D. ETATS A N PARTICULES

Pour un système de N fermions identiques, le postulat de symétrisation impose aux états d'être totalement antisymétriques par rapport aux substitutions des particules. D'autre part, l'invariance par rotation et celle de charge nous amènent à considérer des états de bon spin et isospin. Enfin pour les calculs de valeurs moyennes, ces états doivent être normalisés. Nous étudions successivement ces trois opérations : antisymétrisation, couplage et normalisation, puis nous définirons les états considérés dans notre problème.

D.1. ANTISYMETRISATION, COUPLAGE ET NORMALISATION.

D.1.1. Opérateur d'antisymétrisation.

Soit ($|i\rangle$) une base complète de $e^{(1)}$. Considérons l'espace $E^{(N)}$, produit tensoriel de N espaces $e^{(1)}$:

$$E^{(N)} = \prod_{1}^{N} \otimes \mathcal{E}^{(1)} , \qquad (D-1)$$

dont une base est définie par le produit tensoriel des vecteurs de base de $e^{(1)}$:

$$(|i_1\rangle\otimes\cdots\otimes|i_N\rangle)$$
. (D-2)

Soit \mathcal{P} la substitution $\begin{pmatrix} 1 & \dots & j & \dots & N \\ k_1 & \dots & k_n & \dots & k_n \\ \text{substitution } \mathcal{P} \text{ sur } E^{(N)} par la^j relation suivante :}$

$$\mathcal{P}_{|i_1 > \otimes \cdots \otimes |i_N >} = \cdots \otimes |i_j > \otimes \cdots , \qquad (D-3)$$

où $|i_i\rangle$ (j=1,...,N) occupe le rang k_i dans le produit tensoriel.

Dans le but de faciliter le traitement du couplage des états antisymétrisés (D.1.2), introduisons une notation où les états i_j sontécrits dans un ordre choisi arbitrairement. L'information du rang k_j occupé par l'état $|i_j\rangle$ dans le produit tensoriel est indiquée entre parenthèses :

$$|i_1(R_1), \dots, i_N(R_N)\rangle \equiv \dots \otimes |i_j\rangle \otimes \dots$$
 (D-4)
rang k_j

L'opérateur d'antisymétrisation \mathscr{A} sur E $^{(N)}$ est défini par :

$$\mathcal{A} \equiv \sum_{\mathcal{P}} (-)^{\mathcal{P}} \mathcal{P} , \qquad (D-5)$$

où p est la parité de la substitution \mathcal{P} . Cet opérateur \mathcal{A} est hermitique. On introduit un opérateur d'antisymétrisation normalisé :

$$\mathcal{H}_{\mathrm{TL}} \equiv \frac{1}{\mathrm{N}!} \mathcal{H}$$
, (D-6)

qui satisfait :

$$\mathcal{H}_n^2 = \mathcal{H}_n \qquad (D-7)$$

Les états physiques appartiennent au sous-espace $e^{(N)}$ des vecteurs totalement antisymétrisés de $E^{(N)}$. Une base de $e^{(N)}$ est définie par les vecteurs :

$$|\dot{i}_{1}(1), \dots, \dot{i}_{N}(N)\rangle = \mathcal{A} |\dot{i}_{1}(1), \dots, \dot{i}_{N}(N)\rangle$$
 (D-8)

Remarques : 1- L'ordre $i_1(1), \ldots, i_N(N)$ fixe un choix de phase de l'état (D-8). Changer l'ordre des indices entre parenthèses ou des états, par la substitution $\binom{1 \ldots N}{k_1 \ldots k_N}$ de parité p, introduit une phase, à savoir :

$$|\dot{\iota}_{1}(\vec{k}_{1}),\cdots,\dot{\iota}_{N}(\vec{k}_{N})\rangle = |\dot{\iota}_{\vec{k}_{1}}(1),\cdots,\dot{\iota}_{\vec{k}_{N}}(N)\rangle = (-)^{p}|\dot{\iota}_{1}(1),\cdots,\iota_{N}(N)\rangle.$$
(D-9)

En seconde quantification l'ordre des états est celui des opérateurs de création a_i^+ des états $|i\rangle$:

$$|i_1(1), \dots, i_N(N)\rangle = a^+_{i_1} \dots a^+_{i_N}|0\rangle$$
, (D-10)

où 0 désigne le vide.

2- La fonction d'onde de l'état (D-8) sur la base $(|x_1, \ldots, x_N\rangle)$ où x désigne l'ensemble des variables $\vec{r}, \vec{\sigma}, \vec{\tau}$ est au coefficient N! près un déterminant de Slater :

$$\int (x_1, \cdots, x_N) = \langle x_1(1), \cdots, x_N(N) | i_1(1), \cdots, i_N(N) \rangle$$
(D-11)

Par la suite (D.2), nous construirons des états antisymétrisés à $N = \sum_{i=1}^{q} n_i$ particules, en antisymétrisant entre elles q structures antisymétrisées de n, particules^{*}:

$$|n_1, \cdots, n_q\rangle = \mathcal{A}(n_1, \cdots, n_q) | \widetilde{n}_1, \cdots, \widetilde{n}_q\rangle .$$
(D-12)

On définit pour cela, les opérateurs d'antisymétrisation partielle par :

$$\mathcal{N}(n_1, \cdots, n_q) = \sum_{\mathcal{T}} (-)^{\mathcal{P}} \mathcal{T}(n_1, \cdots, n_q) , \qquad (D-13)$$

*On a omis les indices entre parenthèses pour éviter d'alourdir l'écriture : $\widetilde{|n_1, \cdots, n_q\rangle} = |n_1(1, \cdots, n_1), n_2(n_1+1, \cdots, n_1+n_2), \cdots, n_q(\cdots N) > .^{(D-12')}$ où la somme sur \mathcal{P} porte sur les N!/ $\prod_{i=1}^{q}$ n ! substitutions $\mathcal{P}(n_1, \ldots, n_q)$, différentes des produits de substitutions portant séparément sur les structures à n, particules. Les opérateurs normalisés correspondant sont :

$$\mathcal{A}_{n}(n_{1}, \dots, n_{q}) = \frac{\prod_{i=1}^{q} n_{i}!}{N!} \mathcal{A}(n_{1}, \dots, n_{q}), \quad (D-14)$$

ils satisfont (D-7).

D.1.2. Etats antisymétrisés et couplés.

a) Soit ($|jm\rangle$) une base propre de \vec{j}^2 et j_3 dans $\mathscr{E}^{(1)}$ et

$$|j_1 m_1(1), \cdots, j_N m_N(N) \rangle \equiv |j_1 m_1 \rangle \otimes \cdots \otimes |j_N m_N \rangle$$
, (D-15)
les vecteurs de base de E^(N).

Le couplage des N systèmes $j_{i}m_{i}$ dépend du choix de l'ordre dans lequel on effectue les couplages intermédiaires. Par exemple, pour un couplage de proche en proche, on a :

$$|(\dots ((j_1(1), j_2(2))J_2, J_3(3))J_3, \dots, J_N(N))JM \rangle = (D-16)$$

$$\sum_{m_{i},M_{j}} (j_{1}j_{2}m_{1}m_{2}|J_{2}M_{2}) \dots (J_{N-1}j_{N}M_{N-1}m_{N}|JM) | j_{1}m_{1}(1), \dots, j_{N}m_{N}(N) \rangle$$

L'état antisymétrisé correspondant s'obtient par action de l'opérateur &. Notons globalement par g le produit des coefficients de Clebsch-Gordan pour un couplage quelconque que l'on n'explicite pas, nous avons alors :

$$|(j_{1}(1), \cdots, j_{N}(N)) J M \rangle = \mathcal{H} \sum_{m} g |j_{1}m_{1}(1), \cdots, j_{N}m_{N}(N)\rangle = \sum_{m} g \mathcal{H} |j_{1}m_{1}(1), \cdots, j_{N}m_{N}(N)\rangle$$
(D-17)

Ainsi, les coefficients de couplage g sont liés à l'ordre initial choisi pour les états et leurs couplages intermédiaires, et non aux différents ordres engendrés par les N! substitutions de l'opérateur & .

En raison de la factorisation par rapport à \mathscr{A} des coefficients de couplage g dans (D-17), un changement de l'ordre des indices entre parenthèses par la substitution $\mathscr{P} = \begin{pmatrix} 1 & \dots & N \\ k_1 & \dots & k_N \end{pmatrix}$ de parité p amène un changement de phase identique à celui de (D-9) :

$$|(j_{1}(R_{1}), \dots, j_{N}(R_{N}))JM\rangle = (-)^{P}|(j_{1}(1), \dots, j_{N}(N))JM\rangle. \quad (D-18)$$

Mais, si on change l'ordre des états, on introduit d'une part les coefficients \mathscr{C} de changement des couplages (produit de coefficients de Clebsch-Gordan et éventuellement des sommations sur les nouveaux couplages intermédiaires), et d'autre part la phase (D-18) pour rétablir l'ordre initial des indices entre parenthèses. En effet, en notant $\mathscr{P}^{-1} = (\stackrel{1 \dots N}{\underset{N}{1 \dots N}}$ la substitution inverse de \mathscr{P} (de même parité p) on a :

$$|(j_{R_{1}}(1), \dots, j_{R_{N}}(N)) JM \rangle = \mathcal{A}|(j_{R_{1}}(1), \dots, j_{R_{N}}(N)) JM \rangle = \mathcal{A}\sum_{J_{i}} \mathcal{B}|(j_{1}(q_{1}), \dots, j_{N}(q_{N})) JM \rangle$$
$$= \sum_{J_{i}} \mathcal{B}|(j_{1}(q_{1}), \dots, j_{N}(q_{N})) JM \rangle = (-)^{P} \sum_{J_{i}} \mathcal{B}|(j_{1}(1), \dots, j_{N}(N)) JM \rangle. (D-19)$$

Ce qui précède s'étend directement aux cas où l'on couple, non seulement les moments angulaires, mais aussi les isospins. Ainsi, un état antisymétrisé à deux nucléons ($t_1 = t_2 = 1/2$) dont on change l'ordre de couplage, s'écrit (en couplage j-j) :

$$|(\alpha_{1}j_{1}t_{1}(1),\alpha_{2}j_{2}t_{2}(2)) JM_{J}TM_{T}\rangle = (-)^{j_{1}+j_{2}-J-T} |(\alpha_{2}j_{2}t_{2}(1),\alpha_{1}J_{1}t_{1}(2)) JM_{J}TM_{T}\rangle,$$
(D-20)

où α désigne les nombres quantiques supplémentaires nécessaires pour définir un état individuel (par exemple n, ℓ).

b) L'antisymétrisation d'un état couplé peut introduire des contraintes sur les couplages possibles. En effet, si dans (D-17), deux au moins des états individuels sont tels que $\alpha_1 = \alpha_2$ et $j_1 = j_2$, alors certains vecteurs de la somme sur les m_i sont nuls : ceux pour lesquels m₁ = m₂ que le principe d'exclusion interdit.

Ainsi, ces règles de sélection s'introduisent uniquement dans le cas où l'antisymétrisation porte sur des états individuels de même nombres quantiques α , j; donnons en deux exemples :

1 - Dans le cas de deux nucléons couplés, si $\alpha_1 = \alpha_2$ et $j_1 = j_2$, les deux vecteurs de (D-20) sont identiques, et donc non nuls si et seulement si la phase qui les relie vaut 1 soit :

$$j_1 + j_2 + J + T$$
 pair ou $J + T$ impair. (D-21)

2 - Considérons les deux états à $N(\leq 2j + 1)$ protons (ou neutrons) obtenus en occupant les états individuels m de même α , j, de telle façon que $M = \sum_{i=1}^{N} m_i$ soit extremum compte tenu de l'antisymétrisation qui implique des états à une particule tous différents, à savoir :

$$M_{max.} = Nj - \frac{N(N-1)}{2} , |j-(N-1)(1), \cdots, j-1(N-1), j(N) \rangle , \quad (D-22)$$

$$M_{min.} = -M_{max}$$
, $|-j(1), -j+1(2), \cdots, -j+N-1(N)>$, $(D-23)$

où nous avons fait figurer uniquement les nombres quantiques m.

Démontrons que ces états propres de J_3 sont aussi états propres de \vec{J}^2 avec la valeur propre $J = M_{max}$. L'action de J_+ (resp. J_-) sur le vecteur (D-22) (resp. D-23) est zéro, car le principe d'exclusion ne permet pas d'augmenter (resp. diminuer) d'une unité l'un quelconque des m occupés. On déduit le résultat annoncé des relations suivantes :

$$J_{-}J_{+} = \vec{J}^{2} - J_{3}(J_{3} + 1) , \quad J_{+}J_{-} = \vec{J}^{2} - J_{3}(J_{3} - 1) .$$
(D-24)

Les états (D-22) et (D-23) sont utilisés en particulier dans le "modèle aligné"^[54] et le "schéma m"^[55](D.2.1). Pour N = 2j + 1, on obtient le résultat suivant : un état antisymétrisé de couches (états individuels de même α et j) complètes (m = -j à +j) est couplé à J = M = 0.

D.1.3. Normalisation d'un état antisymétrisé.

a) Soit O un opérateur défini sur $\mathscr{C}^{(N)}$ et symétrique par rapport aux substitutions partielles $\mathscr{P}(n_1, \ldots, n_q)$ (D-13), démontrons que ses éléments de matrice sur les états $| n_1, \ldots, n_q \rangle$ (D-12) satisfont :

$$\langle n_{1'} \cdots n_{q} | \mathcal{O} | n_{1'} \cdots n_{q} \rangle = \frac{N!}{\prod_{i} n_{i}!} \langle \widetilde{n}_{1'} \cdots \widetilde{n}_{q} | \mathcal{O} | \widetilde{n_{1'}} \cdots n_{q} \rangle.$$
(D-25)

On utilise pour cela l'opérateur d'antisymétrisation normalisé (D-14) et les relations de commutation $[\mathcal{O}, \mathcal{P}(n_1, \dots, n_d)] = 0$:

$$\langle \widetilde{n_{1'}}, \widetilde{n_{q}} | \mathcal{O} | \widetilde{n_{1'}}, \widetilde{n_{q}} \rangle = \left(\frac{N!}{\overline{n_{l}}} \right)^{2} \langle \widetilde{n_{1'}}, \widetilde{n_{q}} | \mathcal{D}_{n}(n_{1'}, n_{q}) \mathcal{O}_{n}(n_{1'}, n_{q}) | \widetilde{n_{1'}}, \widetilde{n_{q}} \rangle$$

$$= \left(\frac{N!}{\overline{n_{l}}} \right)^{2} \langle \widetilde{n_{1'}}, \widetilde{n_{q}} | \mathcal{O}_{n}(n_{1'}, n_{q}) | \widetilde{n_{1'}}, \widetilde{n_{q}} \rangle$$

$$= \frac{N!}{\overline{n_{l}}} \langle \widetilde{n_{1'}}, \widetilde{n_{q}} | \mathcal{O}_{n}(n_{1'}, n_{q}) | \widetilde{n_{1'}}, \widetilde{n_{q}} \rangle$$

$$(D-26)$$

b) En appliquant (D-25) à l'opérateur identité de $e^{(N)}$, la norme Md'un état antisymétrisé à N particules s'exprime de la façon suivante :

$$\mathcal{N} = \langle i_{1}(1), \dots, i_{N}(N) | i_{1}(1), \dots, i_{N}(N) \rangle = N! \langle i_{1}(4), \dots, i_{N}(N) | i_{1}(1), \dots, i_{N}(N) \rangle.$$
(D-27)

-Pour un état $|i_1(1), ..., i_N(N)\rangle$ totalement décomposé (particules indépendantes, déterminant de Slater), la normalisation N est triviale dans le cas où les états de la base ($|i\rangle$) sont orthogonaux :

$$\mathcal{N} = N! \prod_{\substack{k=1 \\ k=1}}^{N} \langle i_{k} | i_{k} \rangle . \qquad (D-28)$$

Si de plus cette base est normalisée, $\mathcal{N} = \mathbb{N}!$; l'expression d'un état antisymétrisé et normalisé est alors :

$$|i_1(1), ..., i_N(N)\rangle_n = \frac{1}{\sqrt{N!}} |i_1(1), ..., i_N(N)\rangle$$
 (D-29)

Si la base ($|i\rangle$) n'est pas orthogonale il faut calculer explicitement la norme (D-27).

