells.

### Figure 5:

*Upper part:* Relative variation  $\langle \Delta_1 \ln I_N \rangle_{K_0}$  in experimental Na cluster abundance  $I_N$  versus  $N^{1/3}$  (Pedersen *et al.*, 1991; see this reference for the details). *Lower part:* Negative second difference  $-\Delta_2 F(N)$  of free energy obtained in selfconsistent KS calculations at  $T = 600$  K (Genzken and Brack, 1991). Both quantities are enhanced by a  $N$ -dependent factor to compensate for the temperature suppression (see text).

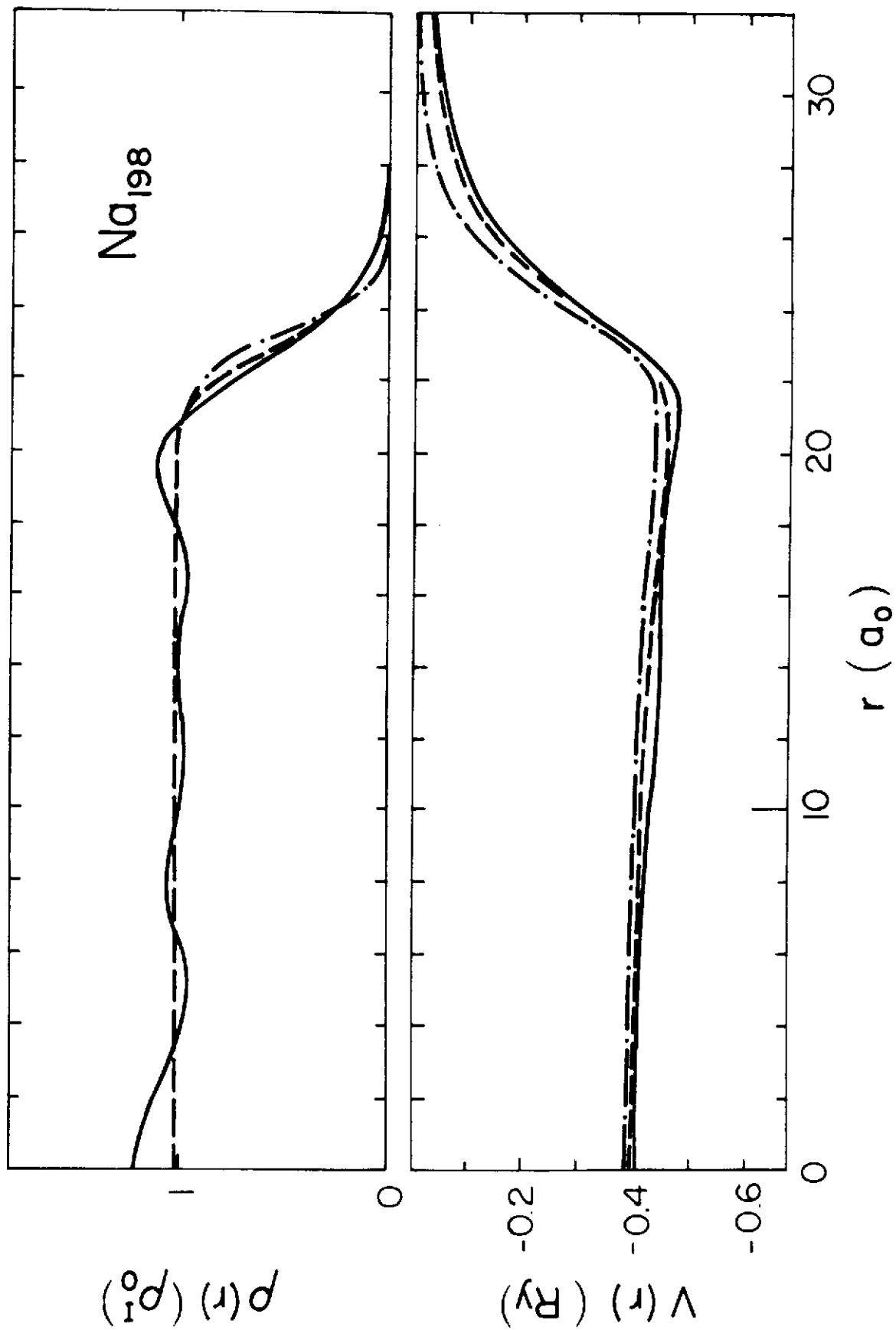


Figure 1

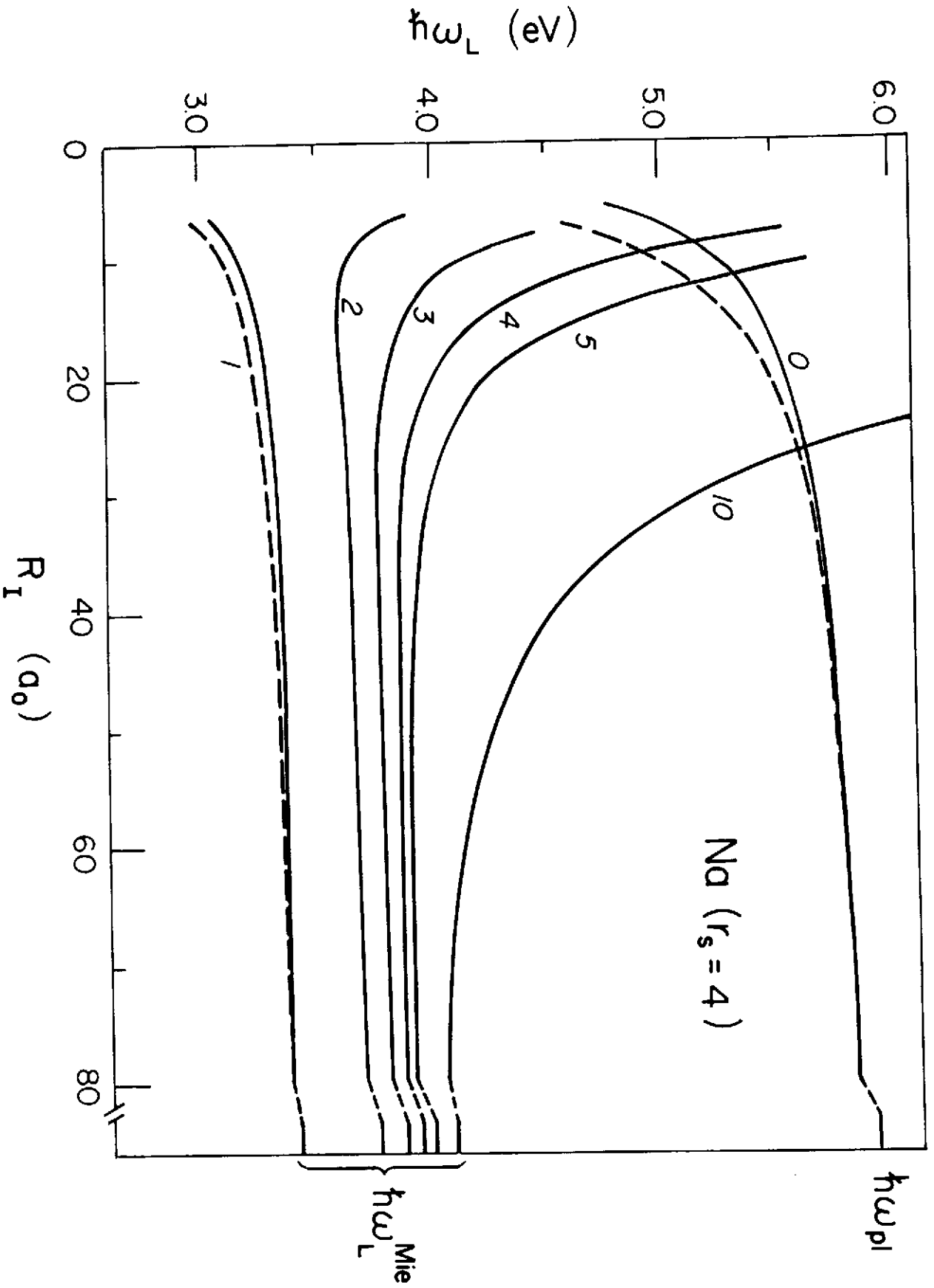


