

THÈSE

PRESENTEE

A L'UNIVERSITÉ PARIS-SUD

CENTRE D'ORSAY

POUR OBTENIR

LE GRADE DE DOCTEUR ES-SCIENCES PHYSIQUES

PAR

Jean-Marie NORMAND

DESCRIPTION MICROSCOPIQUE DE LA DIFFUSION
DE NEUTRONS DE BASSE ENERGIE PAR LES NOYAUX

Soutenue le 25 Juin 1975 devant la Commission d'Examen

MM. M.R. ARVIEU

Président

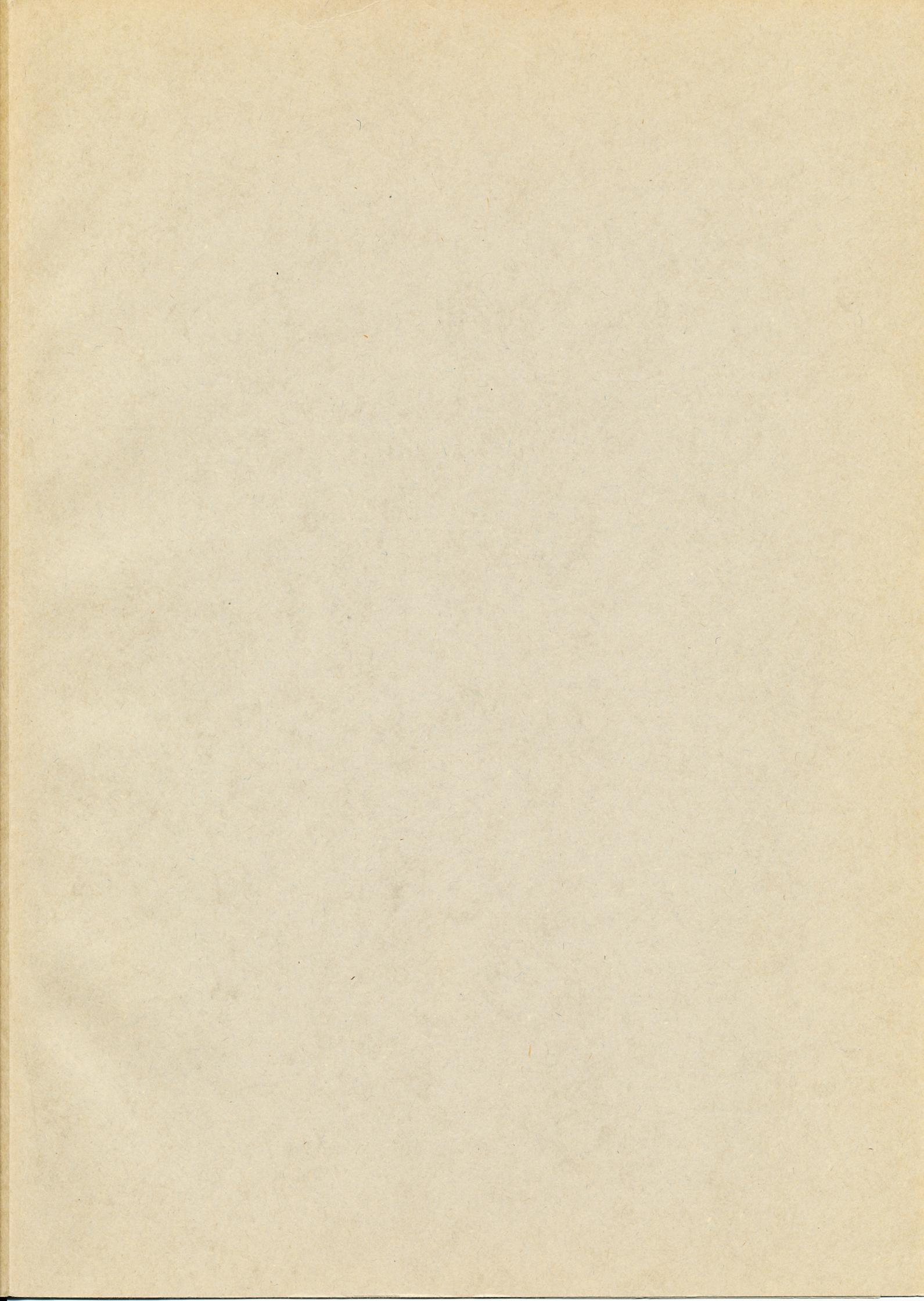
M.V. GILLET

Mme P. BENOIST-GUEUTAL

Examineurs

M.J. RAYNAL

M.M. GOLDMAN



THÈSE

PRESENTEE

A L'UNIVERSITÉ PARIS-SUD

CENTRE D'ORSAY

POUR OBTENIR

LE GRADE DE DOCTEUR ES-SCIENCES PHYSIQUES

PAR

Jean-Marie NORMAND

**DESCRIPTION MICROSCOPIQUE DE LA DIFFUSION
DE NEUTRONS DE BASSE ENERGIE PAR LES NOYAUX**

Soutenue le 25 Juin 1975 devant la Commission d'Examen

MM. M.R. ARVIEU

Président

M.V. GILLET

Mme P. BENOIST-GUEUTAL

Examineurs

M.J. RAYNAL

M.M. GOLDMAN

REMERCIEMENTS

Je remercie le Commissariat à l'Energie Atomique et plus particulièrement le Service de Physique Théorique de la Division de la Physique, pour les facilités de travail qui m'ont été accordées.

Je veux exprimer ma profonde gratitude à la mémoire du Professeur *C. BLOCH* pour m'avoir accueilli dans le Service de Physique Théorique, et m'avoir encouragé dans mes premiers travaux.

Monsieur le Professeur *R. ARVIEU* a bien voulu patronner cette thèse et je lui en suis très reconnaissant.

Je tiens aussi à remercier Madame le Professeur *P. BENOIST-GUEUTAL* et Monsieur *M. GOLDMAN* d'avoir accepté de faire partie de ce Jury.

Le travail présenté a été suscité par Monsieur le Professeur *A. ABRAGAM*, je le remercie pour l'intérêt qu'il a porté à ce travail.

Je remercie également Monsieur *P. MERIEL* pour les précisions qu'il m'a apportées sur la situation expérimentale de la diffusion des neutrons thermiques.

Monsieur *V. GILLET* a dirigé mes premiers travaux en physique nucléaire. Je l'en remercie très sincèrement.

Je tiens à remercier *J. RAYNAL* qui a suivi les développements de cette thèse et m'a prodigué de nombreux conseils et suggestions.

Ce travail à nécessité de nombreux calculs numériques. Je remercie Madame *N. TICHIT* de l'aide qu'elle m'a apportée pour la mise au point des programmes.

Madame *C. LE GALL* a dactylographié le texte et Mesdames *A. GERVOIS* et *M. PORNEUF* ont bien voulu le relire et le corriger. Je leur exprime mes plus vifs remerciements.

Ma femme a accepté la tâche ingrate de relire la première rédaction, je lui en suis extrêmement reconnaissant.