Remarque : Par un raisonnement analogue on obtient la normalisation d'un état antisymétrisé (D-12) construit à partir de structures antisymétrisées et normalisées $|\tilde{n}_i\rangle_n$ et telles que les états individuels de $|\tilde{n}_i\rangle_n$ et $|\tilde{n}_j\rangle_n$ soient deux à deux orthogonaux pour tous $i \neq j$:

$$|n_1, \cdots, n_q\rangle_n = \sqrt{\frac{\pi c_q}{n_{i=q}} n_{i!}!} |n_1, \cdots, n_q\rangle$$
 (D-30)

-Pour normaliser un état antisymétrisé quelconque (par exemple un état couplé), on utilise sa décomposition sur une base d'états antisymétrisés totalement décomposés et normalisés. Dans ce calcul, le couplage peut introduire une difficulté liée aux règles de sélection (D.1.2b). En effet, supposons la base ($|\alpha_j m\rangle$) orthonormalisée, le couplage étant une transformation unitaire, les vecteurs couplés $|(\alpha_1 j_1(1), \ldots, \alpha_N j_N(N))JM\rangle$ sont également orthonormalisés. Si les états couplés $\alpha_i j_i$ sont tous distincts, les N! vecteurs engendrés par les substitutions de l'opérateur \mathscr{A} (D-5) sont distincts (et donc orthogonaux) deux à deux, d'où l'expression de l'état normalisé :

$$|(\alpha_1 j_1(1), \dots, \alpha_N j_N(N)) J M \rangle_n = \frac{1}{\sqrt{N!}} |(\alpha_1 j_1(1), \dots, \alpha_N j_N(N)) J M \rangle$$
(D-31)

Par contre, si deux états individuels, au moins, ont même α , j, les N! vecteurs ne sont plus distincts et on doit tenir compte de cette multiplicité. Ainsi, pour deux particules en couplage j-j (D-20), l'état normalisé est :

$$|\{\alpha_{1}j_{1}t_{1}(1),\alpha_{2}j_{2}t_{2}(2)\} \exists M_{J} \top M_{T} \rangle_{\mathcal{N}} = \frac{1}{\sqrt{2(1+S_{12})}} |\{\alpha_{1}j_{1}t_{1}(1),\alpha_{2}j_{2}t_{2}(2)\} \exists M_{J} \top M_{T} \rangle_{(D-32)}$$

où $\delta_{12} = 1$ si $\alpha_1 = \alpha_2$ et $j_1 = j_2$, et 0 dans les autres cas. Nous construirons explicitement en (D.2) les états normalisés de l'espace de configurations utilisé dans notre problème.

Nous verrons qu'il est commode pour le calcul des éléments de matrice, d'exhiber la normalisation triviale correspondant au nombre de substitutions engendrées par l'opérateur \mathscr{A} . Ainsi, pour un état de type (D-12), quels que soient les états couplés $|\widetilde{n_i}\rangle$, nous écrirons :

$$|(n_1, \dots, n_q) \mathsf{J} \mathsf{M} \rangle_n = \mathcal{N} \sqrt{\frac{\pi_i^q n_i!}{N!}} |(n_1, \dots, n_q) \mathsf{J} \mathsf{M} \rangle . \quad (D-33)$$

D.2. CONSTRUCTION DES ETATS A N PARTICULES DU PROBLEME.

D.2.1. Etats de la cible.

a) Les états considérés dans notre problème sont construits à partir d'un coeur C de n_o nucléons, antisymétrisé et normalisé, formé de couches complètes de protons et neutrons et donc (D.1.2b2) couplé à zéro en spin et isospin, soit :

$$|C(1,\cdots,n_{o}) \circ \rangle_{n} \quad (D-34)$$

Pour les différents noyaux, les couches complètes sont :

$$c^{12}$$
 : $1s1/2$, $1p3/2$,
 o^{16} : $1s1/2$, $1p3/2$, $1p1/2$,
 ca^{40} : $1s1/2$, $1p3/2$, $1p1/2$, $1d5/2$, $2s1/2$, $1d3/2$.

Les états Φ de la cible à N-1 nucléons, de spin et isospin notés globalement I, sont obtenus en antisymétrisant l'état (D-34) du coeur avec l'état antisymétrisé et normalisé $|\tilde{e}\rangle_n$ à $n_1 = N-1-n_0$ nucléons formant la couche externe. On néglige ainsi les excitations particule-trou du coeur. Le couplage entre le coeur scalaire et la couche externe est immédiat, de plus les états individuels de ces deux structures étant orthogonaux, l'antisymétrisation n'introduit pas de règle de sélection (D.1.2b) et la normalisation est un facteur de comptage (D-30) :

$$\left| \begin{array}{c} \overbrace{\Phi(1,\cdots,N-1)} I \end{array} \right\rangle_{\mathcal{T}} = \sqrt{\frac{n_{o}! n_{1}!}{(n_{o}+n_{1})!}} \begin{array}{c} \overbrace{\mathcal{T}}(n_{o},n_{1}) \left(| \overbrace{\mathcal{C}(1\cdots,n_{o})} O \right\rangle_{\mathcal{T}} | \overbrace{\mathcal{C}(n_{o}+1,\cdots,N-1)} I \right) I \\ (D-35) \end{array} \right|.$$

b) Les couches externes des noyaux C 13 et O 17 se réduisent respectivement aux états individuels lp1/2 et ld5/2.

Dans le cas du F¹⁹, la couche externe $|\tilde{eI}\rangle_n$ est une combinaison linéaire des configurations $|\tilde{C}_{3I}\rangle_n$ à un proton et deux neutrons, couplés en spin et isospin à I, dans la couche 2s-1d :

$$|e_{(1,2,3)}I\rangle_{m} = \sum_{C_{3}} \propto_{C_{3}} |C_{3}(1,2,3)I\rangle_{m},$$
 (D-36)

où les composantes x satisfont :

$$\sum_{C_3} x_{C_3}^2 = 1 . (D-37)$$

Nous nous limitons au fondamental du F¹⁹ de spin $I_j = 1/2$ et d'isospin $I_t = 1/2$.

On construit les états $|\tilde{C}_{3}I\rangle_{n}$ en antisymétrisant une structure à deux nucléons $|\tilde{C}_{2}\rangle_{n}$ avec un état individuel j₃. La règle de sélection (D-21) limite à 28 le nombre des configurations antisymétrisées C₂ dans la couche 2s-1d (Tab. 10) elles sont définies par l'équation (D-32) et nous les notons :

$$|C_{2}(1,2)|I_{2}\rangle_{n} \equiv |(j_{1}(1), j_{2}(2))|I_{2}\rangle_{n}$$
, (D-38)

où I₂ indique globalement le couplage en spin et isospin.

Le couplage à I, de I₂ avec un état individuel j_3 , limite les configurations (C₂, j_3) à celles qui satisfont :

$$|I_{2} - j_{3}| \leq I \leq I_{2} + j_{3} \qquad (D-39)$$

De plus, du fait de l'antisymétrisation, nous devons distinguer les deux cas suivants :

i) j_3 est différent de j_1 et j_2 . L'antisymétrisation n'introduit pas de règle de sélection sur le couplage et la normalisation est un facteur de comptage:

$$|C_{3}(1,2,3)|I\rangle_{n} = \frac{1}{\sqrt{3}} \mathcal{R}(2,1) \left(|C_{2}(1,2)|I_{2}\rangle_{n} |J_{3}(3)\rangle \right) |I|, \quad (D-40)$$

(ou bien couplé dans l'ordre (j_3, I_2) pour satisfaire l'ordre standard 1d 5/2, 2s1/2, 1d3/2). Ce sont les configurations du Tableau 11, autres que 1, 10 et 14.

j ₁	j ₂	J	Т	N°
5/2	5/2	0	1	1
		1	D	2
		2	1	3
		3	D	4
		4	1	5
967 , 006	3302 38	5	0	6
5/2	1/2	2	0	7
		2	1	8
		3	0	9
		3	1	10
5/2	3/2	1	0	11
		1	1	12
	is neuc	2	0	13
	all beau	2	1	14
		3	0	15
		3	1	16
		4	0	17
		4	1	18
1/2	1/2	0	1	19
		1	0	20
1/2	3/2	1	0	21
		1	1	22
		2	0	23
		2	1	24
3/2	3/2	0	1	25

Tableau 10 : Configurations en couplage j-j à deux nucléons dans la couche2s-ld, antisymétrisées et couplées en spin et isospin : $|(j_{1}, j_2) J T \rangle_n$.

ii) $j_1 = j_2 = j_3 = j$. L'antisymétrisation introduit alors des régles de sélection sur le couplage, et on doit s'assurer de l'existence de tels états (j)³ couplés à $I_1 = J_t = 1/2$.

On utilise pour cela la technique du "schéma m"^[55] qui permet de dénombrer les couplages possibles d'un état antisymétrisé de particules identiques de même nombre quantique $j(n, \ell, j)$, et de déterminer la multiplicité de ces états. La méthode repose sur le fait que l'espace de ces configurations peut être engendré soit par une base d'états couplés, les couplages étant limités par les règles de sélection que nous cherchons, soit par une base d'états non couplés (mais de bonne projection M_j du spin) que nous savons construire en tenant compte du principe d'exclusion, c'est à dire avec des m individuels tous différents.

Pour un mélange de protons et de neutrons, on détermine les spins possibles, correspondant aux différents isospins, en plusieurs étapes que nous détaillons dans le cas de deux neutrons et un proton 1d5/2.

On considère d'abord les configurations à trois neutrons. Ce sont des états de projection d'isospin $M_t = -3/2$ (C.1.2) et donc d'isospin $I_t = 3/2$. Les états (m_1, m_2, m_3) du schéma m sont les suivants :

M. j	états (m ₁ , m ₂ , m ₃)
9/2	(5/2, 3/2, 1/2)
7/2	(5/2, 3/2, -1/2)
5/2	(5/2, 1/2, -1/2) (5/2, 3/2, -3/2)
3 / 2	(5/2, 1/2, -3/2) (5/2, 3/2, -5/2) (3/2, 1/2, -1/2)
1/2	(5/2, 1/2, -5/2) (3/2, 1/2, -3/2) (5/2, -1/2, -3/2)

Les valeurs possibles du spin I_j sont : 9/2, 5/2 et 3/2. En effet, il n'existe pas d'état I_j = 7/2 (de même 1/2) car les nombres de configurations indépendantes ayant M_j = 7/2 et M_j = 5/2 sont égaux.

La même technique du "schéma m", ou plus directement ici la règle de sélection (D-21) détermine les configurations à deux neutrons 1d5/2, elles ont un isospin $I_{2t} = 1$ et un spin $I_{2j} = 0,2$ et 4 (Tab. 10). Par couplage de ces configurations à un nucléon 1d5/2, on construit les états de spin I_{j} suivants :

I _{2j}			Ij					
0			5/2					
2	1/2	3/2	5/2	7/2	9/2			
4		3/2	5/2	7/2	9/2	11/2	13/2	

Eliminons les configurations d'isospin $I_t = 3/2$ obtenues dans la première étape (avec éventuellement leur multiplicité, ici 1), ce sont des états à trois neutrons. Les configurations restantes donnent les spins I_j possibles pour l'isospin $I_+ = 1/2$, soit :

IJ	1/2	3/2	5/2	7/2	9/2	11/2	13/2
multiplicité	1	1	2	2	1	1	1

Ainsi, il existe un seul état à un proton et deux neutrons couplés à $I_j = I_t = 1/2$ on démontre qu'il en est de même pour $(2s^{1/2})^3 \approx \text{et} (1d^{3/2})^3$. Ce sont respectivement les configurations 1, 10 et 14 du Tableau 11 où le choix du couplage indiqué définit la phase de ces états.

D.2.2. Définition des "coefficients associés aux c.p.f.".

a) Par la suite nous exprimerons les éléments de matrice d'opérateurs à un (resp. deux) corps sur des états à N corps en fonction d'éléments de matrice à un (resp. deux) corps. Pour cela, dans les états $|\tilde{C_N}\rangle_n$ antisymétrisés à N particules, on isole explicitement les états individuels de l'un des espaces $e^{(1)}$ du produit tensoriel $E^{(N)}$ (par exemple le N^{ème}), en développant cet état sous la forme suivante :

$$|C_{N}(1\cdots N)\rangle_{n} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{C_{N-1}, C_{1}} C_{N-1} C_{1} \left(|C_{N-1}(1\cdots N-1)\rangle_{n} |C_{1}(N)\rangle\right), \quad (D-41)$$

où C_{N-1} est une configuration à N-1 particules couplée avec la configuration individuelle C_1 au couplage global (spin, isospin) de C_N . Nous appelons "coefficients associés aux c.p.f." les facteurs $\mathscr{C}_{N-1}C_1$, car ils sont reliés aux

^{*}Pour (2s1/2)³ le résultat est évident, c'est un trou de proton dans la double couche complète 2s1/2 (D.1.2b2).

"coefficients de parentage fractionnel" (c.p.f.) définis pour des états à N particules de même nombre quantique $j(n, \ell, j)$. Pour trois particules, nous avons $(26.10^{[55]})$:

$$\frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} j^3 \alpha J \\ j^2 (J_1), j \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} j^2 (J_1) j J \end{bmatrix} j^3 \alpha J$$
(D-42)

Dans le cas d'un état $|\tilde{C}_N\rangle_n = |j_1, \dots, j_n\rangle_n$ de particules indépendantes les coefficients & se réduisent à une phase, le développement (D-41) s'identifiant alors en terme de fonctions d'onde au développement d'un déterminant de Slater suivant une ligne. Par contre pour un état couplé, le développement (D-41) implique des changements de couplage. De plus, le dénombrement et la normalisation des configurations C_{N-1} peut, à cause des règles de sélection (D.1.2b), poser des problèmes dans le cas d'états individuels de même nombre quantique $j(n,\ell,j)$.

b) Calcul des "coefficients associés aux c.p.f." pour un état de couches complètes identiques en protons et neutrons.

Un tel état antisymétrisé est couplé à un spin et isospin nuls (D.1.2b2) et la configuration de trou, obtenue en enlevant l'état individuel jm_j , tm_t , est couplée à $j-m_j$, $t-m_t$. Par suite, dans le développement (D-41), C_{N-1} et C_1 sont couplées en spin et isospin à zéro ; mettons en évidence ce couplage.