Figure 2

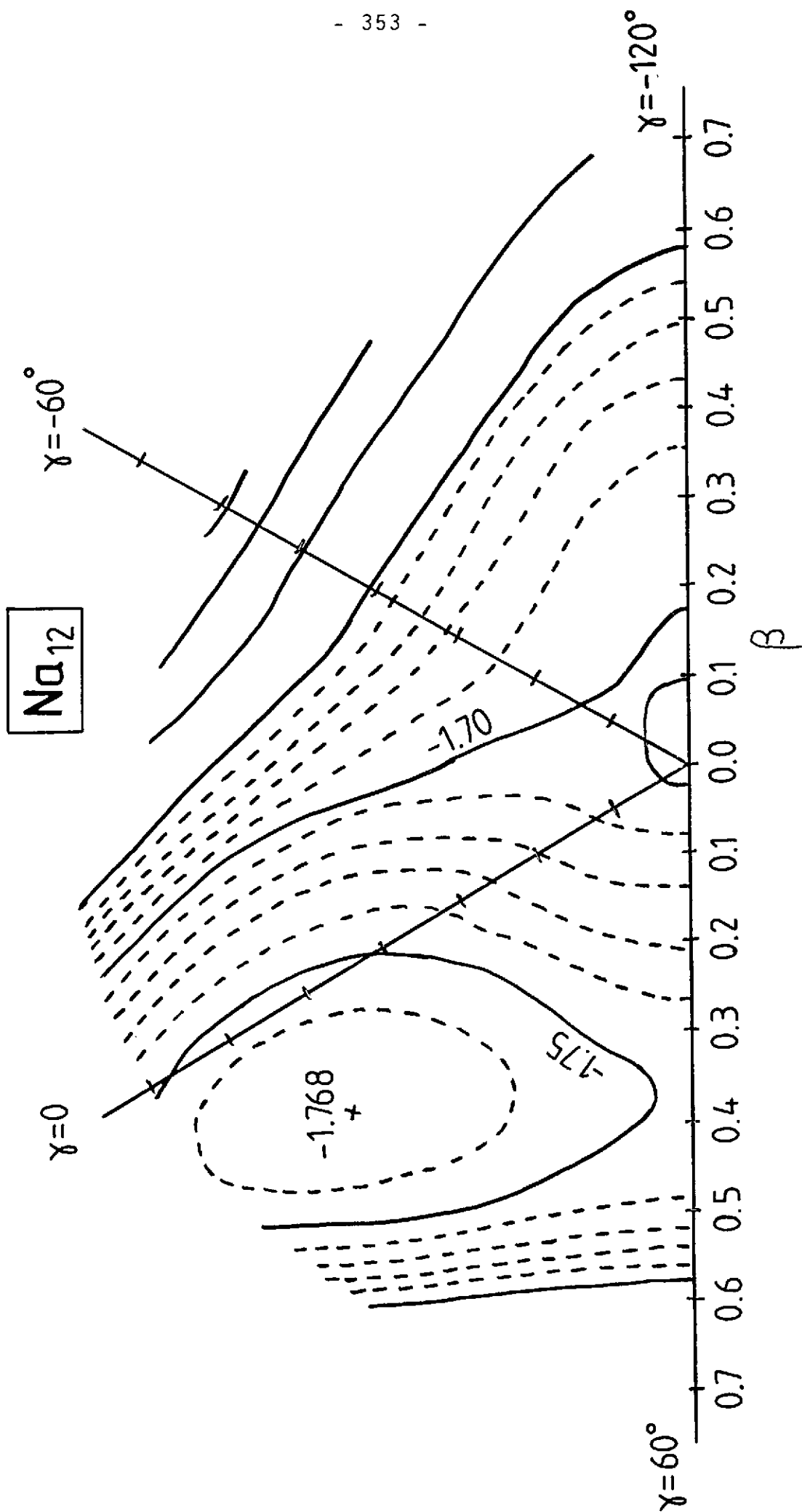


Figure 3



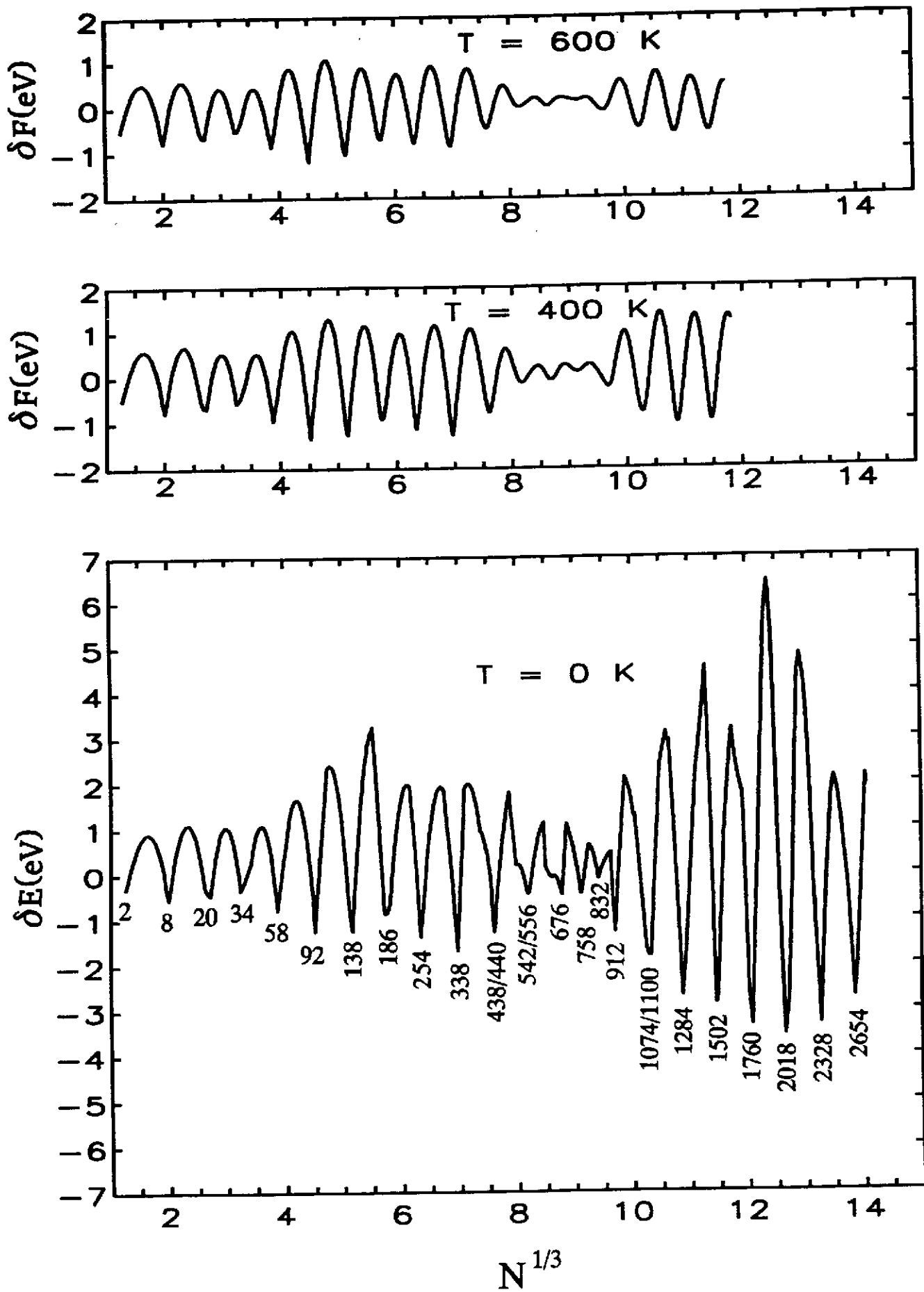


Figure 4

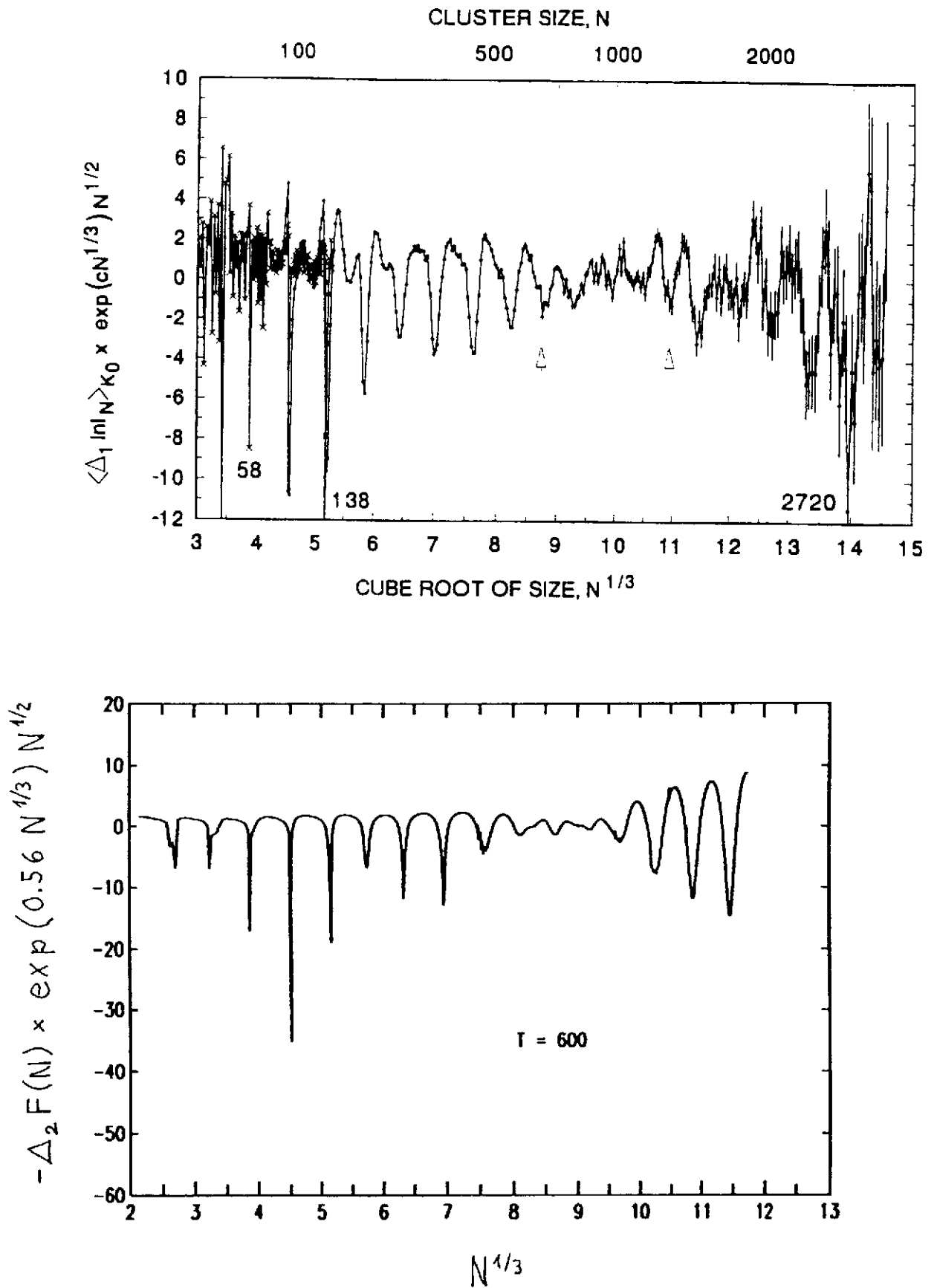


Figure 5

**TABLE RONDE**

animée par

**P. BONCHE**

*Service de Physique Théorique, CEN Saclay, Gif-sur-Yvette*



LISTE DES PARTICIPANTS 1991

- ABGRALL Y., LPT Bordeaux - rue du Solarium, 33175 Gradignan cedex  
ASTIER A., IPN Lyon - 43 Bd du 11 Novembre 1918, 69622 Villeurbanne cedex  
AZAIEZ F., IPN Orsay - BP 1, 91406 Orsay  
BALOUKA D., CRN Strasbourg - BP 20CR, 67037 Strasbourg cedex  