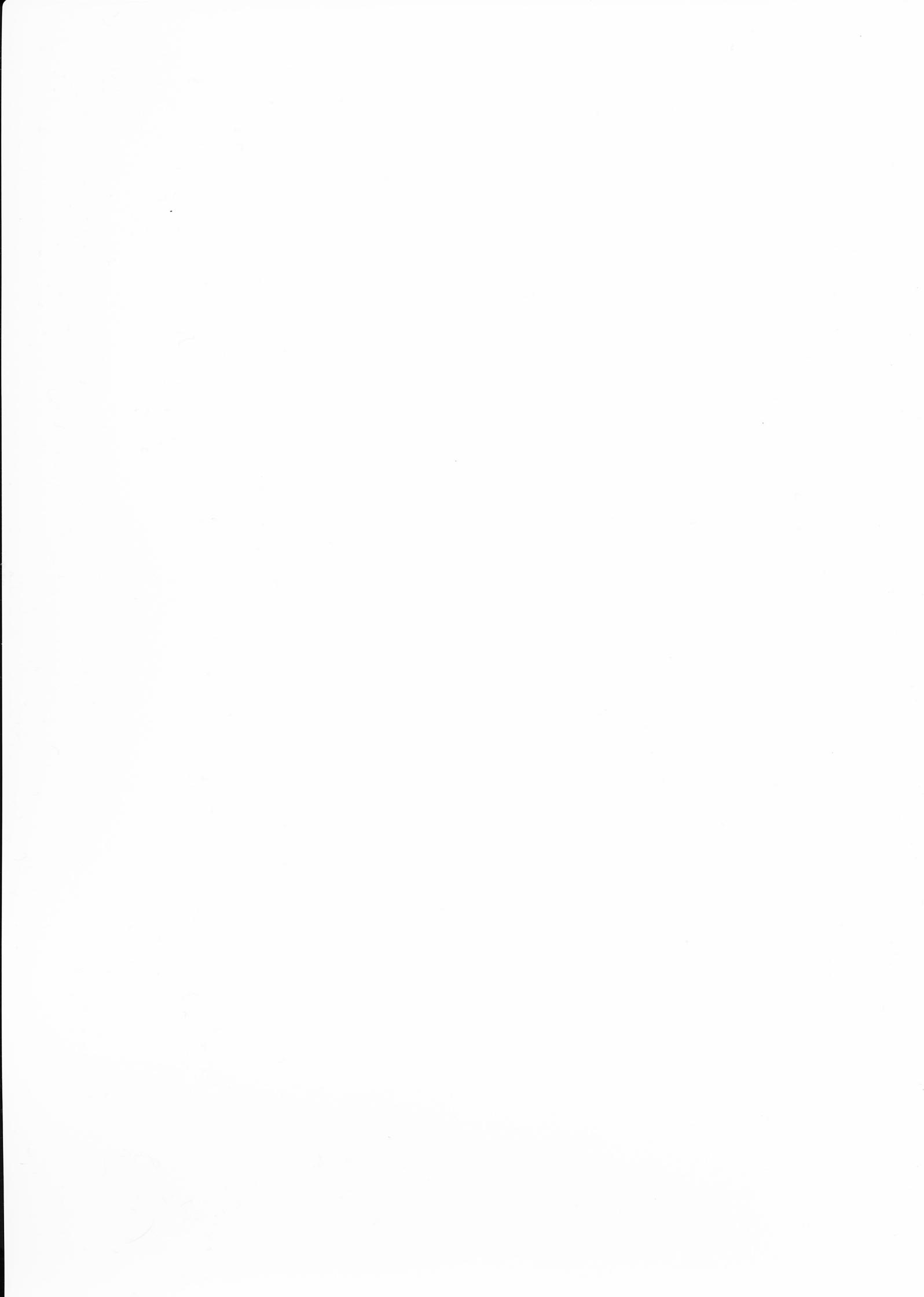


TABLE DES MATIERES

I. INTRODUCTION.	1
II. TRAITEMENT DU CONTINU DANS LE CADRE D'UN MODELE DES COUCHES.	6
II.1. Hamiltonien et espace de configurations.	7
II.1.1. Le hamiltonien.	7
II.1.2. L'espace de configurations.	7
II.2. L'équation de Schrödinger.	10
II.3. Résolution des équations.	13
II.3.1. L'étape de prédiagonalisation.	13
II.3.2. Schéma de résolution en représentation énergie.	15
II.3.3. Résolution en représentation position.	17
II.4. Le problème de l'antisymétrisation.	21
II.4.1. Orthogonalité entre états individuels liés et de diffusion.	21
II.4.2. Elimination dans un espace modèle des états $ ni\rangle$ inoccupés dans le noyau résiduel.	22
II.4.3. Importance des termes correctifs d'antisymétrisation.	26
II.5. Avantages de la description considérée pour les états à N nucléons.	28.
III. APPLICATION A LA DIFFUSION DE NEUTRONS DE BASSE ENERGIE.	33
III.1. Formulation du problème.	33
III.1.1. Diffusion à énergie nulle, "pseudo-magnétisme nucléaire".	34
III.1.2. Diffusion à énergie non nulle, théorie de la portée effective.	36
III.2. Choix du potentiel à un corps.	37
III.2.1. Détermination phénoménologique des énergies de particules indépendantes.	37
III.2.2. Les potentiels à un corps utilisés.	39

III.3 L'interaction à deux corps.	46
III.3.1. Interprétations des forces à deux corps effectives.	46
III.3.2. Paramètres de la force centrale.	46
III.3.3. Déterminations de la profondeur V_0 .	50
III.4. Nouvelles troncatures de l'espace de configurations.	51
III.4.1. Etats de la cible, prédiagonalisation.	52
III.4.2. Configurations à N nucléons.	54
IV. TRAITEMENT DE L'ANTISYMETRISATION DANS DES CAS SIMPLES.	56
IV.1. Diffusion de neutrons de basse énergie dans un modèle simple d'espace de configurations.	56
IV.2. Discussion des résultats pour les noyaux magiques.	58
IV.2.1. Résultats pour C^{12} .	58
IV.2.2. Résultats pour O^{16} .	65
IV.2.3. Résultats pour Ca^{40} .	71
IV.3. Discussion des résultats pour les noyaux de spin non nul.	73
IV.3.1. Résultats pour C^{13} .	74
IV.3.2. Résultats pour O^{17} .	79
V. ANTISYMETRISATION DANS LE CAS D'UN MELANGE DE CONFIGURATIONS.	84
V.1. Approximation obtenue en négligeant le couplage avec les états liés à N = 20 nucléons.	85
V.1.1. Résultat dans cette approximation.	85
V.1.2. Prédiction dans un modèle simple, du rôle joué par le couplage avec les états liés à N nucléons.	90
V.2. Etude du couplage avec les états liés à N nucléons.	92
V.2.1. Résolution des équations.	92
V.2.2. Résonances et discussion des résultats dans deux modèles d'espace de configurations liées à N nucléons.	99
CONCLUSION.	111

APPENDICES.

A. DIFFRACTION DE NEUTRONS THERMIQUES.	A3
A.1. Traitement général de la diffraction de neutrons thermiques.	A3
A.2. Applications, principe des mesures de B.	A8
B. GENERALITES SUR LES REPRESENTATIONS DU GROUPE DES ROTATIONS.	A11
B.1. Généralités sur les symétries.	A11
B.2. Représentations unitaires de SU(2).	A12
B.2.1. Algèbre de Lie de SU(2).	A12
B.2.2. Correspondance entre SU(2) et SO(3).	A13
B.2.3. Représentations unitaires irréductibles de SU(2).	A13
B.3. Dépendance en un choix d'axes.	A14
B.4. Grandeurs tensorielles, équivalence des représentations \mathcal{D}^j et \mathcal{D}^{j*} .	A16
B.4.1. Définition d'une grandeur tensorielle.	A16
B.4.2. Equivalence des représentations \mathcal{D}^j et \mathcal{D}^{j*} , variance.	A16
B.4.3. Applications.	A17
B.5. Grandeurs tensorielles invariantes, théorème de Wigner-Eckart.	A19
B.5.1. Théorème de Wigner-Eckart.	A19
B.5.2. Une formule de réduction du produit tensoriel.	A20
B.6. Coefficients "9j carrés", technique graphique.	A21
B.6.1. Définition et propriétés des "9j carrés".	A21
B.6.2. Technique graphique.	A22
B.6.3. Valeurs particulières de "9j carrés".	A23
C. ESPACE DE HILBERT DES ETATS A UNE PARTICULE.	A24
C.1. Espace de spineurs \mathcal{E}_s et \mathcal{E}_t .	A24
C.1.1. Espace de spin \mathcal{E}_s .	A24
C.1.2. Espace d'isospin \mathcal{E}_t .	A25
C.2. Partie spatiale, espace de Hilbert $\mathcal{E}_{\vec{r}}$.	A26

C.3. Les états de base de l'espace $\mathcal{E}^{(1)}$.	A27
C.3.1. Généralités.	A27
C.3.2. Potentiels $V(r)$ utilisés : oscillateur harmonique et Wood-Saxon.	A29
D. ETATS A N PARTICULES.	A31
D.1. Antisymétrisation, couplage et normalisation.	A31
D.1.1. Opérateur d'antisymétrisation.	A31
D.1.2. Etats antisymétrisés et couplés.	A33
D.1.3. Normalisation d'un état antisymétrisé.	A35
D.2. Construction des états à N particules du problème.	A37
D.2.1. Etats de la cible.	A37
D.2.2. Définition des "coefficients associés au c.p.f.".	A41
D.2.3. Etats de l'ensemble cible plus projectile.	A46
E. CALCUL DES ELEMENTS DE MATRICE.	A51
E.1. Décomposition en somme d'éléments de matrice à 1 et 2 corps.	A51
E.2. Calcul des éléments de matrice à 2 corps particule-particule.	A52
E.2.1. Expression en fonction des éléments de matrice directs.	A52
E.2.2. Calcul de l'élément de matrice direct particule-particule.	A53
E.3. Calcul des potentiels du problème.	A58
E.3.1. Eléments de matrice à deux corps comprenant des états $ ri\rangle$.	A59
E.3.2. Séparation des contributions coeur-coeur, coeur-externe et externe-externe.	A60
F. METHODES NUMERIQUES DE RESOLUTION DES EQUATIONS.	A63
F.1. Principe de la méthode numérique.	A63
F.2. Intégration de l'équation de Schrödinger radiale à un corps.	A63
F.2.1. Généralités.	A63
F.2.2. Etats de diffusion ($\epsilon \geq 0$).	A65
F.2.3. Etats liés.	A66