Considérons d'abord le cas d'un état formé d'une seule couche complète de protons et de neutrons, soit de N = 2(2j+1) particules. La phase de cette configuration est définie (D.1.1) par le choix d'ordre des états individuels suivant :

$$C(1, \cdots, N) \geq_n = (D-43)$$

$$\frac{1}{\sqrt{N!}} \quad \mathcal{H} \mid j_{(1)}, \dots, m_{(j+1-m)}, \dots, j_{(2j+1)}, j_{(2j+2)}, \dots, m_{(3j+2+m)}, j_{(4j+2)} \rangle$$
où ne figurent que les nombres quantiques m_j et m_t = ± 1/2 notés par les indices ±.
Pour séparer les états individuels du N^{ème} espace $e^{(1)}$ écrivons (D-43) sous
la forme :

$$|C(1, \dots, N)\rangle_{n} = \frac{1}{\sqrt{2(2j+1)}} \{ |j_{(1)}, \dots, m_{1}, \dots, -j_{(2j+1)}, -j_{1}^{\dagger}, \dots, m_{1}^{\dagger}, \dots, j_{-1}^{\dagger}, (N-1)\rangle_{n} |j_{(N)}^{\dagger}\rangle - \sum_{m, \alpha = \pm} |j_{(1)}, \dots, m_{-1}^{\alpha}, j_{+}^{\dagger}, m_{+1}^{\alpha}, \dots, j_{-1}^{\dagger}, (N-1)\rangle_{n} |m_{\alpha}^{\alpha}(N)\rangle \}, \quad (D-44)$$

explicitant ainsi l'opérateur d'antisymétrisation partiel entre les états antisymétrisés à N-1 particules et l'état isolé. On rétablit l'ordre standard (D-43) dans les configurations à N-1 particules par un produit de 4j + 1 - (j+1 - m⁻) (resp. 4j+1 - (3j+2 + m⁺)) transpositions, soit en introduisant la phase (-)^{j - m⁻} (resp. (-)^{j + m⁺}). Incluant le signe - devant $\sum_{m,\alpha}$, cette phase s'écrit (-)^{j+m}j(-)^{1/2+m}t qui est, à un facteur près, le produit des coefficients de Clebsch-Gordan de couplage en spin et isospin à zéro :

$$(-)^{j+m_{j}}(-)^{1/2+m_{t}} = \sqrt{2j+1} \sqrt{2} (jj-m_{j}m_{j}|00)(1/21/2-m_{t}m_{t}|00)} (D-45)$$

$$|C(1,\cdots,N)00\rangle_{n} = (|trou j 1/2(1,\cdots,N-1)\rangle_{n} |j 1/2(N)\rangle)00.$$

$$(D-46)$$

Pour un état à plusieurs couches complètes (n, ℓ, j) $(N = \sum_{n} (2j+1)2)$, nous obtenons un développement analogue en choisissant l'ordre précédent des états individuels d'une même couche et un ordre arbitraire des couches (chaque couche comprenant un nombre pair, 2(2j+1), de particules, changer l'ordre entre couchesn'introduit pas de phase). Le développement (D-41) s'écrit alors :

$$|C(1,...,N) oo \rangle_{n} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n \in j} \sqrt{2j+1} \sqrt{2} \left(|trou n + j + 1/2(1-..,N-1)\rangle_{n} |n + j + 1/2(N)\rangle\right) 00.(D-47)$$

c) Calcul des "coefficients associés au c.p.f." pour les configurations $|C_3 \ 1/2 \ 1/2 \rangle_n$ (Tab. 11). Nous distinguons les trois cas suivants :

1-Les états individuels j_1 , j_2 et j_3 sont tous différents. Les configurations sont alors définies par (D-40) et en développant l'opérateur d'antisymétrisation partiel $\mathcal{A}(2,1)$, elles s'écrivent :

$$\begin{split} \| ((j_{1}(1)) j_{2}(2)) I_{2} j_{3}(3)) \|_{2} &\gtrsim \frac{1}{n} = \frac{1}{\sqrt{3}} \left[\left(|(j_{1}(1)) j_{2}(2)) I_{2} \gtrsim |j_{3}(3) \rangle \right)^{1/2} \\ &- \left(|(j_{1}(1)) j_{2}(3)) I_{2} \gtrsim |j_{3}(2) \rangle \right)^{1/2} \\ &+ \left(|(j_{1}(2)) j_{2}(3)) I_{2} \gtrsim |j_{3}(1) \rangle \right)^{1/2} \right] , \quad (D-48) \end{split}$$

où j_i (de même que 1/2) indique le spin et l'isospin.

Pour isoler dans les deux derniers termes, les états individuels d'indice (3), on explicite l'antisymétrisation des configurations à deux particules définies par (D-32), et sur les vecteurs à trois particules non antysimétrisées, on change les couplages par les "9 j carrés" (B.6). Soit pour le deuxième terme :

$$(|(j_{1}(1), j_{2}(3))|I_{2}\rangle_{n} |j_{3}(2)\rangle) \frac{1}{2} = \frac{4}{\sqrt{2}} \left[(|(j_{1}(1), j_{2}(3))|I_{2}\rangle|j_{3}(2)\rangle) \frac{1}{2} - (|(j_{1}(3), j_{2}(1))|I_{2}\rangle|j_{3}(2)\rangle) \frac{1}{2} \right]$$

$$= \frac{4}{\sqrt{2}} \sum_{\lambda} \left\{ \begin{bmatrix} j_{1} & j_{2} & I_{2} \\ j_{3} & 0 & J_{3} \\ \lambda & j_{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix} (|(j_{1}(1), j_{3}(2))\lambda\rangle|j_{2}(3)\rangle) \frac{1}{2} \right\}$$

$$= \frac{4}{\sqrt{2}} \sum_{\lambda} \left\{ \begin{bmatrix} j_{1} & j_{2} & I_{2} \\ j_{3} & 0 & J_{3} \\ \lambda & j_{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix} (|(j_{1}(1), j_{3}(2))\lambda\rangle|j_{2}(3)\rangle) \frac{1}{2} \right\}$$

$$= \frac{4}{\sqrt{2}} \sum_{\lambda} \left\{ \begin{bmatrix} j_{1} & j_{2} & I_{2} \\ 0 & j_{3} & j_{3} \\ j_{4} & \lambda & \frac{1}{2} \end{bmatrix} (|(j_{2}(1), j_{3}(2))\lambda\rangle|j_{1}(3)\rangle) \frac{1}{2} \right\}, \quad (D-49)$$

où les "9j carrés" ainsi que la phase $(-)^{j}1^{+\lambda-1/2}$ sont en fait le produit des coefficients correspondants pour le spin et l'isospin.

Le troisiéme terme de (D-48) s'obtient à partir du précédent, en échangeant les indices (1) et (2) et avec un changement de signe général. En sommant ces deux derniers termes on obtient donc une expréssion analogue à (D-49) où les configurations à deux particules sont antisymétrisées et normalisées par le facteur $1/\sqrt{2}$. D'où le développement cherché :

$$\left| \left(\left(j_{1}(1) j_{2}(2) \right) I_{2} j_{3}(3) \right)^{1} /_{2} \right\rangle_{n} = \frac{1}{\sqrt{3}} \left\{ \left(\left(\left(j_{1}(1) j_{2}(2) \right) I_{2} \right) |_{2} + \left(j_{3}(3) \right)^{1} /_{2} \right) \right\} \right\}$$

$$- \sum_{\lambda} \left(\left[j_{1} j_{2} I_{2} j_{3} - j_{3} j_{3} + \left(\left(j_{1}(1) j_{3}(2) \right) \right) + \left(j_{2}(3) \right)^{1} /_{2} - \left(- \right)^{j_{1} + \lambda - \frac{1}{2}} \left[j_{1} j_{2} I_{2} j_{3} - \left(j_{3}(1) j_{3}(2) \right) + \left(j_{1}(3) \right) + \left(j_{2}(3) \right)^{1} /_{2} \right) \right] \right)$$

$$(D-50)$$

2- Les états individuels j₁ et j₂ sont égaux à j et différents de j₃. La démarche est la même que précédemment mais le calcul est simplifié car dans le développement (D-48), les configurations à deux particules s'écrivent :

$$|(j_1(1))_2(2))|I_2\rangle_n = |(j(1))j(2))|I_2\rangle$$

pourvu que I₂ satisfasse la règle de sélection (D-21). D'où le développement :

$$\left| \left(\left(j_{(1)} j_{(2)} \right) I_{2} J_{3}(3) \right)^{\frac{1}{2}} \right|_{2} = \frac{1}{\sqrt{3}} \left\{ \left(\left(j_{(1)} j_{(2)} \right) I_{2} \sum_{m} \left[j_{3}(3) \right]^{\frac{1}{2}} \right)^{\frac{1}{2}} \right. \\ \left. - \sqrt{2} \sum_{\lambda} \left[j_{3} j_{3} \\ j_{3} j_{4} \right]^{\frac{1}{2}} \left(\left[\left(j_{(1)} j_{3}(2) \right) \lambda \right]^{\frac{1}{2}} \right]^{\frac{1}{2}} \right] \left(\left[\left(j_{(1)} j_{3}(2) \right) \lambda \right]^{\frac{1}{2}} \right)^{\frac{1}{2}} \right]^{\frac{1}{2}} ,$$

$$(D-51)$$

où le facteur $\sqrt{2}$ compense la normalisation $1/\sqrt{2}$ de $|(j(1) j_3(2))\lambda\rangle_n$.

Remarque : dans les deux cas précédents, on peut être amené à changer l'ordre des états individuels j_{α} et j_{β} des configurations à deux particules de façon à rétablir l'ordre standard du tableau 10. Cela introduit la phase -(-) $j_{\alpha} + j_{\beta} - \lambda$ en spin et isospin (D-20).

3- Les trois états individuels sont égaux à j. Ces configurations antisymétrisées s'écrivent sous la forme (D-48), mais les trois termes de ce développement n'étant pas orthogonaux, la normalisation n'est plus assurée par le facteur de comptage $1/\sqrt{3}$. On doit explicitement calculer la norme :

$$\mathcal{N} = \langle ((j_{(1)}, j_{(2)}) | _{2})^{1} ((j_{(1)}, j_{(1)}) | _{2})^{1} ((j_{(1)}, j_{(1)}) | _{2})^{1} ((j_{(1)}, j_{(1)}) | _{2})^{1} (D-52)$$

Les changements de couplage sont analogues au cas précédent, soit :

$$|((j_{(1)}, j_{(2)})I_{2}, j_{(3)}) \frac{1}{2} \rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \left\{ (|(j_{(1)}, j_{(2)})I_{2}\rangle_{n} |j_{(3)}\rangle) \frac{1}{2} - 2\sum_{\lambda} \begin{bmatrix} j & j & I_{2} \\ j & 0 & j^{2} \\ \lambda & j & \frac{1}{2} \end{bmatrix} (|(j_{(1)}, j_{(2)})\lambda\rangle_{n} |j_{(3)}\rangle) \frac{1}{2} \right\},$$
(D-53)

où le facteur 2 compense la normalisation 1/2 de $|(j(1) j(2))\lambda\rangle$ (cette configuration étant non nulle si λ satisfait la règle de sélection (D-21)). Après normalisation de cet état le développement cherché est :

$$\| (j_{(1)}, j_{(2)}) I_{2} j_{(3)}) \frac{1}{2} \Big|_{n} = \frac{1}{\sqrt{3}} \sum_{\lambda} \frac{1}{\sqrt{n}} \left(\delta_{\lambda I_{2}} - 2 \begin{bmatrix} j & j & I_{2} \\ j & j & j \\ \lambda & j & \frac{1}{2} \end{bmatrix} \right) \left(| (j_{(1)}, j_{(2)}) \lambda \rangle_{n} | j_{(3)} \rangle \right) \frac{1}{2} .$$

$$(D-54)$$

Dans le programme numérique, ces "coefficients associés aux c.p.f." se présentent sous forme d'un tableau à trois indices (i,j,k) où i décrit les 14 configurations à trois particules (Tab. 11), j les 28 configurations à deux particules (Tab. 10) et k vaut 1,2 ou 3 suivant que l'état isolé est 1d5/2, 2s1/2 ou 1d3/2.

Ainsi, pour des composantes x (D-36) données, la couche externe de la cible de F¹⁹ s'exprime de la façon suivante :

$$| \mathcal{C}_{(1,2,3)} I \rangle_{n} = \frac{1}{\sqrt{3}} \sum_{C_{2},C_{1}} \mathcal{I}_{C_{2}} C_{1} \left(| \mathcal{C}_{2}(1,2) \rangle_{n} | \mathcal{C}_{1}(3) \rangle \right) I ,$$
(D-55)

où les composantes y définies par,

$$Y_{c_2c_1} = \sum_{c_3} x_{c_3} C_{c_2c_1}$$
 (D-56)

satisfont :

$$\frac{1}{3} \sum_{c_{2}c_{1}} y_{c_{2}c_{1}}^{2} = 1.$$
 (D-57)

D.2.3. Etats de l'ensemble cible plus projectile.

Les états à N particules considérés (II.1.2) s'écrivent comme la somme d'états à N-1 nucléons liés et un dans le continu :

$$|\widetilde{\Psi}_{cl} J \rangle = \sum_{\gamma} |\gamma_{\ell}, \varphi_{\gamma}\rangle_{n}$$
, (D-58)

et d'états à N nucléons liés :

$$|\widetilde{\Psi_{\ell}} J \rangle = \sum_{\alpha} a_{\alpha} |\widetilde{\alpha} \rangle_{n} \cdot$$
 (D-59)

Définissons chacun de ces états.

a) Etats à N-1 nucléons liés et un dans le continu.

Cette composante $|\widetilde{\Psi_d}J\rangle$ est obtenue par antisymétrisation et couplage à J d'un état $|\widetilde{\Phi I}\rangle_n$ de la cible avec un état individuel de diffusion $|\phi j\rangle$ (II-28).

Par hypothèse $|\phi j\rangle$ est un état du continu du potentiel à uncorps qui définit les états liés de la cible et par suite leur est orthogonal.

L'état de diffusion $|\Psi_{d}J\rangle_{n}$ n'est pas normalisable, cependant, l'indice n indique que nous le définissons avec la norme de comptage $1/\sqrt{N}$ (D-33) :

$$| \underbrace{\mathcal{Y}}_{\mathcal{Y}} \underbrace{(1, \dots, N) \mathcal{J}}_{\mathcal{N}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \mathcal{J}(N-1, 1) \left(| \underbrace{\Phi(1, \dots, N-1)}_{\mathcal{N}} | \underbrace{\varphi(N)}_{\mathcal{N}} j > \right) \mathcal{J} .$$
(D-60)

Ce choix de normalisation définit les composantes a des états à N nucléons liés (D-59).

b) Etats à N nucléons liés.

Nous nous limitons aux deux cas suivants :

1- On considère un état à N nucléons liés obtenu par antisymétrisation et couplage de la cible avec un état individuel j, non occupé dans la cible.

L'antisymétrisation n'introduit alors pas de règle de sélection et la normalisation est le facteur de comptage $1/\sqrt{N}$:

$$| \alpha (1, \dots, N) J \rangle_{\mathcal{N}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \mathcal{I} (N-1, 1) \left(| \Phi (1, \dots, N-1) I \rangle_{\mathcal{N}} | J (N) \rangle \right) J .$$

$$(D-61)$$

Seul le cas j = 2s1/2 est examiné.