BARREAU G., CEN Bordeaux - Le Haut-Vigneau, 33175 Gradignan cedex  
BENTALEB M., CRN Strasbourg - BP 20CR, 67037 Strasbourg cedex  
BERGER J.F., SPTN - CE Bruyères-le-Châtel BP 12, 91680 Bruyères-le-Châtel  
BERNARDOS P., Dpto Fisica Moderna - Facultad de Ciencias, Avda de los Castros s/n, E-39005 Santander, Espagne  
BJØRNHOLM S., Niels Bohr Inst. - Blegdamsvej 17, DK-2100 Copenhague, Danemark  
BLACHOT J., CENG - BP 85X, 38041 Grenoble cedex  
BLONS J., DPhN/SEPN - CEN Saclay, 91191 Gif-sur-Yvette cedex  
BONCHE P., PhT - CEN Saclay, 91191 Gif-sur-Yvette cedex  
BOUKOUR A., Phys. Nucl. Théor. - UL Bruxelles, CP229, B-1050 Bruxelles  
BRACK M., Inst. Theoretical Physik - Postfach 397, D-8400 Regensburg  
BROHM Th., Inst. Kernphysik, TH Darmstadt - Schlossgartenstr. 9, D-6100 Darmstadt, RFA  
CAILLON J.Ch., LPT Bordeaux - rue du Solarium, 33175 Gradignan cedex  
CARLOS P., DPhN/SEPN - CEN Saclay, 91191 Gif-sur-Yvette cedex  
CHERFI Y., ENS - Dept Physique - BP 44, Vieux-Kouba, Alger, Algérie  
DELONCLE I., CSNSM - Bât. 104, 91405 Orsay campus  
DJOUADI Z., USTHB - Physique Nucléaire, BP32, El-Alia Alger, Algérie  
DOAN T.P., CEN Bordeaux - Le Haut-Vigneau, 33175 Gradignan cedex  