F.3. Résolution du système d'équations intégral-différentielles couplées.	A68
F.3.1. Mise sous forme matricielle $MX = Y$.	A68
F.3.2. Résolution numérique de l'équation matricielle $MX = Y$.	A69
F.3.3. Comportement asymptotique de $g(r)$ et résultats.	A71
F.3.4. Calculs numériques.	A72

REFERENCES.	R1
-------------	----

LISTE DES FIGURES ET DES TABLEAUX

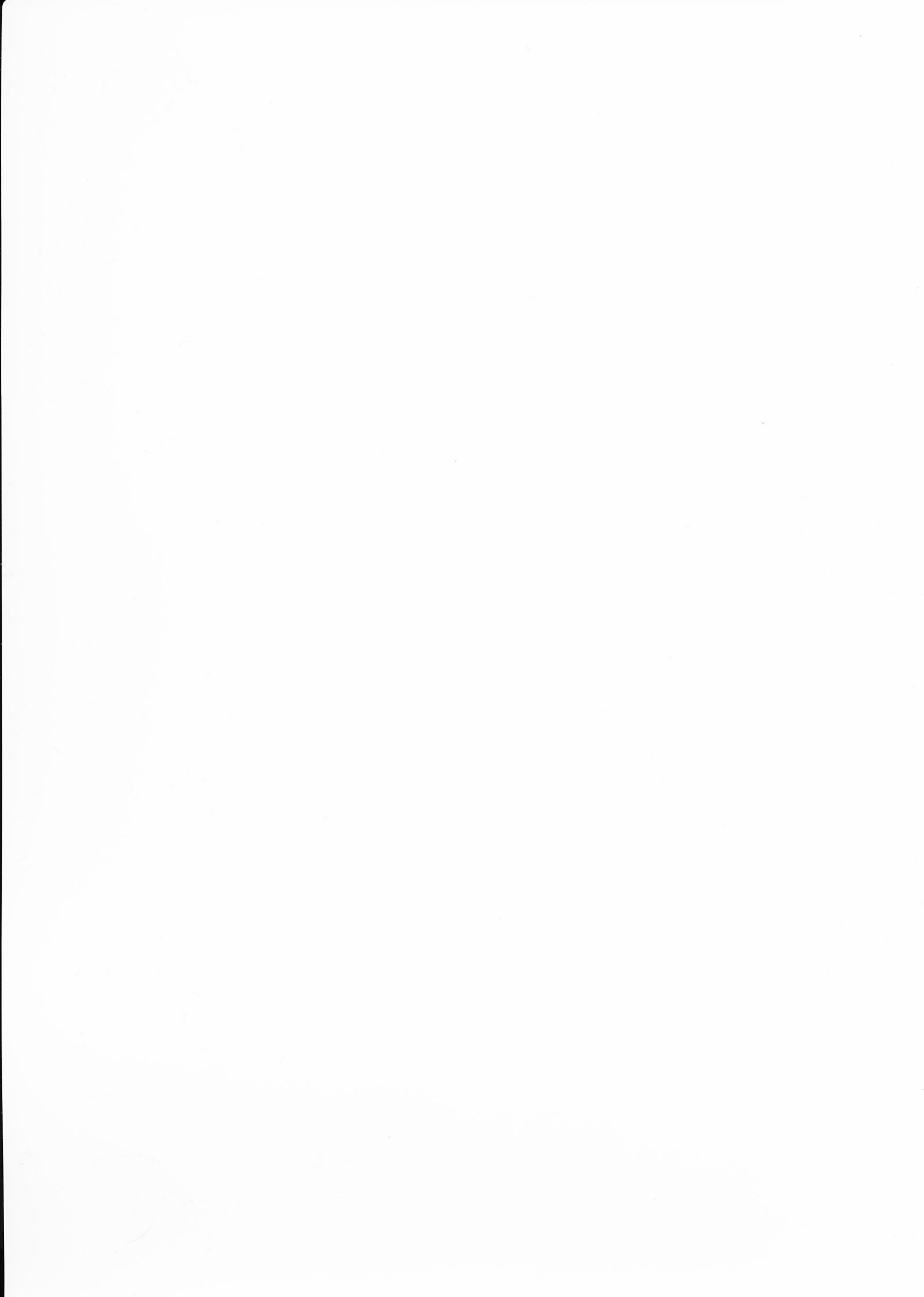
L'ensemble des résultats de ce travail est regroupé dans les figures et les tableaux dont nous donnons dès maintenant la liste.

<u>Liste des Figures:</u>	Page
1 - Spectres des différents hamiltoniens du formalisme général.	14
2 - Energies expérimentales de particules et de trous pour le C^{12} .	38
3 - Energies expérimentales de particules et de trous pour O^{16} .	38
4 - Comparaison des potentiels et des états 2s d'un oscillateur harmonique et d'un puits de Wood-Saxon.	40
5 - Energie d'excitation négative pour déterminer V_0 .	50
6 - Energie de liaison de l'état $1/2^+$ du C^{13} .	58
7 - Déphasages de l'onde s de diffusion de neutrons sur le C^{12} .	64
8 - Energie de liaison de l'état $1/2^+$ de O^{17} .	66
9 - Fonctions d'onde radiales 2s et de diffusion à énergie nulle dans le cas de O^{16} et d'un potentiel à un corps d'oscillateur harmonique.	67
10 - Fonctions d'onde radiales 2s et de diffusion à énergie nulle dans le cas de O^{16} et d'un potentiel à un corps de Wood-Saxon.	67
11 - Déphasage de l'onde s de diffusion de neutrons sur O^{16} .	70
12 - Déphasage de l'onde s de diffusion de neutrons sur le Ca^{40} .	73
13 - Energies de liaison des états 0^- et 1^- du C^{14} .	75
14 - Energies de liaison des états 2^+ et 3^+ de O^{18} .	80
15 - Spectre expérimental du F^{20} .	86
16 - Variations de la fonction $(\frac{\sin x}{x})^2$.	A7
17 - Construction de la matrice M et du second membre Y pour la résolution numérique.	A70

Liste des Tableaux:

1 - Ordres de grandeur des paramètres des neutrons thermiques.	A3
2 - Paramètres de l'oscillateur harmonique.	41
3 - Paramètres du potentiel de Wood-Saxon.	41
4 - Potentiels de Wood-Saxon pour les états à une particule du C^{12} .	43
5 - Potentiels de Wood-Saxon pour les états à une particule du C^{13} .	43
6 - Potentiels de Wood-Saxon pour les états à une particule de O^{16} .	44
7 - Potentiels de Wood-Saxon pour les états à une particule de O^{17} .	44

	Page
8 - Potentiels de Wood-Saxon pour les états à une particule du F^{19} .	45
9 - Paramètres des forces centrales à deux corps.	49
10 - Configurations antisymétrisées à deux nucléons dans la couche 2s-1d en couplage j-j .	A39
11 - Mélanges de configurations décrivant le fondamental du F^{19} .	53
12 - Profondeurs de la force à deux corps utilisées pour le C^{12} .	59
13 - Energies coulombiennes des noyaux magiques.	61
14 - C^{12} , longueur de diffusion et portée effective, avec un potentiel à un corps d'oscillateur harmonique.	62
15 - C^{12} , longueur de diffusion et portée effective avec des potentiels à un corps de Wood-Saxon.	63
16 - C^{12} , déphasages de l'onde s .	64
17 - Profondeurs de la force à deux corps utilisées pour O^{16} .	66
18 - O^{16} , longueur de diffusion et portée effective avec un potentiel à un corps d'oscillateur harmonique.	68
19 - O^{16} , longueur de diffusion et portée effective avec des potentiels à un corps de Wood-Saxon.	69
20 - O^{16} , déphasage de l'onde s .	70
21 - Ca^{40} , longueur de diffusion et portée effective avec un potentiel à un corps d'oscillateur harmonique.	72
22 - C^{13} , longueurs de diffusion et portées effectives avec un potentiel à un corps d'oscillateur harmonique.	76
23 - C^{13} et O^{17} , longueurs de diffusion et portées effectives avec des potentiels à un corps de Wood-Saxon.	77
24 - Eléments de matrice de l'interaction résiduelle pour le C^{14} .	79
25 - O^{17} , longueurs de diffusion et portées effectives avec un potentiel à un corps d'oscillateur harmonique.	81
26 - Eléments de matrice de l'interaction résiduelle pour O^{18} .	83
27 - F^{19} , longueurs de diffusion et portées effectives avec un potentiel à un corps d'oscillateur harmonique.	87
28 - F^{19} , longueurs de diffusion et portées effectives avec un potentiel à un corps de Wood-Saxon.	89
29 - Norme n de la configuration $ (F^{19}, 2s1/2)J, T=1\rangle$.	91
30 - Configurations antisymétrisées à quatre nucléons en couplage j-j dans la couche 2s-1d, couplées à $J=0, T=1$.	93
31 - Configurations antisymétrisées à quatre nucléons en couplage j-j dans la couche 2s-1d, couplées à $J=1, T=1$.	94
32 - Energie de liaison nucléaire de la configuration $ (F^{19}, 2s1/2)J, T=1\rangle_n$.	98
33 - F^{19} , longueurs de diffusion en introduisant le couplage avec les états à 20 nucléons liés, force de Serber.	102
34 - F^{19} , longueurs de diffusion en introduisant le couplage avec les états à 20 nucléons liés, force I.G.E. 1 .	104
35 - Composantes de l'état quasi-lié dans les voies $J=0$ et $J=1$, en utilisant la force de Serber.	106
36 - Composantes de l'état quasi-lié dans les voies $J=0$ et $J=1$, en utilisant la force de I.G.E. 1 .	108