2- Pour l'étude de la diffusion de neutrons sur le F¹⁹, nous considérons au chapitre V différents modèles pour décrire les états à vingt nucléons liés.
i) Détaillons le premier qui consiste à introduire une seule configuration, obtenue en antisymétrisant l'état fondamental du F¹⁹ avec l'état j = 2sl/2 :

$$|\Psi_{\ell}(1,...,20)J_{n} = \mathcal{NI}(19,1) (|F^{19}(1,...,19)I_{n}| 2 \Delta 1/2 (20)) J, (D-62)$$

où J prend les valeurs I $\pm 1/2 = 0, 1$ et T = 1 (résultant du couplage de deux isospins 1/2 avec $M_{\rm T} = -1$).

L'état 2s1/2 étant occupé dans certaines composantes de la couche externe $|\tilde{e} 1/2\rangle$ (D-36), l'antisymétrisation introduit des règles de sélection. Nous les déterminons en construisant l'état de couche externe à quatre nucléons :

$$|E(1,2,3,4)J\rangle_{n} = \frac{1}{\sqrt{4}} \mathcal{N}\mathcal{H}(3,1) (|e(1,2,3)I\rangle_{n} |j(4)\rangle) J , \quad (D-63)$$

sous la forme du développement suivant:

$$|\widetilde{E(1,2,3,4)}J\rangle_{n} = \frac{1}{\sqrt{6}} \sum_{C_{2}C_{2}} \tilde{J}_{C_{2}C_{2}} \left(|C_{2}(1,2)\rangle_{n} | C_{2}(3,4)\rangle_{n}\right) J$$
(D-64)

où C_2 et $C_2^{!}$ sont des configurations à deux nucléons du tableau 10. Les coefficients z sont des "coefficients associés aux c.p.f." (D.2.2) permettant d'isoler les états individuels de deux espaces $e^{(1)}$.

Afin de déterminer ces coefficients z, explicitons l'opérateur d'antisymétrisation partiel $\mathscr{A}(3,1)$ de (D-63) en omettant les couplages et ne faisant figurer que les indices, entre parenthèses, de rang des espaces individuels (D-4) :

$$|E(1,2,3,4)^{J} \geq_{m} = \frac{\mathcal{N}}{\sqrt{4}} \left(|1,2,3 \geq_{m} 14 \rangle - |1,2,4 \geq_{m} 13 \rangle + |1,3,4 \geq_{m} 12 \rangle - |2,3,4 \geq_{m} 11 \rangle \right)$$
(D-65)

Suivant (D-18), l'ordre des indices des états antisymétrisés à trois particules des deux derniers termes peut être changé de la façon suivante :

$$1_{1,3,4} \ge 1_{3,4,1} \ge 1_{3,4,1} \ge 1_{2,3,4} \ge 1_{3,4,2} \ge 1_{3$$

Développons alors, chacun des quatre termes de (D-65) à l'aide de (D-55) :

$$\begin{split} \widetilde{IE(1,2,3,4)} \stackrel{J}{\rightarrow} &= \frac{N}{\sqrt{4\times3}} \sum_{C_2 C_1} \mathcal{Y}_{C_2 C_1} \left\{ \begin{bmatrix} (IC_2(1,2)) & IC_1(3) \end{pmatrix} \\ IIJ(4) \end{bmatrix} \right] \\ &- \begin{bmatrix} (IC_2(1,2)) & IC_1(4) \end{pmatrix} \\ IIJ(3) \end{bmatrix} \stackrel{J}{\rightarrow} + \begin{bmatrix} (IC_2(3,4)) & IC_1(1) \end{pmatrix} \\ IJ(2) \end{bmatrix} \\ &- \begin{bmatrix} (IC_2(3,4)) & IC_1(2) \end{pmatrix} \\ IJ(2) \end{bmatrix} \\ \end{bmatrix} \end{split}$$

$$(D-67)$$

Désignons par $|(j_1j_2)I_2\rangle_n$ les configurations $|\widetilde{C_2}\rangle_n$ et par j_3 l'état individuel C_1 . En changeant l'ordre des couplages en spin et isospin de façon à faire apparaître des configurations à deux nucléons antisymétrisés (j_3, j) , il vient :

$$\begin{split} \overline{E} (\widetilde{1,2}, \widetilde{3}, 4) \overline{J} \gtrsim_{\mathcal{R}} &= \frac{\mathcal{N}}{\sqrt{4 \times 3}} \sum_{C_2 C_1} \mathcal{Y}_{C_2 C_1} \sum_{\lambda} \begin{bmatrix} I_2 & j_3 & I \\ 0 & j & j \\ I_2 & \lambda & J \end{bmatrix} \\ & \left\{ \left[|\widetilde{C_2(1,2)} \gtrsim_{\mathcal{R}} | (j_3(\widetilde{3}), j(4)) \lambda \rangle \right] \overline{J} + \left[|\widetilde{C_2(3,4)} \gtrsim_{\mathcal{R}} | (j_3(\widetilde{1}), j(2)) \lambda \rangle \right] \overline{J} \right\}, \text{ (D-68)} \end{split}$$

où les "9j carrés" (B.6) sont les produits des coefficients correspondants en spin et isospin.

Suivant (D-19), on rétablit dans les deux derniers termes l'ordre 1,2,3,4 à l'aide de la phase $(-)^{I_2 + \lambda - J}$ en spin et isospin. Faisons apparaître les états antisymétrisés et normalisés $|(\tilde{j}_3 j)\lambda\rangle_n$ par (D-32) :

$$|(j_{3}j)\lambda\rangle = \sqrt{2(1+\delta_{j_{3}j})} |(j_{3}j)\lambda\rangle_{m}, \qquad (D-69)$$

d'où le développement :

$$\left\{ \left[\left| C_{2}^{(1,2)} \right\rangle_{M} \right| \left[j_{3}^{(3)} \left(j_{4} \right) \right] \right\} \right\} + \left(- \left| J_{2}^{+\lambda-J} \right| \left[\left| \left(j_{3}^{(1)} \left(j_{1} \right) \right) \right\rangle_{M} \right] \left[C_{2}^{(3,4)} \right]_{M} \right] \right\}$$

Les coefficients z s'obtiennent en identifiant le développement précédent avec (D-64), soit :

- $C_2 \neq C_2^{\circ} = (j_3 j)\lambda , C_1 = j_3 ,$

$$\mathcal{J}_{c_{2}c_{2}'} = \mathcal{N}_{c_{2}c_{1}} \begin{bmatrix} \mathbf{I}_{2} \ \mathbf{j}_{3} \ \mathbf{I} \\ \mathbf{0} \ \mathbf{j} \ \mathbf{j} \\ \mathbf{I}_{2} \ \lambda \ \mathbf{J} \end{bmatrix} \sqrt{1 + \delta_{\mathbf{j}_{3}\mathbf{j}}} = (-)^{\mathbf{I}_{2} + \lambda - \mathbf{J}} \mathcal{J}_{c_{2}'c_{2}} \cdot (\mathbf{D} - 71)$$

- $C_2 = C_2^{\dagger}$. Les deux états entre crochets de (D-70) sont identiques, par suite pour que cette composante soit non nulle, il est nécessaire que la phase (-)^I2 + λ - J en spin et isospin soit égale à 1, c'est à dire J + T pair, alors :

$$\mathcal{J}_{c_2c_2} = \mathcal{Z} \mathcal{N} \mathcal{Y}_{c_2c_1} \begin{bmatrix} \mathbf{I}_2 \mathbf{j}_3 \mathbf{I} \\ \mathbf{0} \mathbf{j} \mathbf{j} \\ \mathbf{I}_2 \mathbf{I}_2 \mathbf{J} \end{bmatrix} \sqrt{1 + \delta \mathbf{j}_3 \mathbf{j}} , \qquad (D-72)$$

avec $C_1 = j_3 = j_1$ et $j_2 = j_1$.

Dans notre cas, T=1, ces composantes apparaissent uniquement pour J=1. Remarque : On peut être amené à changer l'ordre des états individuels j_3 , j pour rétablir l'ordre standard du tableau 10, cela introduit la phase · -(-) $j_3 + j - \lambda$ en spin et isospin (D-20).

Le coefficient de normalisation \mathcal{N} s'obtient en calculant explicitement la norme de $|\widetilde{E}\rangle$,

$$1 = \frac{1}{6} \sum_{c_{2}c_{2}} \frac{2}{5c_{2}c_{2}}$$
(D-73)

Remarquons que si l'état j n'est pas occupé dans $|\tilde{e}\rangle_n$, nous sommes dans le cas l-traité précédemment et $\mathcal{N} = 1$. Les coefficients $z_{C_2C_2}$ sont alors nuls car nécessairement $C_2 \neq C_2^{\dagger}$.

L'état à 20 nucléons liés est obtenu en antisymétrisant et couplant le coeur scalaire avec la couche externe $|\widetilde{E}\rangle_{n}$:

$$|\Psi_{\ell}(1,\cdots,20)J\rangle_{n} = \sqrt{\frac{16!4!}{20!}} \mathcal{H}(16,4) \left(|C(1,\cdots,16)O\rangle_{n}|E(17,\cdots,20)J\rangle_{n}\right) J.$$
(D-74)

La normalisation étant assurée par le facteur de comptage (D-30).

ii) Enfin, l'espace des états à 20 nucléons liés sera étendu aux configurations à quatre nucléons dans la couche 2s-1d, incluant au moins un état $|2s1/2\rangle$, antisymétrisées et couplées en spin et isospin à (J = 0, T = 1) et (J = 1, T = 1).

L'antisymétrisation et les couplages limitent ces configurations à celles indiquées dans les tableaux 30 et 31.

Un calcul analogue au précédent permet de décomposer ces états $|E_{\alpha}(1,2,3,4)JT\rangle_n$ sous la forme identique à (D-64) :

 $|E_{\alpha}(1,2,3,4) JT \rangle_{n} = \frac{1}{\sqrt{6}} \sum_{C_{2}C_{2}'} \mathcal{I}_{2}^{\alpha JT} \left(|\widetilde{C_{2}(1,2)}\rangle_{n} |\widetilde{C_{2}(3,4)}\rangle_{n} \right) JT. \quad (D-75)$

E. CALCUL DES ELEMENTS DE MATRICE

Après avoir exprimé les éléments de matrice d'opérateurs à un et deux corps sur des états à N corps antisymétrisés en fonction d'éléments de matrice à deux corps, on calculera ces derniers pour une force centrale dépendant de quatre paramètres de mélange $a_0, a_{\sigma}, a_{\tau}, a_{\sigma\tau}$ et également pour la force de Coulomb.

Enfin on précisera les expressions des potentiels qui interviennent dans notre problème.

E.1. DECOMPOSITION EN SOMME D'ELEMENTS DE MATRICE A UN ET DEUX CORPS.

On se propose de calculer les éléments de matrice $M^{(1)}$ et $M^{(2)}$ d'opérateurs à un et deux corps $o^{(1)}$ et $o^{(2)}$:

$$\mathcal{O}^{(n)} = \sum_{i=1}^{N} \mathcal{O}_{i} , \quad \mathcal{O}^{(2)} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \mathcal{O}_{ij} = \sum_{i < j} \mathcal{O}_{ij} \quad \text{avec} \quad \mathcal{O}_{ij} = \mathcal{O}_{ji} , \quad (E-1)$$

sur des états antisymétrisés couplés et normalisés à N corps $|\widetilde{c_N}\rangle_n$ (D).

L'antisymétrisation des vecteurs bra et ket permet d'exprimer $M^{(1)}$ et $M^{(2)}$ en fonction d'éléments de matrice des restrictions^{*} des opérateurs $o^{(1)}$ et $o^{(2)}$ à des espaces individuels $e^{(1)}$ déterminés, par exemple o_{N} et $o_{N-1,N}$ respectivement pour $M^{(1)}$ et $M^{(2)}$. Cela introduit un facteur de comptage, soit :

$$M^{(1)} = N \lessapprox \widetilde{C}_{N} | \mathcal{O}_{N} | \widetilde{C}_{N}' \nearrow ,$$

$$M^{(2)} = \frac{N(N-1)}{2} \And \widetilde{C}_{N} | \mathcal{O}_{N-1,N} | \widetilde{C}_{N}' \nearrow .$$
(E-2)

Décomposons les états $|\widetilde{C_N}\rangle_n$ au moyen des "coefficients associés aux c.p.f." (D-41et D-64) qui isolent les états des éspaces individuels N et N-1 :

$$\begin{split} |\widetilde{C}_{N}\rangle_{m} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\zeta_{N,1},\zeta_{1}} C_{\zeta_{N-1},\zeta_{1}} (|C_{N-1}(1,...,N-1)\rangle_{m} |\zeta_{1}(N)\rangle) \\ &= \sqrt{\frac{2}{\sqrt{N}(N-1)}} \sum_{\zeta_{N-2},\zeta_{2}} C_{\zeta_{2}} (|C_{N-2}(1,...,N-2)\rangle_{m} |\zeta_{2}(N-1,N)\rangle_{m}) \cdot (E-3) \\ \\ \\ \overset{*}{}_{Au \ lieu \ de \ \mathcal{O}_{N} \ on \ devrait \ \acute{e}crire \ 1_{1} \otimes \ldots \otimes 1_{N-1} \otimes \mathcal{O}_{N} \ ou \ 1_{i} \ est \\ 1'opérateur \ identité \ dans \ 1'espace \ \mathscr{E}_{i}^{(1)}, \ même \ remarque \ pour \ \mathcal{O}_{N-1} N \\ \end{split}$$

- A52 -

Les configurations C_{N-1} et C_1 ainsi que C_{N-2} et C_2 restent couplées au couplage total en spin et isospin de C_N . Désignons par I_i les couplages d'une configuration C_i . En introduisant les développements précédents dans $M^{(1)}$ et $M^{(2)}$, les facteurs de normalisation et de couplage se simplifient, il vient :

$$M^{(1)} = \sum_{\substack{C_{N-1} C_{1} \\ C'_{N-1} C'_{1}}} \binom{C_{N}}{C_{N-1} C_{1}} \binom{C_{N}}{C'_{N-1} C'_{1}} \left(\left\langle \sum_{n=1}^{C} (N) \right\rangle \right) O_{N} \left(\left| C'_{N-1} \sum_{n=1}^{N} \left| C'_{1}(N) \right\rangle \right) \right)_{(E-4)}$$

$$M^{(2)} = \sum_{\substack{C_{N-2} C_{2} \\ C'_{N-2} C'_{2}}} \binom{C_{N}}{C_{N-2} C_{2}} \binom{C'_{N}}{C'_{N-2} C'_{2}} \left(\left\langle \sum_{n=2}^{C} (N-1, N) \right\rangle \right) O_{N-1, N} \left(\left| C'_{N-2} \sum_{n=1}^{C} \left| C'_{2}(N-1, N) \right\rangle \right) \right) \right)$$

On sépare les éléments de matrice du membre de droite de (E-4) en un terme de recouvrement et un terme d'interaction. Pour cela on doit expliciter les couplages en spin et isospin entre les configurations C_{N-1} et C_1 (resp. C_{N-2} et C_2). Si l'opérateur considéré est scalaire en spin et isospin, on isole directement le terme d'interaction en utilisant le Théorème de Wigner-Eckart (B-52) et la formule de réduction du produit tensoriel (B-55) pour l'opérateur $1_{1,\dots,N-1} \otimes O_N^{[O]}$; d'où dans ce cas :

$$M^{(1)} = \sum_{C_{N-1}} C_{n} C_{n}' C_{n}' C_{n-1}' C_{n$$

E.2. CALCUL DES ELEMENTS DE MATRICE A DEUX CORPS PARTICULE-PARTICULE.

