

# Première mise en œuvre complète du formalisme MPMH en physique nucléaire

■ N. PILLET - C. ROBIN - G. HUPIN - M. DUPUIS - D. PEÑA ARTEAGA - J.-F. BERGER / CEA – DAM Île-de-France

La complexité de la physique du noyau de l'atome a amené les physiciens à développer une diversité de modèles permettant de rendre compte de données expérimentales nombreuses. Un des graals de la physique nucléaire est d'arriver à une description universelle des noyaux *via* un modèle unique et unifié. Les méthodes de mélange de configurations se placent dans cet objectif-là.

Le noyau atomique, composé de neutrons et de protons, est un système complexe, siège de nombreux phénomènes tels que la radioactivité, les résonances géantes, la fusion, la fission, etc. Le défi théorique actuel consiste à rendre compte de cette diversité à partir de méthodes microscopiques unifiées dans lesquelles le noyau est décrit comme un ensemble de  $A$  nucléons, neutrons et protons, en interaction,  $A$  étant compris entre 2 et 300. Ces approches posent deux problématiques : la dérivation de l'interaction qui s'exerce entre les nucléons au sein du noyau et la résolution de l'équation de Schrödinger qui décrit leur dynamique.

Déduire complètement l'interaction entre nucléons à partir de l'interaction forte qui s'exerce entre les constituants du nucléon reste un défi. Par ailleurs, l'utilisation des symétries du système nucléaire permet de déduire une forme générale de l'interaction nucléaire dans le vide (interaction nue), dont les paramètres sont ajustés sur les propriétés du deuton, du triton et de diffusion de deux nucléons dans le vide. Dans le noyau, l'interaction entre nucléons est modifiée par la présence des autres nucléons ; on parle alors d'une interaction effective. Cette renormalisation est souvent prise en compte de façon phénoménologique en partant d'une forme directement paramétrée de l'interaction. L'ajustement des paramètres se fait alors sur des propriétés globales du noyau (énergies de liaison et rayons de charge).

La description théorique des états du noyau est donnée quant à elle par l'équation de Schrödinger, qui met en jeu  $A$  nucléons en interaction. Avec la puissance des ordinateurs actuels, la résolution de cette équation basée sur des interactions nues reste limitée à des petits  $A$ . L'application à des noyaux de masse plus grande est envisageable de façon limitée

avec l'introduction d'approximations dans la méthode de résolution du problème à  $A$ -corps. Afin de décrire l'ensemble de la carte des noyaux, une autre stratégie a été développée depuis des années, qui repose sur l'existence d'un champ moyen dans lequel les nucléons évoluent de manière indépendante. Cette représentation est rendue possible grâce à l'utilisation d'interactions effectives. Les corrélations restantes sont alors introduites par des extensions de la théorie qui génère le champ moyen.

Les méthodes de mélange de configurations sont parmi les plus puissantes, car elles permettent d'unifier la description des systèmes physiques corrélés dans une même approche. De par leur complexité, elles ont été mises en œuvre récemment en physique nucléaire, où la méconnaissance de l'interaction nucléaire effective à considérer et la présence de deux types de nucléons en font un défi à la fois théorique et numérique.

La méthode de mélange de configurations multi-particules-multitrous (MPMH) [1-3] est une méthode au-delà du champ moyen qui permet d'éliminer des approximations couramment faites dans le traitement du problème à  $A$ -corps nucléaire. Elle permet de conserver le nombre de particules exactement ainsi que le moment angulaire total. Le principe de Pauli est traité de façon exacte. En outre, elle est applicable à tout type de noyau, qu'il ait un nombre pair ou impair de protons et/ou de neutrons.

Dans l'approximation de champ moyen, les nucléons occupent des états d'énergie discrets, solutions propres du champ moyen appelées orbitales. L'état de référence est le déterminant de Slater (DS) défini en positionnant les nucléons sur les orbitales de plus basse énergie. La méthode de mélange de configurations MPMH consiste à décrire les états du

noyau comme une superposition de DS construits en promouvant  $M$  particules sur des orbitales d'énergie supérieure à partir de l'état de référence, créant ainsi  $M$  trous (orbitales inoccupées). La fonction d'onde décrivant ainsi le noyau s'approche de la solution exacte et contient *a priori* tout type de corrélations: appariement, excitations collectives rotationnelle et vibrationnelle, couplage particule-vibration. L'expansion en DS ne pouvant être infinie, une sélection pertinente conservant les symétries importantes est appliquée. La base des orbitales doit alors être optimale: elle doit minimiser l'énergie de l'état du noyau.