DESCRIPTION MICROSCOPIQUE DE LA DIFFUSION
DE NEUTRONS DE BASSE ENERGIE PAR LES NOYAUX

Chapitre I

INTRODUCTION

La diffusion d'un rayonnement sur une structure périodique de centres diffuseurs donne lieu au phénomène de diffraction.

De même que celle de rayons X, la diffraction de neutrons thermiques a permis de résoudre de nombreux problèmes de structure cristalline. Le caractère complémentaire de ces deux techniques est lié à la nature différente des interactions mises en jeu. Les rayons X sont diffusés par les électrons de l'atome, les neutrons le sont également par les nucléons du noyau. En raison de l'existence d'un moment magnétique pour le neutron, l'amplitude de diffusion présente à la fois un terme de couplage avec le moment magnétique atomique du cortège électronique et un terme de couplage avec le spin du noyau. Ce dernier terme d'interaction nucléaire peut être interprété de façon semblable à celui d'interaction magnétique en introduisant un "pseudo-moment magnétique nucléaire" (A. Abragam^[1]).

La diffusion des neutrons thermiques s'est révélée une technique de choix pour l'étude du magnétisme à l'échelle de l'atome. La production récente de structures antiferromagnétiques-nucléaires^[2], a donné aux physiciens du solide l'espoir que la même technique pourrait être utilisée pour l'étude du magnétisme à l'échelle du noyau.

La diffusion de neutrons thermiques sur un noyau de spin I non nul, a lieu dans les deux voies de réaction $J = I \pm 1/2$ correspondant aux longueurs de diffusion b_{\pm} , que l'on écrit sous la forme :

$$b_{\pm} = A + B(\vec{I} \cdot \vec{\Delta})_{\pm} \quad . \quad (I-1)$$

La question posée aux physiciens nucléaires est la suivante : quels sont les noyaux pour lesquels la différence $b_+ - b_-$ des longueurs de diffusion est suffisamment grande en valeur absolue, pour permettre des observations de structures magnétiques nucléaires ordonnées ?

Seule la longueur de diffusion cohérente A :

$$A = \frac{I}{2I+1} b_- + \frac{I+1}{2I+1} b_+ , \quad (I-2)$$

est bien connue expérimentalement pour la plupart des noyaux^[3]. Par contre, la valeur de $b_+ - b_-$, reliée à B par

$$B = \frac{2}{2I+1} (b_+ - b_-) , \quad (I-3)$$

n'a été mesurée à ce jour, que pour un petit nombre d'entre eux^[4,5,6,7].

On montre dans l'appendice A comment s'effectue la détermination des paramètres A et B, par diffusion de neutrons sur un réseau.

Nous avons abordé le problème théorique de la détermination de ces longueurs de diffusion de façon microscopique, essentiellement pour deux raisons :

- 1- la quantité d'information que l'on cherche à obtenir étant réduite, un modèle simple, type potentiel optique, ne serait qu'une paramétrisation des résultats ;
- 2- à basse énergie, l'antisymétrisation complète de l'ensemble cible plus neutron incident joue un rôle important dont il faut tenir compte.

Notre travail portera particulièrement sur l'étude de ce problème de l'antisymétrisation dans un modèle microscopique.

Le formalisme que nous présentons au chapitre II, a été introduit par V. Gillet et C. Bloch^[8] pour décrire les réactions du type nucléon-noyau et développé par C. Bloch à l'Ecole d'Eté de Varenna (1965)^[9].

La méthode repose sur un choix particulier d'espace de configurations restreint et constitue une extension directe du modèle des couches aux états ayant une particule dans le continu. Le hamiltonien H du problème à N nucléons est ainsi décomposé en un hamiltonien H_0 de particules indépendantes et une interaction résiduelle. L'espace de configurations restreint considéré est engendré par les états de particules indépendantes antisymétrisés, états propres du hamiltonien H_0 et comprenant au plus un nucléon non lié. En principe la méthode ne nécessite

aucune autre approximation. L'antisymétrisation complète des états à N nucléons est introduite dès le début et sera rigoureusement conservée tout au long des calculs ; par suite, les termes d'échange des collisions sont traités exactement.

En écrivant l'équation de Schrödinger dans la base propre de H_0 sur l'espace de configurations restreint, on obtient un ensemble d'équations couplées. Celles-ci peuvent être résolues en représentation énergie ou en représentation position. C'est cette dernière méthode que nous utilisons car le caractère à courte portée des interactions nucléaires justifie la troncature du domaine de variation de r (distance cible-nucléon) à une valeur finie, grande par rapport aux portées caractéristiques des potentiels. De plus, en représentation position, le rôle joué par le principe de Pauli apparaît explicitement dans les équations, en particulier sous forme de termes correctifs d'antisymétrisation. Ces termes assurent l'orthogonalité entre les états individuels de diffusion cherchés et les états liés à une particule du potentiel à un corps.

Ce formalisme est appliqué à l'étude de la diffusion de neutrons de basse énergie par les noyaux suivants : C^{12} , C^{13} , O^{16} , O^{17} , F^{19} et Ca^{40} .

La diffusion dans l'onde s est seule introduite, ce qui est justifié pour des neutrons thermiques dont l'énergie est de l'ordre du centième d'électron-volt.

Nous négligeons les excitations de la cible par le neutron incident en nous limitant aux voies de réaction définies par le fondamental de la cible. Néanmoins, le couplage avec certaines voies de réaction fermées, correspondant à des états excités de la cible, est introduit en approchant la configuration à N nucléons décrivant chacune de ces voies par un état quasi-lié formé par une combinaison linéaire d'états liés de particules indépendantes. On néglige donc les composantes dans le continu de ces voies de réaction fermées.

Nous définissons au chapitre III, le hamiltonien et les espaces de configurations considérés pour chacun des noyaux étudiés.

Dans le cas des noyaux magiques C^{12} , O^{16} et Ca^{40} , ainsi que pour les noyaux voisins C^{13} et O^{17} , qui sont bien décrits en première approximation par un état unique de particules indépendantes, le problème est traité au chapitre IV, dans un modèle simple d'espace de configurations restreint. Celui-ci est limité à l'état fondamental de la cible ($N-1$ nucléons) plus un neutron dans le continu et au seul état lié à N nucléons obtenu par antisymétrisation du

fondamental de la cible avec l'état à une particule s, lié et inoccupé.

Le problème d'antisymétrisation dans le cas d'un mélange de configurations est étudié au chapitre V pour le F^{19} . Le fondamental de ce noyau est décrit par un mélange de configurations dans la couche 2s-1d, obtenu par diagonalisation de l'hamiltonien complet dans le sous-espace des états à 19 nucléons liés.

Nous étudions deux modèles d'espace de configurations pour les états quasi-liés à $N=20$ nucléons, qui constituent deux approximations pour le couplage avec des voies fermées correspondant à des états excités du F^{19} plus un neutron lié.

Le hamiltonien H_0 de particules indépendantes est introduit phénoménologiquement en utilisant d'une part les énergies expérimentales de particule et de trou, et d'autre part des fonctions d'onde radiales d'oscillateur harmonique et de Wood-Saxon.

Nous considérons une force à deux corps effective centrale. Afin de discuter le rôle du caractère d'échange des forces, nous utilisons plusieurs interactions.

Pour chaque noyau étudié, on détermine la longueur de diffusion et la portée effective correspondant aux voies de réaction considérées. Dans le cas des noyaux magiques C^{12} , O^{16} et Ca^{40} , on compare les déphasages de l'onde s à basse énergie, obtenus en résolvant les équations de diffusion, avec ceux donnés par l'approximation de la portée effective.