E.2.1. Expression en fonction des éléments de matrice direct .

Soit à calculer l'élément de matrice de l'opérateur à deux corps 0⁽²⁾ sur des états à deux corps antisymétrisés couplés et normalisés :

$$M = \bigwedge (a(n)b(2))J | O^{(2)} | (c(n)d(2))J' \rangle_{m}$$
 (E-6)

où a, b, c, d indiquent tous les nombres quantiques nécessaires pour définir les états individuels (C-25,26) et J et J' les couplages en spin et isospin. On suppose l'opérateur $o^{(2)}$ symétrique, $o_{ij} = o_{ji}$, par suite, séparant les problèmes de normalisation et d'antisymétrisation des états à deux particules (D-32), on peut antisymétriser un seul des états bra ou ket, par exemple le ket :

$$M = \frac{1}{\sqrt{1 + \delta_{ab}}\sqrt{1 + \delta_{cd}}} < (a(1)b(2))J | O_{1,2} O((c(1)d(2))J').$$
(E-7)

Désignons par \mathscr{D}_{abcd} le terme direct de M :

$$\mathcal{D}_{abcd} = \langle (a(1)b(2))J | \mathcal{O}_{1,2} | (c(1)d(2))J' \rangle . \quad (E-8)$$

1) Si a ≠ b et c ≠ d, M est la somme du terme direct (E-8) et du terme d'échange :

$$\mathcal{E}_{abcd} = - \langle (a(n)b(2))J | \mathcal{O}_{n,2} | (c(2)d(n))J' \rangle$$
 (E-9)

En changeant l'ordre de couplage des états du ket, ce terme d'échange s'exprime en fonction d'un terme direct, soit en couplage j-j :

$$\mathcal{E}_{abcd} = (-)^{j_c + j_d - J'_t - T'} \mathcal{D}_{abdc} \qquad (E-10)$$

où nous avons explicité, la phase en spin et isospin. D'où l'expression de M en fonction de termes directs :

$$M = \mathcal{D}_{abcd} + (-)^{bc+jd-J'-T'} \mathcal{D}_{abdc} \qquad (E-11)$$

2) Si a = b ou c = d, il n'est pas nécessaire de calculer le terme d'échange. En effet, par exemple si c = d, en couplage j-j :

$$\mathcal{O}$$
 | (c(1)d(2)) $\mathcal{J}' > = (1+(-)^{j_c+j_d-\mathcal{J}'-\mathcal{T}'}) | (c(1)d(2)) \mathcal{J}' > , (E-12)$

où la règle de sélection (D-21) apparaît. Dans ce cas, l'expression de l'élément de matrice est :

$$M = \frac{2}{\sqrt{1 + \delta_{ab}}\sqrt{1 + \delta_{cd}}} \quad D_{abcd}, \quad avec J + T \text{ impair}. \quad (E-13)$$

E.2.2. Calcul de l'élément de matrice direct particule-particule.

On considère un opérateur à deux corps dont la dépendance spatiale est dans la variable relative $r_{12} = |\vec{r_1} - \vec{r_2}|$. Pour un tel calcul il existe deux démarches symétriques :

- Soit effectuer un changement de variables d'espace sur les fonctions d'onde en passant de $\vec{r_1}$, $\vec{r_2}$ aux variables relatives $\vec{r_1} - \vec{r_2}$ et du centre de masse $(\vec{r_1} + \vec{r_2})/2$. Cette méthode est limitée aux fonctions radiales d'oscillateur harmonique, stables dans ce changement de variables qui s'effectue alors au moyen de coefficients de Moshinsky^[56]. Cette méthode peut cependant être généralisée dans le cadre du formalisme hypersphérique^[57].

- Soit faire un développement multipolaire de l'interaction pour séparer les variables 1 et 2. C'est cette dernière méthode que nous exposons. Nous nous limitons à l'étude d'une force centrale du type (III-27) :

$$\mathcal{O}^{(2)} = \bigvee (\pi_{n_2}) (a_0 + a_6 \vec{q}_1 \vec{q}_2 + a_7 \vec{z}_1 \cdot \vec{z}_2 + a_{67} \vec{q}_1 \vec{q}_2 \vec{z}_1 \cdot \vec{z}_2) , \quad (E-14)$$

et à la force de Coulomb^{*} :

$$\mathcal{O}_{4\pi\epsilon_{o}}^{(2)} = \frac{\Lambda}{4\pi\epsilon_{o}} \frac{e^{2}}{\pi_{A2}} \left(1/2 + t_{3}(1) \right) \left(1/2 + t_{3}(2) \right) , \quad (E-15)$$

où la partie isospin correspond au projecteur (C-9) sur les états à deux protons. Pour calculer l'élément de matrice direct (E-8) on décompose $o^{(2)}$ en sommes de produits d'opérateurs tensoriels irréductibles agissant séparément sur les variables d'espace, de spin et d'isospin, puis nous utilisons la formule de réduction du produit tensoriel (B-55).

a) Développement multipolaire de la partie spatiale V(r12).

La variable relative $r_{12} = (r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2 \cos \omega_{12})^{1/2}$ dépend de r_1, r_2 et de $\cos \omega_{12}$ où ω_{12} est l'angle entre $\vec{r_1}$ et $\vec{r_2}$.

Les polynômes de Legendre $P_{\ell}(u)$ forment un système complet orthogonal de polynômes définis sur le segment (-1, +1); ils satisfont la relation d'orthogonalité $\begin{bmatrix} 58 \\ +4 \end{bmatrix}$:

$$\int_{-1}^{1} P_{R}(u) P_{e}(u) du = \frac{2}{2e+1} \delta_{Re} .$$
 (E-16)

Décomposons V(r₁₂) en série de polynômes de Legendre de la variable cos ω_{12} :

$$V(\pi_{n_2}) = \sum_{e=0}^{\infty} (2e+1) V_e(\pi_n, \pi_2) P_e(\cos \omega_{n_2}) , \quad (E-17)$$

*La force de Coulomb exprimée en MeV et la distance en fm, nous avons :

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_o} \frac{1}{\tau_{n2}} (Mev) = 1.440 \frac{1}{\tau_{n2}} (fm)$$

avec

$$V_{\ell}(\tau_{1},\tau_{2}) = \frac{1}{2} \int_{-1}^{+1} P_{\ell}(\cos \omega_{12}) V(\tau_{12}) d(\cos \omega_{12})$$
(E-18)

Indiquons les expressions respectives de $V_{\ell}(r_1, r_2)$ pour une force δ , gaussienne, de Yukawa et de Coulomb :

$V(\pi_{A2})$	$V_e(\pi_1,\pi_2)$	9,548
$\delta(\vec{\pi}_1 - \vec{\pi}_2)$	$\frac{1}{4\pi} \frac{\delta(\pi_1 - \pi_2)}{\pi_1^2}$	
$e^{-\left(\frac{\tau_{n2}}{\mu}\right)^2}$	$(-i)^{\ell} j_{\ell} (i \frac{2r_{1}r_{2}}{\mu^{2}}) e^{-\frac{r_{1}^{2}+r_{2}^{2}}{\mu^{2}}}$	(E-19)
e-2/2/4 T/2/4	$i j_e (i \frac{\pi_z}{\mu}) R_e^+ (i \frac{\pi_z}{\mu})$	
1 	$\frac{1}{2l+1} \frac{\pi_2^{l}}{\pi_2^{l+1}}$	

où j $_{\ell}$ et h $_{\ell}^{+}$ sont les fonctions de Bessel sphériques de première et de troisième espèce $^{[58]}$ et :

 $r_{r_{1}} = inf(r_{1}, r_{2})$, $r_{r_{2}} = sup(r_{1}, r_{2})$.

Exprimons P_{ℓ} (cos ω_{12}) en fonction du produit couplé à zéro (correspondant au caractère scalaire d'espace de V(r₁₂)) des harmoniques sphériques (B-41) des directions \hat{T}_1 et \hat{T}_2 :

$$P_{\ell}(\cos \omega_{12}) = \frac{4\pi}{2\ell+1} \sum_{m=-\ell}^{+\ell} \gamma_{m}^{\ell*}(\hat{\tau}_{1}) \gamma_{m}^{\ell}(\hat{\tau}_{2}) = \frac{4\pi}{\hat{\ell}} \left[\gamma_{\ell}^{\ell}(\hat{\tau}_{1}) \gamma_{\ell}^{\ell}(\hat{\tau}_{2}) \right]_{0}^{0} \cdot (E-20)$$

D'où le développement multipolaire de $V(r_{12})$:

$$\nabla(\pi_{n_2}) = 4\Pi \sum_{\ell=0}^{\infty} \nabla_{\ell}(\pi_n, \pi_2) \hat{\ell} \left[\Upsilon^{\ell}(\hat{\pi}_1) \Upsilon^{\ell}(\hat{\pi}_2) \right]_0^{\circ} \qquad (E-21)$$

b) Séparation dans l'interaction des variables 1 et 2 de spin et d'isospin.

1 - Dans le cas de la force de Coulomb, l'opérateur n'agit pas sur le spin, et la partie isospin se réduit au projecteur sur l'état à deux protons, d'où la règle de sélection pour l'élément de matrice à deux corps :

$$T = T' = M_T = M_{T'} = 1$$

Cet opérateur d'isospin est un mélange d'opérateurs tensoriels de rang zéro, un (B-42) et deux :

$$(1/2 + t_{3}(1))(1/2 + t_{3}(2)) = \frac{1}{4} + \frac{1}{2} T_{0}^{1} + \frac{1}{\sqrt{3}} \left[(t^{1}(1)t^{2}(2))_{0}^{0} - \sqrt{2} (t^{2}(1)t^{1}(2))_{0}^{2} \right]_{(E-22)}^{2}$$

et tous de projection d'isospin zéro correspondant à la conservation de la charge.

2 - Dans le cas de la force centrale (E-14) donnons une expression de la partie spin et isospin analogue au développement multipolaire pour la partie d'espace. Pour cela introduisons les opérateurs vectoriels, définis par $(B-42)^{*}$, σ^{1} et τ^{1} en généralisant les notations :

de plus désignons globalement par a les paramètres a, a, a, a; a;

$$a_{\mu\nu} = \frac{\begin{array}{c|c} \nu & 0 & 1 \\ \hline 0 & a_0 & a_\tau \\ \hline 1 & a_\sigma & a_{\sigma\tau} \end{array}}$$
(E-24)

En utilisant l'expression (B-43) du produit scalaire, on obtient la forme générale pour la force centrale (E-14) où les variables d'espace, de spin et d'isospin sont traitées de facon identique :

$$\mathcal{O}_{=}^{(2)} 4 \Pi \sum_{e \mu \nu} V_{e}(\tau_{1}, \tau_{2}) a_{\mu \nu} \hat{\ell}_{\mu} \hat{\nu} (\Upsilon_{(1)} \Upsilon_{(2)})^{0} (\sigma_{(1)}^{H} \sigma_{(2)}^{H})^{0} (\Upsilon_{(1)} \Upsilon_{(2)})^{0}.$$
(E-25)

Les variables d'espace et de spin se regroupent de la façon suivante :

$$\left[Y_{(1)}^{\ell} Y_{(2)}^{\ell} \right]^{\circ} \left[\sigma^{H}(n) \sigma^{H}(2) \right]^{\circ} = \sum_{\mathcal{J}} \begin{bmatrix} \ell \ell o \\ \mu \mu o \\ \mathcal{J} \mathcal{J} o \end{bmatrix} \left(\left(Y_{(1)}^{\ell} \sigma^{H}(n) \right)^{\mathcal{J}} \left(Y_{(2)}^{\ell} \sigma^{H}(2) \right)^{\mathcal{J}} \right)^{\circ} .$$
 (E-26)

*Nous omettons les crochets pour indiquer la variance (B.4.2), toutes les grandeurs considérées appartiennent à la représentation σ^{j} .

c) Séparation des variables 1 et 2 dans l'élément de matrice.

Compte tenu des développements précédents, le terme direct de la force centrale (E-14) s'écrit :

$$\begin{split} \mathcal{D}_{abcd} = & \frac{4\pi}{3\hat{\tau}} \sum_{\ell \neq \Im \nu} \alpha_{\mu\nu} \mathcal{R}_{abcd}^{\ell} \hat{\mathcal{J}} \left[(j_{a}j_{b}) \mathcal{J} \| \left((\Upsilon_{(1)}^{\ell} \sigma^{\mu}_{(1)})^{\mathcal{J}} (\Upsilon_{(2)}^{\ell} \sigma^{\mu}_{(2)})^{\mathcal{J}} \right)^{\circ} \| \\ & (j_{c}j_{d}) \mathcal{J} \right] \left[(t_{a}t_{b}) \mathcal{T} \| \hat{\mathcal{V}} (\mathcal{V}_{(n)} \mathcal{V}_{(2)}^{\prime})^{\circ} \| (t_{c}t_{d}) \mathcal{T} \right] \\ & (j_{c}j_{d}) \mathcal{J} \left[(t_{a}t_{b}) \mathcal{T} \| \hat{\mathcal{V}} (\mathcal{V}_{(n)} \mathcal{V}_{(2)}^{\prime})^{\circ} \| (t_{c}t_{d}) \mathcal{T} \right] \end{split}$$

où $\mathcal{R}_{abcd}^{\ell}$ est l'intégrale radiale (ou de Slater) :

$$\mathcal{R}_{abcd}^{e} = \int_{\tau_{1}}^{\tau_{2}} dr_{1} \int_{\tau_{2}}^{\tau_{2}} dr_{2} \int_{q}^{\tau_{1}} (\tau_{1}) \int_{b}^{\tau_{2}} (\tau_{2}) V_{\ell}(\tau_{1},\tau_{2}) \int_{c}^{\tau_{1}} (\tau_{1}) \int_{d}^{\tau_{2}} (\tau_{2}) \quad . \quad (E-28)$$

Les éléments de matrice réduits sont ceux définis par le théorème de Wigner-Eckart (B-52).