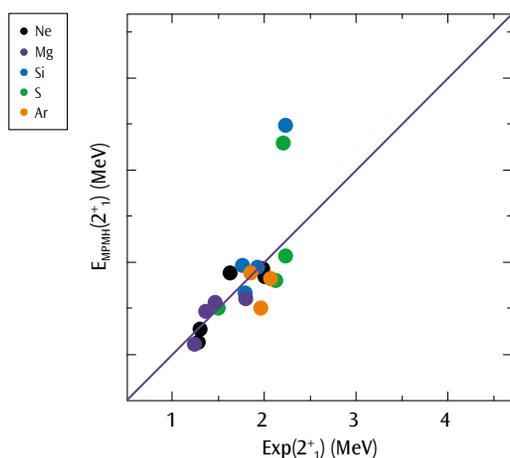
Un double principe variationnel sur l'énergie permet alors de déterminer les inconnues de la méthode MPMH, à savoir les coefficients du mélange correspondant au poids de chaque configuration et les orbitales. Pour la première fois, un algorithme numérique qui permet de résoudre de façon auto-cohérente les systèmes d'équations couplées et non linéaires associées a été mis en place [2].

Pour les différents noyaux étudiés, la résolution complète de la méthode incluant l'optimisation des orbitales a permis d'améliorer la description des états excités de basse énergie d'environ 30 % ainsi que ses propriétés spatiales. Les énergies d'excitation théoriques du premier état excité  $2_1^+$  sont représentées sur la **figure 1** en fonction des énergies expérimentales, pour les noyaux pairs-pairs de la couche *sd*. Les calculs ont été effectués avec l'interaction effective phénoménologique de Gogny, en prenant en compte

toutes les configurations possibles de la couche *sd*. Pour la majorité des noyaux, un très bon accord est trouvé avec l'expérience. La différence moyenne à l'expérience est de 235 keV et la déviation standard de 323 keV. Une telle précision est rarement atteinte avec les méthodes traditionnelles. Quant aux propriétés spatiales des orbitales, ces dernières sont poussées vers la surface du noyau. Ce phénomène apparaît clairement dans la densité de transition entre l'état fondamental  $0^+$  et l'état excité  $2_1^+$  [3]. L'amplitude à la surface est plus importante avec un léger décalage du pic vers de plus grands rayons  $r$ . Ceci témoigne d'une augmentation de la collectivité, visible directement dans le facteur de forme électronique décrivant la diffusion inélastique d'électrons par l'augmentation de l'amplitude et le resserrement aux grands moments transférés  $q$  [3]. Les effets de l'optimisation des orbitales vont donc vers une meilleure description des données expérimentales.

## Conclusion

La méthode de mélange de configurations MPMH a été mise en œuvre de façon complète pour la première fois en physique nucléaire. Les premiers résultats obtenus pour des noyaux de la couche *sd* montrent que l'optimisation des orbitales permet d'améliorer la description des états du noyau. La prochaine étape de développement consiste à dériver une interaction dans le milieu du noyau de façon cohérente avec le mélange introduit dans la fonction d'onde. Partant d'une interaction nue, la méthode MPMH permet de générer une interaction effective à un ordre donné d'excitation particule-trou. Ce qui permettra d'utiliser un calcul MPMH pour étudier la structure ou des réactions nucléaires en réduisant les incertitudes liées à une interaction phénoménologique.



**Figure 1.** Comparaison des énergies d'excitation expérimentales  $Exp(2_1^+)$  et théoriques  $E_{MPMH}(2_1^+)$  du premier état excité  $2_1^+$  dans les isotopes pairs-pairs de la couche *sd*. Les résultats théoriques ont été obtenus avec la résolution complète de la méthode MPMH, qui permet de franchir un pas vers la description universelle des noyaux *via* un modèle unique et unifié. L'inclusion de l'optimisation des orbitales permet d'améliorer d'environ 30 % les énergies d'excitation théoriques.

## Références

- [1] N. PILLET, J.-F. BERGER, E. CAURIER, "Variational multiparticle-configuration mixing method applied to pairing correlations in nuclei", *Phys. Rev. C*, **78**, 024305 (2008).
- [2] C. ROBIN, N. PILLET, D. PEÑA ARTEAGA, J.-F. BERGER, "Description of nuclear systems with a self-consistent configuration-mixing approach: Theory, algorithm, and application to the  $^{12}\text{C}$  test nucleus", *Phys. Rev. C*, **93**, 024302 (2016).
- [3] C. ROBIN, N. PILLET, M. DUPUIS, J. LE BLOAS, D. PEÑA ARTEAGA, J.-F. BERGER, "Description of nuclear systems with a self-consistent configuration-mixing approach: Application to structure and reactions in even-even *sd*-shell nuclei", *Phys. Rev. C*, **95**, 044315 (2017).