Les résultats présentés au chapitre IV pour les noyaux magiques et voisins, sont en accord satisfaisant avec les valeurs expérimentales des longueurs de diffusion cohérente et des déphasages.

On prédit une valeur du paramètre B, inconnu expérimentalement, pour les noyaux C^{13} et O^{17} .

Les corrections d'antisymétrisation avec l'état 1s sont de l'ordre de 10 à 15% sur la valeur des longueurs de diffusion, elles sont faibles sur les déphasages de l'onde s. Dans le cas du Ca^{40} , la correction d'antisymétrisation avec l'état 2s occupé est importante, aussi bien sur la longueur de diffusion que sur le déphasage.

Les résultats obtenus sont peu sensibles aux valeurs relatives des paramètres de mélange des forces à deux corps considérées, lorsque la profondeur de celles-ci est ajustée pour obtenir la longueur de diffusion cohérente expérimentale. La valeur de cette profondeur est la même pour les noyaux voisins C^{12} et C^{13}

d'une part, 0^{16} et 0^{17} d'autre part. De plus elle est très proche de la profondeur qui reproduit dans le formalisme utilisé, l'état lié à N nucléons identifié à un état excité du noyau cible plus un neutron lié.

Les résultats obtenus dans le cas d'un mélange de configurations pour le F^{19} , sont présentés au chapitre V. L'état $2s$ n'étant présent que dans certaines composantes décrivant le fondamental de ce noyau, pour traiter correctement l'antisymétrisation, nous devons introduire le couplage entre l'unique voie de réaction considérée, définie par le fondamental du F^{19} , et certains états à 20 nucléons liés. Ces derniers correspondent à une description des voies fermées, dont on néglige le continu en les approchant par des états quasi-liés. L'introduction de ces états constitue une description modèle du très grand nombre d'états excités du F^{20} d'énergie voisine de celle du fondamental du F^{19} plus un neutron à l'infini. Parmi ces niveaux, on a entre autres identifié expérimentalement des états de mêmes nombres quantiques 0^+ et 1^+ que ceux des voies considérées, et dont l'énergie rapportée au seuil de réaction est inférieure à 0.3 keV.

Nous comparons les résultats obtenus pour chacune des approximations suivantes:

- 1- en négligeant tous les termes correctifs d'antisymétrisation avec les états s liés,
- 2- en ne tenant compte que du terme correctif d'antisymétrisation avec l'état $1s$,
- 3- en tenant compte des termes correctifs d'antisymétrisation avec les états $1s$ et $2s$, comme si ce dernier était totalement occupé dans la cible,
- 4- enfin, en introduisant le couplage avec les états modèles à 20 nucléons liés.

Les résultats sont très sensibles à ces corrections, en particulier le paramètre B , égal à $b_+ - b_-$, change de signe suivant les états quasi-liés considérés.

Des effets de résonance sont observés chaque fois que, dans le sous-espace des états liés, un état propre du hamiltonien complet a une faible énergie rapportée au fondamental de la cible plus un neutron à l'infini.

Nous avons développé la théorie du modèle des couches étendue aux états à un nucléon dans le continu, sous la forme qui nous a paru la mieux adaptée aux calculs numériques. Nous avons donné en appendices les détails nécessaires à la réalisation des calculs.

CHAPITRE II

TRAITEMENT DU CONTINU DANS LE CADRE

D'UN MODELE DES COUCHES

Le formalisme que nous présentons a été développé en représentation énergie, par C. Bloch à l'Ecole d'Eté de Varenna (1965) [9].

Différents aspects théoriques de ce modèle sont regroupés dans la monographie de C. Mahaux et Hans A. Weidenmuller "Shell model approach to nuclear reactions", [10] où l'on trouvera également de nombreuses références relatives à des travaux effectués dans le cadre de ce formalisme.

II.1. HAMILTONIEN ET ESPACE DE CONFIGURATIONS.

II.1.1. Le hamiltonien.

Nous supposons que les degrés de liberté associés aux champs mésiques dans les noyaux peuvent être remplacés par des potentiels entre les nucléons, ces potentiels comportant éventuellement des forces d'échange. Le hamiltonien nucléaire modèle s'écrit donc :

$$H = T + V \quad , \quad (II-1)$$

où T est l'opérateur à un corps d'énergie cinétique,

$$T = \sum_{i=1}^N t_i \quad , \quad (II-2)$$

et V l'opérateur d'interaction entre nucléons. Par la suite, nous supposerons les forces à deux corps prépondérantes, mais cette hypothèse n'est pas nécessaire ici.

Suivant la méthode habituelle, séparons H en un hamiltonien non perturbé H_0 de particules indépendantes et une interaction résiduelle \mathcal{V} :

$$H = H_0 + \mathcal{V} \quad \left\{ \begin{array}{l} H_0 = T + V^{(1)} \\ \mathcal{V} = V - V^{(1)} \end{array} \right. \quad , \quad (II-3)$$

où $V^{(1)} = \sum_{i=1}^N v_i$ est un potentiel à un corps a priori arbitraire. Cependant, la troncature de l'espace de configurations (II.1.2) qui définira notre modèle sera faite en fonction des états de particules indépendantes propres de H_0 . Par suite, $V^{(1)}$ devra être choisi très proche d'un champ moyen décrivant, à l'approximation d'un modèle de particules indépendantes, les états liés du noyau considéré.

Les potentiels à un corps que nous utiliserons sont (C.3.2) celui de l'oscillateur harmonique isotrope et un potentiel de Wood-Saxon avec terme spin-orbite.

II.1.2. L'espace de configurations

Les états propres du hamiltonien $h = t + v$ forment une base complète orthonormée de l'espace de Hilbert $\mathcal{E}^{(1)}$ des états à une particule (Appendice C).

Lorsque, pour les grandes distances, le potentiel à un corps tend vers une valeur finie, que l'on prendra égale à zéro, le spectre

de h présente une partie discrète correspondant aux états liés $|n i\rangle$ d'énergie ϵ_{ni} négative et une partie continue correspondant aux états de diffusion $|\epsilon i\rangle$ d'énergie ϵ positive ou nulle. Nous désignerons par i l'ensemble des nombres quantiques supplémentaires nécessaires pour définir un état, cf. (C-25) $i \equiv \ell, s, j, m_j, t, m_t$.

Les relations de fermeture et d'orthogonalité s'écrivent respectivement :

$$\sum_{ni} |ni\rangle \langle ni| + \sum_i \int d\epsilon |\epsilon i\rangle \langle \epsilon i| = \mathbb{1}, \quad (\text{II-4})$$

$$\begin{aligned} \langle ni | n' i' \rangle &= \delta_{nn'} \delta_{ii'}, & \langle ni | \epsilon i' \rangle &= 0, \\ \langle \epsilon i | \epsilon' i' \rangle &= \delta(\epsilon - \epsilon') \delta_{ii'}. \end{aligned} \quad (\text{II-5})$$

Si le potentiel régulier v n'est pas borné pour les grandes distances, le spectre de h est entièrement discret et les états propres $|n i\rangle$ sont liés c'est à dire caractérisés par une fonction d'onde ayant un comportement exponentiellement décroissant à l'infini. Cependant, donnant un sens nouveau au mot "lié", défini phénoménologiquement en (III.2.2a), on sépare encore le spectre en états liés et états non liés. La relation de fermeture prend alors une forme analogue à (II-4) :

$$\sum_{ni} |ni\rangle \langle ni| = \underbrace{\sum_{ni} |ni\rangle \langle ni|}_{\text{"liés"}} + \underbrace{\sum_{ni} |ni\rangle \langle ni|}_{\text{"non liés"}} = \mathbb{1}. \quad (\text{II-6})$$

Par produit tensoriel antisymétrisé de ces états on construit une base complète orthonormalisée de l'espace des états physiques à N nucléons, $\mathcal{E}^{(N)}$ (D.1). Les fonctions d'onde correspondantes sont les déterminants de Slater construits avec les fonctions d'onde à une particule.

Ces états propres de H_0 peuvent être classés suivant leur nombre d'états à une particule liés dans h (le mot "lié" ayant le sens précédemment défini pour un potentiel v non borné).