La formule de réduction du produit tensoriel (B-55) permet de séparer les variables 1 et 2 :

- l'élément de matrice réduit d'espace et de spin s'écrit :

$$\begin{bmatrix} (j_{a}j_{b})J \| ((Y_{i_{1}}^{e}) \sigma_{i_{1}})^{\gamma} (Y_{i_{2}}^{e}) \sigma_{i_{2}})^{\gamma} \| (j_{c}j_{d})J \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} j_{a}j_{b}J \\ J J \circ \\ J J \circ \\ j_{c}j_{d}J \end{bmatrix} \frac{J}{J_{c}} \begin{bmatrix} j_{a} \| (Y^{e} \sigma^{H})^{\gamma} \| j_{c} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j_{b} \| (Y^{e} \sigma^{H})^{\gamma} \| j_{d} \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} j_{a}j_{b}J \\ J \sigma \\ J \sigma \end{bmatrix} \frac{J}{J_{c}} \frac{J}{J_{d}} \begin{bmatrix} j_{a} \| (Y^{e} \sigma^{H})^{\gamma} \| j_{c} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j_{b} \| (Y^{e} \sigma^{H})^{\gamma} \| j_{d} \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} j_{a}j_{b}J \\ J \sigma \\ J \sigma \end{bmatrix} \frac{J}{J_{c}} \frac{J}{J_{d}} \begin{bmatrix} j_{a} \| (Y^{e} \sigma^{H})^{\gamma} \| j_{c} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j_{b} \| (Y^{e} \sigma^{H})^{\gamma} \| j_{d} \end{bmatrix}$$

Les éléments de matrice réduits à un corps se calculent en séparant de la même façon les variables d'espace et de spin :

$$\int_{\partial a} \| (Y^{\ell} \sigma H)^{\mathcal{J}} \| j_{c}] = \begin{bmatrix} \ell_{a} \frac{1}{2} j_{a} \\ \ell & \mu \mathcal{J} \\ \ell_{c} \frac{1}{2} j_{c} \end{bmatrix} - \frac{\hat{j}_{c}}{\hat{\ell}_{c} \hat{\gamma}_{2}} \begin{bmatrix} \ell_{a} \| Y^{\ell} \| \ell_{c} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1/2 \| \sigma H \| 1/2 \end{bmatrix} .$$

$$(E-30)$$

- Pour l'élément de matrice réduit d'isospin, cette séparation s'écrit :

$$\begin{bmatrix} (t_{a}t_{b}) \top \| (\tau(n)^{\nu}\tau(2)^{\nu})^{\circ} \| (t_{c}t_{d}) \top \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{2} & \sqrt{2} & 1/2 \\ \nu & \sqrt{2} & 0 \\ \sqrt{2} & \sqrt{2} & 0 \\ \sqrt{2} & \sqrt{2} & 1 \end{bmatrix} \frac{\hat{T}}{\hat{2} & \hat{2}} \quad (\begin{bmatrix} 1/2 \| \tau^{\nu} \| 1/2 \end{bmatrix})^{2} \quad . \tag{E-31}$$

Les valeurs des éléments de matrice réduits des harmoniques sphériques ainsi que celles des opérateurs de spin et isospin sont données par (B-53). Regroupant ces résultats, nous obtenons l'expression de l'élément de matrice direct de la force centrale (E-14) :

$$\begin{split} \mathcal{D}_{abcd} &= \sum_{\ell \mu \nu} \mathcal{R}_{abcd}^{\ell} a_{\mu \nu} A_{\tau \nu} \mathcal{B}_{\mu} (-)^{\frac{1}{2} (l_a - l_b - l_c + l_d)} (2l+1) \\ & (l_c \circ o l_a \circ) (l_a \circ o l_b \circ) \sum_{\mathcal{T}} \widehat{\mathcal{T}} \begin{bmatrix} j_a j_b J \\ \mathcal{T} \mathcal{T} \circ \\ j_c j_d J \end{bmatrix} \begin{bmatrix} l_a \frac{1}{2} j_a \\ \ell \mu \mathcal{T} \\ \ell \mu \mathcal{T} \\ l_a \frac{1}{2} j_a \end{bmatrix} (E-32) \end{split}$$

avec:

$$A_{\tau \nu} = \frac{\tau^{\nu} \circ 1}{1 1 1}, \quad B_{\mu} = \begin{cases} 1 & \mu = 0 \\ -3 & \mu = 1 \end{cases}$$

d) Cas de la force de Coulomb.

Le traitement de la partie isospin se fait directement par la règle de sélection T = $M_T = 1$.

Le calcul de la partie spatiale et spin est identique au cas précédent pour a_{ρ} ($\mu = \nu = 0$) indépendant du spin et de l'isospin ; d'où le résultat :

E.3. CALCUL DES POTENTIELS DU PROBLEME.

Les éléments de matrice sur les états à N particules que nous considérons sont de trois types :

$$1 - \sqrt[n]{\alpha} | o^{(2)} | \widetilde{\alpha}^{*} \rangle_{n} ,$$

$$2 - \sqrt[n]{\alpha} | o^{(2)} | \widetilde{\gamma}_{\ell} \rangle_{n} | ri \rangle \sqrt{N} ,$$

$$3 - \langle \gamma_{\ell} , ri | o^{(2)} | \gamma_{\ell} , r^{*}i^{*} \rangle ,$$

où $|\widetilde{\alpha}\rangle_n$ et $|\widetilde{\gamma}_{\ell}\rangle_n$ sont respectivement des états à N et N-1 nucléons liés, $|ri\rangle$ est état propre de $|\vec{r}|$ et i désigne les autres nombres quantiques (ℓ, j, m_j, r, m_t) qui définissent cet état individuel.

En (E.1), nous avons vu comment réduire ces calculs à des sommes d'éléments de matrice à deux corps. Nous précisons les deux points suivants :

- calculs des éléments de matrice à deux corps avec des états |ri
angle .

- séparation des contributions coeur-coeur, coeur-externe et externe-externe.

E.3.1. Eléments de matrice à deux corps comprenant des états $|r_i\rangle$.

La décomposition (E-5) des éléments de matrice 2 et 3 ci-dessus conduit respectivement aux éléments de matrice suivants :

$$m = \langle (a(1), b(2)) J | O_{1,2} | (C(1), ri(2)) J' \rangle, \quad (E-34)$$

$$m' = \langle (a(1), \tau(2)) J | O_{1,2} | (c(1), \tau'(2)) J' \rangle . \quad (E-35)$$

Remarque : l'état $|r_i\rangle$, état propre de $|\vec{r}|$ n'est pas normalisable, cependant les états à N particules incluant cet état sont définis avec la norme de comptage $1/\sqrt{N}$ (analogue à (D-60)).

Les expressions (E-32) et (E-33) des éléments de matrice à deux corps sont inchangées. Seule l'intégrale radiale (E-28) est modifiée par la nature particulière de la fonction d'onde radiale de l'état $|ri\rangle$:

$$f_{\pi}(\pi') = \langle \pi' i | \pi i \rangle = \frac{\delta(\pi - \pi')}{\pi^2}$$
. (E-36)

Ces intégrales radiales directe et d'échange s'écrivent alors respectivement, pour les éléments de matrice m :

$$\mathcal{R}_{a,b,c,ri}^{\ell} = \int_{0}^{2^{2}} dr_{n} f_{a}(r_{n}) f_{b}(r) V_{\ell}(r_{n}, r) f_{c}(r_{n}) \qquad (E-37)$$

$$\mathcal{R}_{b,a,c,\tau_{i}}^{\ell} = \int_{0}^{\infty} \tau_{1}^{2} d\tau_{1} \int_{0}^{1} (\tau_{1}) \int_{0}^{1} (\tau_{1}) \sqrt{\ell(\tau_{1},\tau)} \int_{0}^{1} (\tau_{1}) , \quad (E-38)$$

et pour les éléments de matrice m' :

$$\mathcal{R}_{a,ri,c,r'i'}^{\ell} = \frac{\delta(r_{-}r')}{r^{2}} \int_{0}^{r_{2}} dr_{n} \int_{a}^{a} (r_{n}) V_{e}(r_{n},r) f_{c}(r_{n}) , \quad (E-39)$$

$$R_{a,ri,ri,c}^{l} = f_{a}(r) V_{e}(r,r') f_{c}(r')$$
. (E-40)

En reportant les expressions précédentes dans les Eqs. (E-32) et (E-11) des éléments de matrice à deux corps, m et m' s'expriment de la façon suivante :

$$m = \mathcal{W}_{abci}(z) \qquad (E-41)$$

$$m' = \frac{\delta(\pi_{-}\pi')}{\pi^{2}} V_{aici}^{L}(\pi) + V_{aici}^{RL}(\pi,\pi') . \qquad (E-42)$$

A partir du développement (E-5), les éléments de matrice de types 2 et 3 s'écrivent donc sous la forme des potentiels locaux et non-locaux suivants :

où γ désigne à la fois les nombres quantiques $\gamma_{_{e}}$ et i.

E.3.2. <u>Séparation des contributions coeur-coeur, coeur-externe et</u> <u>externe-externe.</u>

Les états à N (resp. N-1) nucléons considérés sont du type (D-47) (resp. (D-35)), c'est à dire obtenus par antisymétrisation, couplage et normalisation d'un coeur scalaire $|\widetilde{C}_{O}\rangle_{n}$ de n_o particules et d'une couche externe $|\widetilde{e} I\rangle_{n}$ de n₁ = N-n_o (resp. N-1-n_o) particules.

Par application de (D-25), les éléments de matrice sur de tels états s'écrivent :

$$M = \langle \widetilde{C}_{N} | \mathcal{O}^{(2)} | \widetilde{C}_{N} \rangle_{m} = \langle \widetilde{C}_{0}(1, \dots, m_{o}) \circ | \widetilde{\mathcal{C}}(m_{o}+1, \dots, N) I |$$
$$\mathcal{O}^{(2)} \mathcal{H}(m_{o}, m_{o}) (| \widetilde{C}_{0}(1, \dots, m_{o}) \circ \rangle | \widetilde{\mathcal{C}}(m_{o}+1, \dots, N) I \rangle).$$
(E-45)

Regroupons les différentes contributions de l'opérateur $o^{(2)}$ de la façon suivante :

$$\mathcal{O}^{(2)} = \sum_{i < j, \gamma}^{m_o + m_j} \mathcal{O}_{ij} = \sum_{i < j, \gamma}^{m_o} \mathcal{O}_{ij} + \sum_{i=1}^{m_o} \sum_{j=m_o + \gamma}^{m_o + m_j} \mathcal{O}_{ij} + \sum_{i < j, m_o + \gamma}^{m_o + m_j} \mathcal{O}_{ij}, \quad (E-46)$$

où l'on a supposé $\mathcal{O}_{ij} = \mathcal{O}_{ji}$. Ces trois termes correspondent respectivement aux contributions coeur-coeur, coeur-externe et externe-externe du potentiel. Détaillons le calcul de la contribution coeur-externe M_{ce} . Les structures C_o et e étant antisymétrisées, M_{ce} s'exprime en fonction de l'élément de matrice de la restriction (cf. E.1) de l'opérateur $\mathcal{O}^{(2)}$ à deux espaces individuels, l'un correspondant à un état du coeur et l'autre à un état de la couche externe, par exemple, $0_{n_0, n_0+n_1}$. Cela introduit le facteur de comptage $n_0 n_1/2$, soit :

Parmi les $(n_0+n_1)!/n_0!n_1!$ substitutions (D-13) de $\mathscr{A}(n_0,n_1)$, seules l'identité et la transposition entre n_0 et n_0+n_1 peuvent donner une contribution non nulle. En effet, l'orthogonalité des états individuels des structures C_0 et e conduit pour les autres substitutions, à des intégrales de recouvrement nulles, d'où :

$$M_{ce} = \frac{n_o n_1}{2} \bigwedge_{n} \widetilde{C_o(n_o)} O |_{n} \widetilde{e(n_1)} I |_{n_o, n_o+n_1} (1 - \widetilde{S_{n_o, n_o+n_1}}) |\widetilde{C_o(n_o)} O \rangle_{n} | \widetilde{e'(n_1)} I \rangle_{n_o}$$
(E-48)

La décomposition de M en somme d'éléments de matrice à deux corps sur l'espace $\mathscr{O}_{n_0}^{(1)} \otimes \mathscr{O}_{n_0+n_1}^{(1)}$ est la même pour les termes correspondant à l et à $\mathscr{P}_{n_0,n_0+n_1}$. La somme de ces deux contributions a pour effet d'antisymétriser le ket des éléments de matrice à deux corps.

En décomposant les structures C_o et e à l'aide des "coefficients associés aux c.p.f." (D-47) et (D-41), on obtient :

$$M_{ce} = \sum_{\substack{n \in j \\ n' \in j'}} \hat{j} \cdot \hat{\gamma}_{2} \cdot \hat{j} \cdot \hat{\gamma}_{2} \sum_{\substack{C_{n_{1}-1} \subset i}} C_{e}^{e} \sum_{\substack{n_{1}-1, C_{1}}} \sum_{\substack{C_{n_{1}-1}, C_{1}}} C_{e}^{e} \sum_{\substack{C_{n_{1}-1}, C_{1}}} C_{e} \sum_{\substack{C_{n_{1}-1}, C_{1}$$

Par changement des couplages, on regroupe les termes d'interaction d'une part et de recouvrement d'autre part :

$$\begin{split} M_{ce} &= \sum_{\substack{n \in j \\ n'\ell'j'}} \hat{j} \hat{\gamma}_{2} \hat{j} \hat{\gamma}_{2} \sum_{\substack{C_{n_{1}-1}, C_{1} \\ C_{n_{1}-1}, C_{1} \\ C_{n_{1}-1}, C_{1} \\ C_{n_{1}-1}, C_{1} \\ \end{array} \underbrace{\begin{array}{c} e' \\ C_{n_{1}-1}, C_{1} \\ C_{1} \\ C_{n_{1}-1}, C_{1} \\ C_{$$

Pour un opérateur $o^{(2)}$ scalaire en spin et isospin, le théorème de Wigner-Eckart (B-52) et la formule de réduction du produit tensoriel (B-55) permettent d'isoler le terme d'interaction :

$$M_{ce} = \sum_{n\ell j} 2(2j+1) \sum_{\substack{C_{n_{1}-1}, C_{1}, C_{1}}} \mathcal{C}_{n_{1}-1} C_{1} C_{n_{1}-1} C_{1} C_{n_{1}-1} C_{1}^{\prime}$$

$$\sum_{\substack{L_{n_{1}-1}, I_{1}, I\\ \lambda & \mu & I}} \begin{bmatrix} j & j & 0\\ I_{m_{1}-1} & I_{1} & I\\ \lambda & \mu & I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j & j & 0\\ I_{m_{1}-1} & I_{1}^{\prime} & I\\ \lambda & \mu & I \end{bmatrix} < (j, C_{1}) \mu | \mathcal{O}^{(2)} | (j, C_{1}^{\prime}) \mu \rangle. \quad (E-50)$$

où les "9j carrés" sont en fait le produit des coefficients correspondants pour le spin et l'isospin.

F. METHODES NUMERIQUES DE RESOLUTION DES EQUATIONS

F.1. PRINCIPE DE LA METHODE NUMERIQUE.

Pour résoudre des équations différentielles (C.3.2b) ou des systèmes d'équations intégro-différentielles couplées (II-42) du deuxième ordre et ne dépendant pas explicitement de la dérivée première, nous utilisons la méthode numérique de Cowell^[59] (dite aussi de Fox-Goodwin^[60]). Elle consiste à discrétiser la variable r suivant un pas h, et à utiliser la relation :

$$g(r+h) - \frac{k^2}{12} q''(r+h) - 2q(r) - \frac{5h^2}{6} q''(r) + q(r-h) - \frac{h^2}{12} q''(r-h) = -\frac{h^6}{240} q^{(6)}(r) + O(h^8) , \qquad (F-1)$$

qui relie les valeurs de la fonction et de sa dérivée seconde en trois points équidistants.

Obtenue par un développement de Taylor-Young, cette formule à trois points s'applique à une fonction g(r) définie et dérivable jusqu'à l'ordre six sur le segment (r-h, r+h), et qui admet au point r une dérivée d'ordre sept.