DRISSI S., Inst. Physique - Bd Perolles, CH-1700 Fribourg, Suisse  
DUFOUR M., CRN Strasbourg - BP 20CR, 67037 Strasbourg cedex  
GALL B., CSNSM - Bât. 104, 91405 Orsay campus  
GAZTELUMENDI S., Dpto Fisica Moderna - Facultad de Ciencias, avda de los Castros s/n, E-39005 Santander, Espagne  
GOGNY D., CEA/CESTA - BP 2, 33114 Le Barp cedex  
GOUTTE D., DPhN/SEPN - CEN Saclay, 91191 Gif-sur-Yvette cedex  
GOVAERT K., Inst. Phys. Théor. - Rijksuniv.-Gent, Proeftuistraat 86, B-9000 Gent, Belgique  
GREWE A., Inst. für Kernphysik - TH Darmstadt, Schlossgartenstr. 9, D-6100 Darmstadt, RFA  
HAAS B., CRN Strasbourg - BP 20CR, 67037 Strasbourg cedex  
HANNACHI F., CSNSM - Bât. 104, 91405 Orsay campus  
HEENEN P.H., Phys. Nucl. Théor. Math. - UL Bruxelles, CP 229, B-1050 Bruxelles, Belgique  
HEYDE K., Inst. Phys. Théor. - Rijksuniv.-Gent, Proeftuistraat 86, B-9000 Gent, Belgique  
HUBER G., Inst. Kernphysik - Gutenberg Univ., Postfach 3980, D-6500 Mainz 1  
JANSSENS R., Physics Div. - Argonne National Lab., 97000 South Cass Av., Argonne, IL 60439, USA  
KERRAMI H., Phys. Nucl. Théor. Math. - UL Bruxelles, CP 229, B-1050 Bruxelles, Belgique