La méthode que nous exposons consiste à restreindre l'espace de configurations $\mathcal{E}^{(N)}$ au sous-espace engendré par les états de particules indépendantes comprenant au plus un nucléon non lié dans v . L'espace de configurations restreint est donc la somme directe de deux sous-espaces 1 et 2, le premier correspondant aux états à N nucléons liés et le second aux états à $N-1$ nucléons liés et un non lié. Nous dénotons ces états ainsi que leur énergie non perturbée par :

$$1- \quad |n_1 i_1, \dots, n_N i_N \rangle_n = |\tilde{\alpha} \rangle_n \quad H_0 |\tilde{\alpha} \rangle_n = E_\alpha |\tilde{\alpha} \rangle_n \quad (\text{II-7a})$$

$$2- \quad |n_1 i_1, \dots, n_{N-1} i_{N-1}; \epsilon i \rangle_n = |\beta_\epsilon; \tilde{\epsilon} i \rangle_n = |\beta \tilde{\epsilon} \rangle_n, \quad (\text{II-7b})$$

où β représente à la fois les nombres quantiques β_ρ des nucléons liés et i de l'état non lié.

Le symbole \sim indique que ces états sont totalement antisymétrisés (D-8). Les configurations du sous-espace 2, ayant dans le cas d'un potentiel borné, une particule dans le continu, ne sont pas normalisables. Cependant, la présence de l'indice n traduit le fait que ces états $|\beta\epsilon\rangle_n$ sont définis (D-60) comme ceux, $|\tilde{\alpha}\rangle_n$, du sous-espace 1, avec le facteur de comptage $1/\sqrt{N!}$ (D-31). L'état le plus général de l'espace de configurations restreint ainsi défini est donc la somme de deux composantes appartenant respectivement aux espaces 1 et 2 :

$$|\tilde{\Psi}\rangle = |\tilde{1}\rangle + |\tilde{2}\rangle = \sum_{\alpha} a_{\alpha} |\tilde{\alpha}\rangle_n + \sum_{\beta} \int d\epsilon a_{\beta}(\epsilon) |\beta\tilde{\epsilon}\rangle_n. \quad (\text{II-8})$$

Le choix de normalisation précédent des états $|\tilde{\alpha}\rangle_n$ et $|\beta\tilde{\epsilon}\rangle_n$, définit l'ensemble des composantes (a_{α} , $a_{\beta}(\epsilon)$) à un facteur multiplicatif global près.

Dans ce qui suit, nous développerons le formalisme avec un état $|\tilde{\Psi}\rangle$ du type (II-8) correspondant au cas d'un potentiel ν borné. La transposition au cas d'un potentiel non borné se fait en remplaçant l'intégrale sur ϵ par une somme sur l'indice discret n associé à des états à une particule définis comme non liés dans ν .

La troncature de l'espace de configurations définit notre modèle, cela amène les remarques suivantes :

Cette troncature est caractéristique de tous les modèles des couches. Les résultats obtenus pour les états liés, en ne gardant que les premiers états excités de H_0 , sont souvent très bons^[11]. La troncature que nous effectuons est de même nature, de plus les premiers états excités de H_0 appartiennent aux sous-espaces 1 et 2.

Cependant, cette troncature ne sera justifiée que si l'interaction résiduelle \mathcal{V} est suffisamment faible pour que l'on puisse considérer les premiers états excités de H comme des combinaisons linéaires des premiers états excités de H_0 .

Cette interaction résiduelle dépend du choix du potentiel à un corps $V^{(1)}$. Le fait que certains premiers états excités de H soient des mélanges de configurations ayant des composantes importantes sur des états propres de H_0 d'énergie élevée, montre que cette interaction résiduelle ne peut être rendue arbitrairement petite.

On peut tenir compte partiellement des configurations omises en remplaçant l'interaction résiduelle \mathcal{V} par une interaction effective^[12].

La nature même du modèle limite son application à l'étude des réactions nucléon-noyau du type (γ, p) , (γ, n) élastique ou inélastique avec éventuellement échange de charge.

Le hamiltonien H est invariant par translation alors que H_0 ne l'est pas. La troncature de l'espace étant définie en terme des états propres de H_0 , le modèle considéré brise cette invariance par translation. Dans le calcul des états liés cela introduit des états spurieux que l'on peut éliminer dans le cas d'un potentiel à un corps d'oscillateur harmonique. Cependant, il n'existe pas de méthode analogue pour les états de diffusion.

Pour la même raison, l'effet de recul n'est pas traité correctement. Cet effet pourra être négligé à basse énergie et pour un noyau cible suffisamment lourd.

II.2. L'EQUATION DE SCHRÖDINGER.

L'équation de Schrödinger indépendante du temps :

$$H |\tilde{\Psi}\rangle = E |\tilde{\Psi}\rangle \quad , \quad (\text{II-9})$$

sur l'espace de configurations restreint défini ci-dessus, s'écrit sous la forme de deux systèmes d'équations couplées :

$$\begin{cases} (H^{11} - E) |\tilde{1}\rangle + H^{12} |\tilde{2}\rangle = 0 & (\text{II-10a}) \\ H^{21} |\tilde{1}\rangle + (H^{22} - E) |\tilde{2}\rangle = 0 & (\text{II-10b}) \end{cases} \quad ,$$

obtenus par projection sur les sous-espaces orthogonaux 1 et 2. L'opérateur hamiltonien a été séparé en quatre parties notées matriciellement avec les indices des espaces 1 et 2

$$H = \begin{array}{c|c} H^{11} & H^{12} \\ \hline H^{21} & H^{22} \end{array} \quad (\text{II-11})$$

La même décomposition permet d'écrire le potentiel résiduel $\mathcal{V} = \mathcal{V} - \mathcal{V}^{(1)}$ sous la forme

$$\mathcal{V} = \begin{array}{c|c} \mathcal{V}^{11} & \mathcal{V}^{12} \\ \hline \mathcal{V}^{21} & \mathcal{V}^{22} \end{array} \quad (II-12)$$

Les éléments de matrice de \mathcal{V}^{11} , ${}_n \langle \tilde{\alpha} | \mathcal{V} | \tilde{\alpha}' \rangle_n$, sont des constantes dépendant des indices discrets α et α' . Ceux de \mathcal{V}^{12} et \mathcal{V}^{21} , ${}_n \langle \tilde{\alpha} | \mathcal{V} | \tilde{\beta}\epsilon \rangle_n$ et ${}_n \langle \tilde{\beta}\epsilon | \mathcal{V} | \tilde{\alpha} \rangle_n$ respectivement, sont des fonctions de ϵ dépendant des indices discrets α et β .

Les éléments de matrice de \mathcal{V}^{22} nécessitent une attention particulière; suivant (D-25) ils s'écrivent :

$${}_n \langle \tilde{\beta}\epsilon | \mathcal{V} | \tilde{\beta}'\epsilon' \rangle_n = {}_n \langle \beta_\ell(1, \dots, N-1) | \epsilon i(N) | \mathcal{V} \mathcal{A}(N-1, 1) | \beta'_\ell(1, \dots, N-1) \rangle | \epsilon' i'(N) \rangle \quad (II-13)$$

Pour un opérateur \mathcal{V} à p corps, \mathcal{V} est de la forme :

$$\mathcal{V} = \frac{1}{p!} \sum_{i_1 \neq i_p, 1}^N \mathcal{V}_{i_1 \dots i_p} = \sum_{i_1 < \dots < i_p, 1}^N \mathcal{V}_{i_1 \dots i_p} \quad (II-14)$$

où l'on suppose $\mathcal{V}_{i_1, \dots, i_p}$ invariant par substitution sur les indices i_j .

Les termes de l'élément de matrice (II-13) correspondant à la substitution identité de l'opérateur $\mathcal{A}(N-1, 1)$ et aux interactions $\mathcal{V}_{i_1, \dots, i_p}$ telles que i_p soit différent de N , donnent des contributions contenant une fonction δ sur les énergies, soit :

$${}_n \langle \tilde{\beta}_\ell | \mathcal{V}_\ell | \tilde{\beta}'_\ell \rangle_n \langle \epsilon i | \epsilon' i' \rangle = \delta(\epsilon - \epsilon') \delta_{i, i'} {}_n \langle \tilde{\beta}_\ell | \mathcal{V}_\ell | \tilde{\beta}'_\ell \rangle_n \quad (II-15)$$

Le potentiel \mathcal{V}_ℓ désigne la restriction de \mathcal{V} au sous-espace des états à $N-1$ nucléons liés dans \mathcal{V} .

Tous les autres termes de (II-13) sont des fonctions continues de ϵ et ϵ' . Ainsi, les éléments de matrice de \mathcal{V}^{22} se séparent en deux parties :

$${}_n \langle \tilde{\beta}\epsilon | \mathcal{V} | \tilde{\beta}'\epsilon' \rangle_n = \delta(\epsilon - \epsilon') \delta_{i, i'} {}_n \langle \tilde{\beta}_\ell | \mathcal{V}_\ell | \tilde{\beta}'_\ell \rangle_n + {}_n \langle \tilde{\beta}\epsilon | \mathcal{V}_d | \tilde{\beta}'\epsilon' \rangle_n \quad (II-16)$$

Le premier terme \mathcal{V}_ℓ , correspond à l'interaction entre les $N-1$ nucléons du noyau résiduel, la particule non liée étant spectatrice. Le deuxième terme \mathcal{V}_d est associé aux échanges ou aux interactions entre la particule non liée et les particules liées dans h .