Différentes méthodes numériques d'intégration, ainsi qu'une discussion des erreurs qu'elles introduisent, sont présentées dans les références [61] et [62].

F.2. INTEGRATION DE L'EQUATION DE SCHRODINGER RADIALE A UN CORPS.

F.2.1. Généralités.

Le hamiltonien à un corps considéré en (C.3) est :

$$h = \frac{P^{2}}{2\mu} + v_{1}(v_{1}) + v_{2}(v_{1}) (\vec{l} \cdot \vec{s})_{l_{j}}, \qquad (F-2)$$

où v_1 et v_2 sont des potentiels isotropes réguliers sur $]0, +\infty]$ et tels

- A63 -

que :

$$\lim_{n \to \infty} \mathcal{T}_{\gamma}(n) = 0 \quad \lim_{n \to \infty} \mathcal{T}_{\gamma}(n) = 0 \quad . \tag{F-3}$$

(la méthode s'étend à un potentiel coulombien).

L'équation de Schrödinger radiale que satisfait la fonction définie à partir de (C-26) par :

$$g_{\text{Elj}}(\tau) = \tau f_{\text{Elj}}(\tau) \quad \text{avec} \quad g(0) = 0 \quad , \quad (F-4)$$

est du type homogène suivant :

$$\frac{d^2}{dr^2} g(r) + A(r) g(r) = 0 \qquad (F-5)$$

où

$$A(\pi) = \frac{2\mu}{R^2} \left[-\frac{\ell(\ell+1)}{\pi^2} - \sqrt{(\pi)} - \sqrt{(\pi)} (\ell \cdot \vec{s})_{\ell j} + \epsilon \right]$$
(F-6)

En négligeant le second membre de (F-1) et exprimant g" en fonction de g par (F-5), nous obtenons la relation :

$$\left[1 + \frac{\hbar^2}{12} A(r_+h) \right] g(r_+h) - \left[2 - \frac{5}{6} h^2 A(r_-) \right] g(r_-h) = 0 ,$$
(F-7)

qui relie la valeur de la fonction g en trois points équidistants. Désignons par $r_i = (i-1)h$ (i = 1, ..., n) les points de discrétisation de r et par g_i la valeur de g en ces points, $g_i = g(r_i)$.

Les valeurs de g en deux points sont nécessaires pour initialiser la relation de récurrence (F-7), par exemple :

$$g_1 = 0$$
 et $g_2 = c$ (F-8)

La valeur de c est arbitraire^{π}, l'équation (F-5) étant linéaire, g est en effet définie à un facteur multiplicatif près déterminé par des conditions de normalisation imposées à la fonction g.

*Pour des raisons numériques, on choisit cependant $c = h^{\ell+1}$, qui correspond au bon comportement à l'origine de la fonction g.

F.2.2. Etats de diffusion ($\varepsilon > 0$).

Avec les conditions initiales (F-8), on détermine de proche en proche les valeurs de g pour des r croissants:

La section efficace est calculée à partir du comportement asymptotique de g, supposé atteint pour la plus grande valeur de r considérée, $r_n = (n-1)h$. Pour cela, r_n doit être supérieur aux portées caractéristiques des potentiels.

a) Etat de diffusion à énergie ε strictement positive.

Dans la région des grandes valeurs de r, où les potentiels (satisfaisant (F-3)) peuvent être négligés, g(r) est une combinaison linéaire des solutions libres régulière et irrégulière à l'origine, soit :

$$g(r) = \alpha Rr j_e(Rr) + \beta Rr y_e(Rr) , \qquad (F-9)$$

avec $k = \sqrt{\frac{2\mu}{\mu^2}} \epsilon$ et j, et y étant les fonctions de Bessel sphériques de première et deuxième espèce^[58] (ou les fonctions coulombiennes régulière et irrégulière dans le cas de potentiels coulombiens).

La forme asymptotique de g(r) est :

$$q(r) \simeq a_{\ell} \sin(kr - 1/2 \ell \pi + \delta_{\ell})$$
. (F-10)

Des comportements asymptotiques respectifs des fonctions de Bessel sphériques :

$$\begin{array}{c} p_{i}(p) \sim \sin\left(p-1/2 \, l \, \pi\right), \quad p_{i}(p) \sim \cos\left(p-1/2 \, l \, \pi\right), \quad (F-11) \\ p \rightarrow \infty \end{array}$$

on déduit le déphasage δ ,

$$\alpha = A \cos \delta_{e}$$
, $tg \delta_{e} = \frac{\beta}{\alpha}$.
 $\beta = A \sin \delta_{e}$, $tg \delta_{e} = \frac{\beta}{\alpha}$.
(F-12)

Les paramètres α et β sont déterminés à partir des valeurs de g, obtenues par résolution numérique de l'équation différentielle, en deux points correspondant à de grandes valeurs de r, par exemple r_{n-1} et r_n .

Remarques : $1 - L'ambiguité sur le déphasage <math>\delta_{\ell}$, défini ci-dessus à $2n\pi$ près, peut être levée en faisant varier le potentiel depuis O jusqu'à sa valeur A(r) et en suivant par continuité la valeur du déphasage^[15].

2- On "normalise" la fonction g, en multipliant la solution obtenue par le facteur $1/\sqrt{\alpha^2 + \beta^2}$ pour avoir la forme asymptotique suivante :

$$g(r) \sim \sin(kr - 1/2 l\pi + \delta_e)$$
.
 $r \rightarrow \infty$ (F-13)

La section efficace est :

$$\sigma_{e} = \frac{4\pi}{R^{2}} (2\ell + 1) \sin^{2} \delta_{e}$$
 (F-14)

b) Etats de diffusion à énergie ε nulle.

La forme asymptotique de g(r) est alors :

$$\begin{array}{ccc} q(\pi) & \sim \alpha \left(1 - \frac{\pi}{b}\right) \\ \gamma_{\rightarrow \infty} & & b \end{array}$$
 (F-15)

où b = - lim $(tg\delta)/k$ est la longueur de diffusion. $k \rightarrow 0$

Comme précédemment, les paramètres a et b sont déterminés à partir des valeurs de g en deux points de r grand (r et r par exemple).

On normalise la fonction g en divisant la solution obtenue par a, pour avoir la forme asymptotique 1 - r/b.

La section efficace est :

$$\sigma = 4\pi b^2 \qquad (F-16)$$

F.2.3. Etats liés ($\varepsilon < 0$).

On traite de façon semblable les deux problèmes suivants :

- déterminer l'énergie de liaison ε d'un état n, ℓ , j (si celui-ci est lié) dans un potentiel donné,

- déterminer la profondeur v_0 d'un potentiel (C-39) qui lie un état ε , n, ℓ , j donné.

La méthode exposée en (F.2.1) peut être utilisée de la façon suivante. Pour les grandes valeurs de r, la solution g(r) est, à priori, une combinaison linéaire d'exponentielles décroissante et croissante :

$$g(r) = \alpha e^{-kr} + \beta e^{+kr} , \qquad (F-17)$$

avec $k = \sqrt{2\mu |\epsilon|/\mu^2}$. La valeur de ϵ (resp. v_0) cherchée est celle qui annule

le coefficient β de l'exponentielle croissante à l'infini. On montre (propriétés du Wronskien^[63]) que β/α s'annule en changeant de signe. Un pas de recherche permet d'encadrer la valeur de ε (resp. v_0) que l'on détermine ensuite par dichotomie. La fonction d'onde correspondante doit avoir le nombre de noeuds n (origine exclue et infini inclus) désiré.

Nous utiliserons cette méthode en (F.3.3), cependant elle présente l'inconvénient d'introduire des erreurs numériques sur la fonction d'onde. En effet, même avec un coefficient β très petit ("annulé" numériquement à 10⁻⁹ près), pour les grandes valeurs de r, le terme βe^{+kr} n'est pas négligeable devant αe^{-kr} .

Nous déterminerons donc les fonctions radiales du potentiel à un corps (C-39, 40) en imposant à la solution le bon comportement exponentiellement décroissant à l'infini. Pour cela, on intègre la relation de récurrence (F-7) d'une part pour des valeurs croissantes de r avec les valeurs initiales (F-8) et d'autre part pour des valeurs décroissantes de r à partir des valeurs initiales :

$$g_{m-1} = \alpha e^{-R\tau_{m-1}}$$
, $g_m = \alpha e^{-R\tau_m}$. (F-18)

On raccorde ces deux solutions ainsi que leurs dérivées logarithmiques en une valeur intermédiaire de r. On montre^[63] que les dérivées logarithmiques des solutions précédentes sont respectivement des fonctions croissante et décroissante de l'énergie, d'où l'existence de la valeur ε (resp. v_0) cherchée. Finalement la solution obtenue est normalisée à l'unité en tenant compte de la correction de queue due à la contribution pour $r \ge r_n$ à l'intégrale de norme. De zéro à r_n cette intégrale est calculée par le méthode des trapèzes, soit :

$$\int_{0}^{\infty} (r)^{2} dr \approx \left[\sum_{i=2}^{m-1} g_{i}^{2} h + \frac{1}{2} g_{m}^{2} h \right] + \frac{1}{2R} g_{m}^{2} \qquad (F-19)$$

Cette correction est également importante pour tester l'orthogonalité des fonctions d'onde radiales d'états de nombres quantiques différents. On a de la même façon avec des notations évidentes :

$$\int_{0}^{\infty} q_{(1)}(r) q_{(2)}(r) dr \approx \left[\sum_{i=2}^{m-1} q_{(n)i} q_{(2)i} h + \frac{1}{2} q_{(n)m} q_{(2)m} h \right] + \frac{q_{(n)m} q_{(2)m}}{h_1 + h_2} \cdot (F^{-20})$$

F.3. RESOLUTION DU SYSTEME D'EQUATIONS INTEGRO-DIFFERENTIELLES COUPLEES.

F.3.1. Mise sous forme matricielle MX = Y.

Nous limitons notre étude au cas comprenant une seule voie de réaction γ . La forme générale du système d'équations intégro-différentielles (II-42) est alors la suivante :

$$\begin{cases} \sum_{\alpha'} A_{d\alpha'} a_{\alpha'} + \int_{0}^{\infty} dr B_{\alpha}(r) q(r) = 0 \\ \sum_{\alpha'} C_{\alpha'}(r) a_{\alpha'} + \frac{d^{2}}{dr^{2}} q(r) + D(r) q(r) + \int_{0}^{\infty} dr' E(r, r') q(r') = 0 , \quad (F-21b) \end{cases}$$

où on a omis l'indice γ de la voie et posé :

$$g(\pi) = \pi \Psi(\pi)$$
 (F-22)

Les inconnues sont les n coefficients a et la fonction d'onde radiale de diffusion g(r) satisfaisant g(o) = 0.

L'équation (F-21b) est du type inhomogène :

$$\frac{d^{2}}{dr^{2}}q(r) + V(r)q(r) + W(r) = 0$$
 (F-23)

où,

$$V(\pi) = D(\pi) \tag{F-24}$$

$$W(r) = \sum_{\alpha'} C_{\alpha'}(r) \alpha_{\alpha'} + \int_{O} dr' E(r, r') g(r') \qquad (F-25)$$

De la même façon que pour l'équation homogène (F-5), en négligeant le second membre de (F-1) et exprimant g" en fonction de g par (F-23), nous obtenons la relation suivante :

$$\left[1 + \frac{h^2}{12} V(r+h)\right] g(r+h) - \left[2 - \frac{5}{6} h^2 V(r)\right] g(r) + \left[1 + \frac{h^2}{12} V(r-h)\right] g(r-h) + \frac{h^2}{12} \left[W(r-h) + 10 W(r) + W(r+h)\right] = 0 .$$
(F-26)

Mais dans notre cas W(r) est une fonctionnelle de g définie par le terme intégral $\int_{0}^{\infty} dr' E(r,r') g(r')$ et donc dépend de l'ensemble des valeurs de g ; il en est de même du terme intégral des équations (F-21a).

La variable r étant discrétisée suivant le pas $h(r_i = (i-1)h, i = 1,...,n)$, nous introduisons les notations suivantes :

$$g_{i} = g(\pi_{i}) , B_{ai} = B_{a}(\pi_{i}) , C_{ia'} = C_{a'}(\pi_{i})$$

$$E_{ij} = E(\pi_{i},\pi_{j}) . \qquad (F-27)$$

Les termes intégraux sont calculés par la méthode des trapèzes, soit

$$\int dr B_{a}(r)g(r) \approx \sum_{i=2}^{m-1} h B_{ai}g_{i} + \frac{1}{2}h B_{am}g_{m} ,$$

$$\int dr' E(r_{i},r')g(r') \approx \sum_{j=2}^{m-1} h E_{ij}g_{j} + \frac{1}{2}h E_{im}g_{m} .$$
(F-28)

Introduisant ces expressions dans (F-21) et (F-26), nous sommes ramenés à résoudre un système linéaire den $_{\alpha}$ + n-2 équations à n $_{\alpha}$ + n-1 inconnues : les n amplitudes a et les n-1 valeurs de g pour r_i, i = 2,...,n, (compte tenu que g(o) = 0).

Pour cela, on choisit arbitrairement une valeur de g, par exemple g_n dont on isole la dépendance, pour chaque équation, dans le second membre. On obtient ainsi un système d'équations linéaires de la forme :

$$MX = Y$$
, (F-29)

où M est une matrice carrée de dimension n + n-2, le second membre Y dépend linéairement de g_n, et X est le vecteur colonne des inconnues :

$$X = \begin{pmatrix} a_{\alpha} \\ \vdots \\ g_i \end{pmatrix} \qquad \begin{array}{c} \alpha = 1, \dots, m_{\alpha} \\ i = 2, \dots, m_{-1} \\ \vdots \end{array}$$
(F-30)

La valeur des éléments de matrice de M et du second membre Y en fonction de A, B, C, D et E, estindiquée dans la Figure 17.

F.3.2. <u>Résolution numérique de l'équation matricielle MX = Y</u>.

Nous utilisons la méthode de Cholesky [64] qui consiste à factoriser la matrice carrée M (de dimensions N × N) en un produit de deux matrices triangulaires, l'une inférieure I, et l'autre supérieure S dont les éléments diagonaux S_{ii} sont égaux à l :

$$M = IS \qquad (M_{ij}) = (N_{ij}) = (N_{ij}) (N_{ij})$$
(F-31)



L'identification des éléments de matrice des deux membres conduit aux relations (les indices sont notés dans l'ordre ligne-colonne) :

$$\begin{cases} I_{in} = M_{in} & i = 1, ..., N \\ S_{ni} = \frac{M_{ni}}{I_{nn}} & (F-32) \\ I_{ik} = M_{ik} - \sum_{e=1}^{k-1} I_{ie} S_{ek} & k = 2, ..., N \\ S_{kj} = \frac{1}{I_{kk}} (M_{kj} - \sum_{e=1}^{k-1} I_{ke} S_{ej}) & i et j = k, ..., N . \end{cases}$$

Les éléments diagonaux de I sont différents de zéro car le déterminant non nul de la matrice régulière M a pour valeur :

dét
$$M = dét I \cdot dét S = \prod_{i=1}^{N} I_{ii}$$

Les équations (F-32) définissent la première colonne de I et la première ligne de S. Puis par récurrence, les équations (F-33) déterminent la k^{ième} colonne (resp. ligne) de I (resp. S), les colonnes (resp. lignes) précédentes (1 à k-1) étant connues.