- KRUGLANSKI M., Phys. Nucl. Théorique - ULB - CP 229, B-1050 Bruxelles, Belgique
- LABARSOUQUE J., LPT Bordeaux - rue du Solarium, 33175 Gradignan cedex
- LEPRETRE A., DPhN/SEPN - CEN Saclay, 91191 Gif-sur-Yvette cedex
- LIBERT J., CSNSM - Bât. 104, 91405 Orsay campus
- LIGUORI-NETO R., DPhN/SEPN - CEN Saclay, 91191 Gif-sur-Yvette cedex
- LUCAS R., DPhN/SEPN - CEN Saclay, 91191 Gif-sur-Yvette cedex
- MAGNAGO-CHARVET C., DPhN/SEPN - CEN Saclay - 91191 Gif-sur-Yvette cedex
- MEDJADI D., ENS - Dépt. Physique - BP 44, Vieux Kouba, Alger, Algérie
- MEYER J., IPN Lyon - 43 Bd 11 Novembre 1918, 69622 Villeurbanne cedex
- MEYER M., IPN Lyon - 43 Bd 11 Novembre 1918, 69622 Villeurbanne cedex
- NEYENS G., IKS - Celestijnenlaan 200D, B-3001 Leuven, Belgique
- PAYA D., DPhN/SEPN - CEN Saclay, 91191 Gif-sur-Yvette cedex
- PEDEMAY G., CEN Bordeaux - Le Haut-Vigneau, 33175 Gradignan cedex
- PHAN X.H., DPhN/SEPN - CEN Saclay, 91191 Gif-sur-Yvette cedex
- PICHON B., Observatoire Paris - DARC-LAM, F-92195 Meudon principal cedex
- PORQUET M.G., CSNSM - Bât. 104, 91405 Orsay campus
- PREVOST D., Tandem Lab. GSB 105 - McMaster Univ., 1280 Main Street W., Hamilton, Ontario, Canada
- QUENTIN P., CSNSM - Bât. 104, 91405 Orsay campus
- REDON N., IPN Lyon - 43 Bd du 11 Novembre 1918, 69622 Villeurbanne cedex
- ROMAIN P., CRN Strasbourg - BP 20CR, 67037 Strasbourg cedex
- SCHEURER J.N., CEN Bordeaux - Le Haut-Vigneau, 33175 Gradignan cedex
- SCHUCK C., CSNSM - Bât. 104, 91405 Orsay campus
- SELLAM D., CEN Bordeaux - Le Haut-Vigneau, 33175 Gradignan cedex
- SIDA J.L., DPhN/SEPN - CEN Saclay, 91191 Gif-sur-Yvette cedex
- SILVESTRE-BRAC B., ISN - 53 Av. des Martyrs, 38026 Grenoble cedex
- SZYMANSKI Z., Theor. Phys. Inst. - Warsaw Univ., ul. Hoza 69, PL-00 681 Warsaw, Pologne
- THEISEN Ch., CRN Strasbourg - BP 20CR, 67037 Strasbourg cedex
- VOSS B., Inst. Kernphysik, TH Darmstadt - Schlossgartenstr. 9, D-6100 Darmstadt, RFA
- ZIAR A., ISN Grenoble - 53 Av. des Martyrs, 38026 Grenoble cedex
- ZIEGLER C., Inst. Kernphysik, TH Darmstadt - Schlossgartenstr. 9, D-6100 Darmstadt, RFA