En introduisant l'expression (II-16) de v^{22} dans les équations (II-10) et projetant sur toutes les configurations non perturbées (II-7), nous obtenons le système d'équations couplées suivant :

$$\left\{ \begin{array}{l} (E_{\alpha} - E) a_{\alpha} + \sum_{\alpha'} \langle \tilde{\alpha} | \mathcal{V} | \tilde{\alpha}' \rangle_n a_{\alpha'} + \sum_{\beta'} \int dE' \langle \tilde{\alpha} | \mathcal{V} | \tilde{\beta}' E' \rangle_n a_{\beta'}(E') = 0 \quad (\text{II-17a}) \\ \sum_{\alpha'} \langle \tilde{\beta} E | \mathcal{V} | \tilde{\alpha}' \rangle_n a_{\alpha'} + (E_{\beta} + E - E) a_{\beta}(E) \\ + \sum_{\beta'} \langle \tilde{\beta} E | \mathcal{V} | \tilde{\beta}' \rangle_n \delta_{ii'} a_{\beta'}(E) + \sum_{\beta'} \int dE' \langle \tilde{\beta} E | \mathcal{V} | \tilde{\beta}' E' \rangle_n a_{\beta'}(E') = 0 \quad (\text{II-17b}) \end{array} \right.$$

Si nous ajoutons les conditions aux limites qui déterminent les combinaisons linéaires de solutions indépendantes que l'on doit considérer pour un problème donné, ces équations contiennent toutes les informations permettant en principe de résoudre ce problème.

II.3. RESOLUTION DES EQUATIONS.

II.3.1. L'étape de prédiagonalisation.

Les amplitudes $a_{\beta}(\epsilon)$ présentent des singularités qui déterminent le comportement asymptotique aux grandes distances de la fonction d'onde associée à $|\tilde{\Psi}\rangle$ et par suite la matrice S et les sections efficaces.

Nous vérifierons que le dernier terme des équations (II-17b), tout comme le premier est régulier en ϵ et reste fini quelles que soient les singularités. Eliminant ces termes de (II-17b), nous obtenons le système d'équations :

$$(E_{\beta_e} + \epsilon - E) a_{\beta}(\epsilon) + \sum_{\beta'_e} \langle \tilde{\beta}_e | V_e | \tilde{\beta}'_e \rangle_n \delta_{i,i'} a_{\beta'_e}(\epsilon) = 0 \quad (\text{II-18})$$

Les singularités de $a_{\beta}(\epsilon)$ sont donc en $\epsilon = E - E_{\gamma_e}$ où E_{γ_e} est valeur propre du système d'équations :

$$(E_{\beta_e} - E_{\gamma_e}) u_{\gamma_e}^{\beta_e} + \sum_{\beta'_e} \langle \tilde{\beta}_e | V_e | \tilde{\beta}'_e \rangle_n u_{\gamma_e}^{\beta'_e} = 0 \quad (\text{II-19})$$

C'est l'équation de Schrödinger pour les $N-1$ nucléons du noyau résiduel dans le sous-espace de configurations engendré par les états de particules indépendantes où tous les nucléons sont liés dans ν . La résolution de ce problème séculaire, identique aux diagonalisations de l'interaction résiduelle dans le modèle des couches, donne le spectre (E_{γ_e}) des états liés à $N-1$ nucléons dans l'approximation définie ci-dessus.

Les états propres normalisés correspondants :

$$|\tilde{\gamma}_e \rangle_n = \sum_{\beta_e} u_{\gamma_e}^{\beta_e} |\tilde{\beta}_e \rangle_n, \quad H |\tilde{\gamma}_e \rangle_n = E_{\gamma_e} |\tilde{\gamma}_e \rangle_n, \quad (\text{II-20})$$

où les composantes $u_{\gamma_e}^{\beta_e}$ satisfont :

$$\sum_{\beta_e} u_{\gamma_e}^{\beta_e *} u_{\gamma'_e}^{\beta_e} = \delta_{\gamma_e \gamma'_e}, \quad (\text{II-21})$$

forment une base complète orthomormalisée du sous-espace engendré par les états de particules indépendantes $|\tilde{\beta}_\rho\rangle_n$.

Les configurations $|\tilde{\gamma}_\rho\rangle_n$ ne sont pas nécessairement des états de particules indépendantes mais des combinaisons linéaires de tels états. En particulier, pour un hamiltonien H invariant par rotation dans les espaces de spin et d'isospin, les états $|\tilde{\gamma}_\rho\rangle_n$ seront couplés en spin et isospin.

L'ensemble des configurations $|\tilde{\gamma}_\rho\rangle_n$, obtenues en antisymétrisant et normalisant par le facteur de comptage $1/\sqrt{N}$ (D-60) les états propres à $N-1$ nucléons liés $|\tilde{\gamma}_\rho\rangle_n$ et les états individuels non liés $|\varepsilon i\rangle$:

$$|\tilde{\gamma}_\rho \varepsilon \rangle_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \mathcal{A}(N-1, 1) |\tilde{\gamma}_\rho(1, \dots, N-1)\rangle_n |\varepsilon i(N)\rangle, \quad (\text{II-22})$$

forment une nouvelle base du sous-espace 2.

L'ensemble des nombres quantiques γ (γ_ρ pour le noyau résiduel et i pour la particule non liée) définit une voie de réaction.

Sur cette nouvelle base le système d'équations (II-17) s'écrit :

$$\begin{cases} (E_\alpha - E) a_\alpha + \sum_{\alpha'} \langle \tilde{\alpha} | V | \tilde{\alpha}' \rangle_n a_{\alpha'} + \sum_{\gamma'} \int dE' \langle \tilde{\alpha} | V | \tilde{\gamma}' \varepsilon' \rangle_n a_{\gamma', (E')} = 0 & (\text{II-23a}) \\ \sum_{\alpha'} \langle \tilde{\gamma} \varepsilon | V | \tilde{\alpha}' \rangle_n a_{\alpha'} + (E_\gamma + E - E) a_{\gamma, (E)} + \sum_{\gamma'} \int dE' \langle \tilde{\gamma} \varepsilon | V | \tilde{\gamma}' \varepsilon' \rangle_n a_{\gamma', (E')} = 0 & (\text{II-23b}) \end{cases}$$

Avant d'aborder la résolution de ce système d'équations, résumons les propriétés des hamiltoniens partiels que nous avons introduit (Fig. 1) sur l'espace de configurations restreint défini en (II.1.2) :

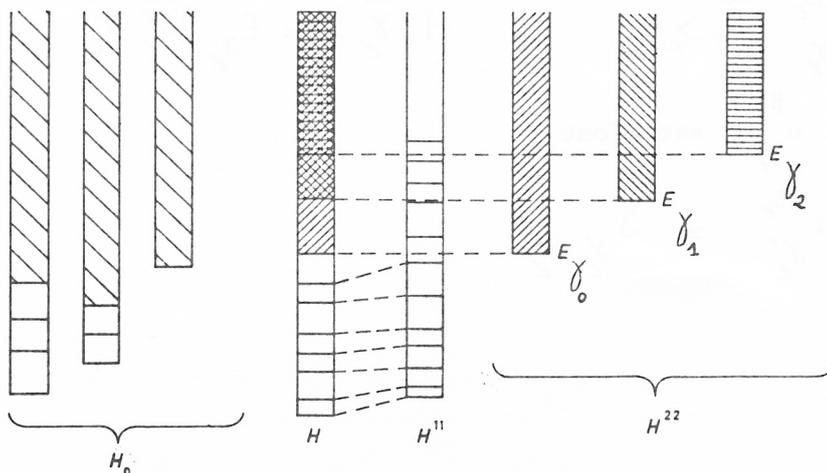


Figure 1 : Spectre des différents hamiltoniens partiels [9].

1- Le spectre du hamiltonien non perturbé H_0 est une superposition de spectres présentant tous une partie continue correspondant à la valeur propre de la particule non liée.

2- Le spectre du hamiltonien exact présente une partie discrète et une partie continue. Cette dernière est une superposition de différents spectres continus commençant chacun aux énergies E_{γ_ℓ} du noyau résiduel à N-1 nucléons obtenu en isolant un nucléon.

3- La restriction H^{11} du hamiltonien H à l'espace 1, a un spectre entièrement discret. Les valeurs propres les plus basses sont en principe peu différentes de celles du hamiltonien exact car l'effet du couplage (par H^{12} et H^{21}) avec les états du continu doit être faible pour les états loin du seuil de H.