Une fois I et S obtenus, X est calculé de la façon suivante :

Posons SX = Z et donc IZ = Y, soit en termes d'éléments de matrice :

$$\begin{cases} Z_{n} = \frac{Y_{n}}{I_{nn}} \\ Z_{i} = \frac{\Lambda}{I_{ii}} \left(Y_{i} - \sum_{R=1}^{i-1} I_{iR} Z_{R} \right) \\ i = 2, \dots, N \end{cases}$$
(F-34)

$$\begin{cases} X_{m} = Z_{m} & (F-35) \\ X_{m-i} = Z_{m-i} - \sum_{k=m-i+1}^{m} S_{m-i,k} X_{k} & i = 1, ..., N-1 \end{cases}$$

Les équations (F-34) déterminent Z_i par récurrence pour les i croissant de 1 à N; puis par (F-35) on obtient X_j pour les j décroissant de N à 1.

F.3.3. <u>Comportement asymptotique de g(r) et résultats</u>.

Aux grandes valeurs de r, l'équation (F-21b) se réduit à l'équation différentielle :

$$\frac{d^2}{dr^2}g(r) + \varepsilon_{\gamma_e}g(r) = 0 , \quad \varepsilon_{\gamma_e} = E - E_{\gamma_e} . \quad (F-36)$$

Suivant le signe de $\epsilon_{\gamma_{\rho}}$, on distingue les cas suivants :

-Pour une voie de réaction ouverte, on détermine le déphasage ($\epsilon_{\gamma_{\ell}} > 0$) ou la longueur de diffusion ($\epsilon_{\gamma_{\ell}} = 0$) suivant la méthode exposée en (F.2.2). L'ensemble de la solution (a_{α}^{α} , g(r)) des équations (F-21) est alors normalisé en choisissant g_n tel que le comportement asymptotique de g(r) soit :

$$\begin{array}{c} q(\tau) \sim \left\{ \begin{array}{c} \sin\left(\frac{R\tau}{L} - \frac{1}{2}\ell T + \delta\right) & \varepsilon_{\chi_e} > 0 \\ 1 - \frac{\tau}{b} & \varepsilon_{\chi_e} = 0 \\ \end{array} \right. \quad (F-37) \end{array}$$

-Dans le cas de la diffusion à énergie nulle, on calculera le recouvrement entre la fonction d'onde de diffusion obtenue et celles des états de même nombre quantique i(II-60) liés dans le potentiel à un corps considéré. Pour cela, comme en (F.2.3) on devra tenir compte de la correction de queue ; soit avec les mêmes notations qu'en (F-20) :

$$\int_{0}^{\infty} q_{mi}(r) q(r) dr \approx \int_{0}^{\tau} q_{mi}(r) q(r) dr + \frac{q_{mi}(\tau_m)}{m_{mi}} \left(1 - \frac{\tau_m}{b} - \frac{1}{b k_{mi}}\right) \quad (F-38)$$

On déterminera également la portée effective (III-16) définie par :

$$\pi_{e} = 2 \int_{0}^{\infty} \left[\left(1 - \frac{\pi}{b} \right)^{2} - g(r)^{2} \right] dr \qquad (F-39)$$

où l'intégrale de 0 à r_n sera évaluée par la méthode des trapèzes (la correction de queue est ici nulle).

Dans le cas $\varepsilon_{\gamma_{\ell}} < 0$, le problème n'a de solutions correspondant à un état lié avec g(r) ayant un comportement exponentiellement décroissant à l'infini, que pour des valeurs déterminées de $\varepsilon_{\gamma_{\ell}}$. Ces valeurs (ou, problème équivalent, la profondeur du potentiel conduisant à un $\varepsilon_{\gamma_{\ell}}$ donné) sont déterminées suivant la première méthode exposée en (F.2.3). La solution (a_{α} , g(r)) est normalisée en choisissant g_n tel que g(r) soit normalisée à l où, comme en (F.2.3) on tient compte de la correction de queue.

F.3.4. Calculs numériques.

La résolution numérique de problèmes solubles analytiquement nous a permis d'avoir une idée de la précision des méthodes exposées ci-dessus. Nous avons utilisé pour cela des potentiels locaux et non locaux carrés, nous plaçant ainsi dans une situation défavorable puisque ces potentiels étant discontinus, les conditions d'application de la formule à trois points (F.1) ne sont pas satisfaites. Néanmoins la convergence de ces méthodes en fonction du nombre de points de discrétisation est bonne : avec des potentiels carrés de longueur 3 fm (ordre de grandeur des rayons quadratiques moyens des noyaux étudiés) et de profondeur -40 Mev, les résultats sont stables à partir de 50 points de discrétisation avec un pas de 0.2 fm.

Si au lieu des fonctions radiales d'un oscillateur harmonique, on utilise celles des états liés d'un puits de Wood-Saxon, les potentiels de diffusion (E-43, 44), en particulier les termes correctifs dus à l'antisymétrisation avec l'état 2s , s'étendent beaucoup plus loin :

Ex : rayon quadratique moyen de l'état 2s de 0¹⁶ (Fig. 4) oscillateur harmonique (Tab. 2) : 3.426 fm, Wood-Saxon (Tab. 6) : 4.130 fm.

Dans ce cas nous utilisons 100 points de discrétisation avec le même pas de 0.2 fm.

La programmation des calculs a été réalisée en Fortran, et l'exécution en double précision a eu lieu sur un calculateur IBM 360 91.

Nesemples la pouverpance de con súthodes en fonction de mombre de potars de discrétization est noune : avec des pocentiels carrés de fonqueur 3 m (endre de grandeur des rayons quadractauxe soyens des novaux 65.4560) et de profondeur -40 Nev, les régularit sont stables à partie de 30 points de discrésization avec un pas de 0.2 fm.

Si an lize des fonetions sulfales d'un deciliatour harmonique, ce utilize celles des State life d'un prite de Vond-Saxon, les potentiels de diffenties (6-43, 44), en particulter les termes correctifs dus à l'antisymétries tion avec l'état la , s'étendent resuccup plus loin ;

> C : tayon quadratique moyen de l'étar 2a de 0¹⁰ (Fig. 6) oscillateur harmonique (Tab. 2) : 3.426 fm, Nood-Sayon (Tab. 6) 6 110 fm

Dana ce cas nous utilisuous 100 points de discrétisation avec la mému pas de 0.2 fm.

a programmation des calcula a été réalisée an Fortran, et l'exécution en mobie précision a en lisu sur un calculateur 128 360 91.

REFERENCES

 [1] - A. Abragam, G.L. Bacchella, H. Glåtlli, P. Mériel, J. Piesvaux et M. Pinot - C.R. Acad. Sci. Paris 274 (1972) 423.

A. Abragam, G.L. Bacchella, H. Glåttli, P. Mériel, J. Piesvaux,
M. Pinot et P. Roubeau - Proc. of the Seventeenth Congress Ampère
Turku, Finland, 21-26 August, 1972 (North-Holland, Amsterdam).

A. Abragam - Trends in Physics. (European Physical Society, Geneva, Switzerland, 1973), p. 177.

[2] - M. Chapellier, M. Goldman, Vu Hoang Chau et A. Abragam - C.R. Acad. Sci. Paris <u>268</u> (1969) 1530.

M. Goldman, M. Chapellier, Vu Hoang Chau et A. Abragam - Phys. Rev.B 10 (1974) 226.

- [3] G.E. Bacon Acta Cryst., A28 (1972) 357.
- [4] A. Abragam, G.L. Bacchella, C. Long, P. Mériel, J. Peisvaux et M. Pinot - Phys. Rev. Lett. 28 (1972) 805.
- [5] C.G. Shull et R.P. Ferrier Phys. Rev. Lett. <u>10</u> (1963) 295.
 Y. Ito et C.G. Shull Phys. Rev. <u>185</u> (1969) 961.
- [6] A. Herpin et P. Mériel J. Physique 34 (1973) 423.
- [7] A. Abragam, G.L. Bacchella, H. Glattli, P. Mériel, M. Pinot et J. Piesvaux - Phys. Rev. Lett. <u>31</u> (1973) 776.
 P. Roubeau, A. Abragam, G.L. Bacchella, H. Glattli, A. Malinovski, P. Mériel, J. Piesvaux et M. Pinot - Phys. Rev. Lett. <u>33</u> (1974) 102.
- [8] C. Bloch et V. Gillet Phys. Lett. <u>16</u> (1965) 62.
 V. Gillet et C. Bloch Phys. Lett. <u>18</u> (1965) 58.
- [9] C. Bloch Proc. XXXVI Int. School of Physics, Enrico Fermi Course (Academic Press, New York, 1966).
 C. Bloch - "Many-body description of nuclear structure and reactions", Academic Press, New York (1966).
- [10] C. Mahaux et Hans A. Weidenmüller -"Shell-model approach to nuclear reactions", North-Holland (1969).

- [11] E.C. Halbert, J.B. Mc Grory, B.H. Wildenthal et S.P. Pandya -Adv. in Nucl. Phys. Vol 4, Chap. 6.
- [12] M.H. Macfarlane Proc. XL Int. School of Physics, Enrico Fermi Course (Academic Press, New York, 1969).
- [13] J. Raynal, M.A. Melkanoff et T. Sawada Nucl. Phys., <u>A101</u> (1967) 369.
- [14] B. Giraud, J.C. Hocquenghem et A. Lumbroso Phys. Rev. C, 7 (1973) 2274.
- [15] A. Messiah "Mécanique Quantique", Tome I (X-20) Dunod (1964).
- [16] J.P. Blaizot, B. Grammaticos et G. Ripka Communication privée.
- [17] F. Ajzenberg-Selove et T. Lauritsen Nucl. Phys., A114 (1968) 1.
- [18] F. Ajzenberg-Selove Nucl. Phys., A152 (1970) 1.
- [19] F. Ajzenberg-Selove et T. Lauritsen Nucl. Phys., 11 (1959) 1.
- [20] W. Gillet Thèse à l'Université de Paris (1962).
- [21] I. Sick et J.S. Mc Carthy -Nucl. Phys., A150 (1970) 631.
- [22] P. Brix "Electron scattering and nuclear structure" Cagliari, Sept. (1970).
- [23] H. Ehrenberg -"Nuclear structure studies using electron scattering and Photoreaction" - Sendai 12-15 Sept. (1972).
- [24] J.W. Negele Phys. Rev., <u>C1</u> (1970) 1260.

H.A. Bethe -"Proceeding of the Symposium on the two-body force in nuclei", Gull Lake Michigan, Sept. (1971).

- [25] G. Ripka Thèse à l'Université de Paris (1967).
- [26] V. Gillet, B. Giraud et M. Rho Phys. Rev., 178 (1969) 1695.
- [27] V. Gillet "Sur la nature des fonctions d'onde nucléaires". Aussois (1968/.
- [28] A. Zuker Communication privée.
- [29] S. Kahana, H.C. Lee et C.K. Scott Phys. Rev., 185 (1969) 1378.
- [30] J.H.E. Mattauch, W. Thiele et A.H. Wapstra Nucl. Phys., 67 (1965)1.

- [31] A. Arima, S. Cohen, R. Lawson et M. Mac Farlane Nucl. Phys. A108 (1968) 94.
- [32] V. Gillet et J.M. Normand Nucl. Phys., A176 (1971) 225.
- [33] J.L. Fowler et H.O. Cohn Phys. Rev., <u>109</u> (1958) 89.
 C.H. Johnson et J.L. Fowler Phys. Rev., 162 (1967), 890.
- [34] Willard, Bair et Kington Phys. Rev., 98 (1955) 669. J.E. Wills - Bull. Am. Phys. Soc., Ser.II, <u>1</u> (1956) 175.
- [35] J.T. Reynolds, C.J. Slavik, C.R. Lubitz et N.C. Francis Phys. Rev., 176 (1968) 1213.
- [36] A. Mori et T. Terasawa Prog. Theor. Phys., <u>48</u> (1972) 826.
- [37] C.B. Dover et Nguyen Van Giai Nucl. Phys., A177 (1971) 559.
- [38] F. Ajzenberg-Selove Nucl. Phys., A190 (1972) 1.
- [39] J.L. Escudié, R. Lombard, M. Pignanelli, F. Resmini et A. Tarrats -Preprint.
- [40] M. Soyeur et A. Zuker Communication privée.
- [41] P. Mériel Communication privée.
- [42] F. Gabbard, R.H. Davis et T.W. Bonner Phys. Rev., <u>114</u> (1959) 201.
- [43] C. Bloch -"La théorie statistique des réactions nucléaires considérée comme un problème de communication", Aussois (1968).
- [44] W. Marshall et S.W. Lovesey -"Theory of thermal neutron scattering", Oxford, Clarendon Press (1971).
- [45] P. Moussa et R. Stora "Angular analysis of elementary particle reactions" Herceg Novi (Yougoslavie) (1966).
- [46] E.P. Wigner -"Group theory and its application to the quantum mechanics of atomic spectra", (Academic Press Inc. New-York, 1959).
- [47] P. Moussa Thèse à l'Université de Paris (1968).
- [48] V. Bargmann Rev. of Mod. Phys., <u>34</u> (1962) 829.
- [49] U. Fano et G. Racah "Irreducible tensorial sets", (Academic Press Inc., New-York, 1959).
- [50] A. Messiah "Mécanique quantique", Tome II (XIII-9 et 32), Dunod (1964).

- [51] M. Danos Ann. Phys., <u>63</u> (1971) 319.
- [52] I.S. Gradshteyn et I.M. Ryzhik "Table of integrals, Series and Products", (Academic Press, 1965).
- [53] J. Raynal "Spin-orbit interaction in inelastic nucleon scattering. The structure of nuclei", Trieste (1971).
- [54] B. Mottelson Proceeding of the International School of Physics -Enrico Fermi Course XV (Academic Press Inc., New York, 1960), p.45.
 M. Danos et V. Gillet - Phys. Rev., <u>161</u> (1967) 1034.
- [55] A. de Shalit et I. Talmi "Nuclear shell theory" (Academic Press New-York and London 1963).
- [56] I. Talmi Helv. Phys. Acta, <u>25</u> (1952) 185. M. Moshinsky - Nucl. Phys.,<u>13</u> (1959) 104. Yu. F. Smirnov - Nucl. Phys.,<u>27</u> (1961) 177.
- [57] J. Raynal et J. Revai Nuov. Cim. <u>68A</u> (1970) 612.
- [58] M. Abramowitz et I.A. Stegun N.B.S. Applied Mathematics Series 55 (1964).
- [59] P.H. Cowell et A.C.D. Crommelin Appendix to Greenwich Observations for 1909 p.84 as quoted by Henrici (1962) - (1910).
 P. Henrici - "Discrete Variable Methods in Ordinary Differential Equations", Wiley New-York (1962).
- [60] L. Fox et E.T. Goodwin Proc. Cambridge Phil. Soci., 45 (1949) 373.
- [61] M.A. Melkanoff, T. Sawada et J.Raynal "Nuclear Optical Model Calculations" - Methods in Computational Physics, Academic Press, New-York and London (1965).
- [62] J. Raynal "Equation Couplées et DWBA", Aussois (France) (1968).
- [63] A. Messiah "Mécanique Quantique" Tome I (III-8), Dunod (1964).
- [64] D.R. Hartree, F.R.S. "Numerical Analysis" Oxford second edition (1957).