4- L'opérateur H^{22} , restriction de H à l'espace 2, présente un spectre entièrement continu identique à celui de H.

L'énergie $\epsilon_\gamma = E - E_{\gamma_\ell}$ est celle d'une particule émise du système de N-nucléons laissant le noyau résiduel dans l'état $|\tilde{\gamma}_\ell\rangle_n$.

II.3.2. Schéma de résolution en représentation énergie.

C'est la méthode de résolution utilisée dans les calculs modèles de V. Gillet et C. Bloch^[8], ainsi que dans l'étude de la résonance géante de O^{16} par J. Raynal, M.A. Melkanoff et T. Sawada^[13].

Nous en rappelons uniquement les grandes lignes, développant en (II.3.3) la résolution en représentation position.

Les singularités des amplitudes $a_\gamma(\epsilon)$ apparaissent clairement sur l'équation (II-23b). En effet, quand ϵ tend vers $\epsilon_{\gamma_\ell} = E - E_{\gamma_\ell}$, le premier terme reste fini et on suppose qu'il en est de même du dernier (terme intégral) ; par suite $a_\gamma(\epsilon)$ présente une singularité de la forme :

$$a_\gamma(\epsilon) = A_\gamma \delta(\epsilon - \epsilon_{\gamma_\ell}) + b_\gamma(\epsilon) \quad , \quad b_\gamma(\epsilon) \xrightarrow{\epsilon \rightarrow \epsilon_{\gamma_\ell}} \frac{B_\gamma}{\epsilon - \epsilon_{\gamma_\ell}} .$$

Ces singularités apparaissent uniquement pour les voies de réaction ouvertes correspondant à ϵ_{γ_ℓ} positive ou nulle soit : $E \geq E_{\gamma_\ell}$.

Nous vérifions que pour ces singularités les termes intégraux des équations (II-23) restent finis comme nous l'avions supposé. Cependant les intégrands présentant des pôles, on doit faire choix d'une convention pour définir

leurs valeurs en ces points singuliers. Cette convention est arbitraire, notons par \int l'intégrale définie avec une convention particulière. Séparant le terme en fonction delta de $a_\gamma(\epsilon)$, le système d'équations (II-23) s'écrit :

$$(E_\alpha - E) a_\alpha + \sum_{\alpha'} \sum_n \langle \tilde{\alpha} | \mathcal{V} | \tilde{\alpha}' \rangle_n a_{\alpha'} + \sum_{\gamma'} \int d\epsilon' \sum_n \langle \tilde{\alpha} | \mathcal{V} | \tilde{\gamma}' \epsilon' \rangle_n b_{\gamma'}(\epsilon') \\ = - \sum_{\gamma'} \sum_n \langle \tilde{\alpha} | \mathcal{V} | \tilde{\gamma} \epsilon \rangle_n A_{\gamma'} \quad (\text{II-24a})$$

$$\sum_{\alpha'} \sum_n \langle \tilde{\gamma} \epsilon | \mathcal{V} | \tilde{\alpha}' \rangle_n a_{\alpha'} + (E_{\gamma_\ell} + \epsilon - E) b_\gamma(\epsilon) + \sum_{\gamma'} \int d\epsilon' \sum_n \langle \tilde{\gamma} \epsilon | \mathcal{V}_d | \tilde{\gamma}' \epsilon' \rangle_n b_{\gamma'}(\epsilon') \\ = - \sum_{\gamma'} \sum_n \langle \tilde{\gamma} \epsilon | \mathcal{V}_d | \tilde{\gamma} \epsilon \rangle_n A_{\gamma'} \quad (\text{II-24b})$$

Ces équations déterminent toutes les amplitudes a_α et $b_\gamma(\epsilon)$ en fonction des A_γ .

Pour cela^[9], on décompose $|\tilde{\Psi}\rangle$ sur les trois sous-espaces : le sous-espace 1 introduit précédemment, la partie du sous-espace 2 correspondant aux états "hors couche d'énergie" ($\epsilon \neq \epsilon_{\gamma_\ell}$) que nous notons encore 2 et l'espace 3 correspondant aux états de 2 sur "la couche d'énergie" ($\epsilon = \epsilon_{\gamma_\ell}$). Nous écrirons les trois composantes de $|\tilde{\Psi}\rangle$ sous la forme :

$$|\tilde{\Psi}\rangle = |\tilde{1}\rangle + |\tilde{b}\rangle + |\tilde{A}\rangle \quad \begin{cases} |\tilde{1}\rangle = \sum_{\alpha} |\tilde{\alpha}\rangle_n a_{\alpha} \\ |\tilde{b}\rangle = \sum_{\gamma} \int d\epsilon |\tilde{\gamma} \epsilon\rangle_n b_{\gamma}(\epsilon) \\ |\tilde{A}\rangle = \sum_{\gamma} |\tilde{\gamma} \epsilon_{\gamma_\ell}\rangle_n A_{\gamma} \end{cases} \quad (\text{II-25})$$

Séparant les contributions de ces trois sous-espaces, les équations (II-24) s'écrivent symboliquement :

$$\begin{cases} (H^{11} - E) |\tilde{1}\rangle + \mathcal{V}^{12} |\tilde{b}\rangle = - \mathcal{V}^{13} |\tilde{A}\rangle \end{cases} \quad (\text{II-26a})$$

$$\begin{cases} \mathcal{V}^{21} |\tilde{1}\rangle + (H^{22} - E) |\tilde{b}\rangle = - \mathcal{V}^{23} |\tilde{A}\rangle \end{cases} \quad (\text{II-26b})$$

Pour exprimer $|\tilde{b}\rangle$ en fonction de $|\tilde{A}\rangle$, on introduit un hamiltonien effectif résultant de l'élimination du sous-espace 1. Nous ne détaillons pas cette technique qui permet de définir une matrice de réactance K telle que :

$$|\tilde{B}\rangle = -K |\tilde{A}\rangle \quad (\text{II-27})$$

Il reste à établir le lien entre les coefficients A_γ , B_γ et la forme asymptotique aux grandes distances des fonctions d'onde. Dans la voie de réaction γ , on définit l'état individuel de diffusion par :

$$|\Psi_\gamma\rangle = \int d\epsilon |\epsilon i\rangle a_\gamma(\epsilon) = |\epsilon_{\gamma_\ell} i\rangle A_\gamma + \int d\epsilon |\epsilon i\rangle b_\gamma(\epsilon) \quad (\text{II-28})$$

La valeur asymptotique aux grandes distances de la fonction d'onde associée au terme intégral de (II-28) est entièrement déterminée par le voisinage de la singularité de $b_Y(\epsilon)$. Cette valeur dépend de la convention adoptée pour définir f . Pour un choix particulier, on détermine par (II-28) le comportement asymptotique aux grandes distances de la fonction d'onde de $|\varphi_Y\rangle$ en fonction des coefficients A_Y et B_Y . En identifiant ce comportement asymptotique avec la somme d'une onde entrante et d'une onde sortante, on relie la matrice S à la matrice de réactance K .

Indiquons par exemple, qu'ayant défini l'intégrale f par la partie principale, on obtient :

$$S = e^{i\delta} \frac{1 - i\pi K}{1 + i\pi K} e^{i\delta} \quad , \quad (II-29)$$

où $e^{i\delta}$ est une matrice diagonale dont les éléments correspondent aux déphasages δ_Y des états de diffusion non perturbés $|\epsilon i\rangle$ pour $\epsilon = \epsilon_{Y\ell}$.

II.3.3. Résolution en représentation position.

Au lieu de résoudre le problème en représentation énergie, transformons les équations (II-23) en un système d'équations intégral-différentielles couplées de la variable radiale r .^[13]

On évite ainsi les problèmes que pose la résolution pratique des équations en représentation énergie, en particulier le traitement de l'intégration sur l'énergie par discrétisation et troncature.^[13]

Le caractère à courte portée des interactions nucléaires justifie en représentation position, la troncature du domaine de variation de r à une valeur finie, grande par rapport aux portées caractéristiques des potentiels. De plus, la résolution en représentation position conduit directement au comportement asymptotique à grande distance des fonctions d'onde, et donc aux sections efficaces.

En fonction des états individuels de diffusion $|\varphi_Y\rangle$ définis par (II-28) le système d'équations (II-23) s'écrit :

$$\begin{cases} (E_\alpha - E) a_\alpha + \sum_{\alpha'} \sum_n \tilde{\alpha} |V| \tilde{\alpha}' \rangle_n a_{\alpha'} + \sum_{Y'} \sum_n \tilde{\alpha} |V| \gamma_\ell' \varphi_{Y'} \rangle_n = 0 & (II-30a) \\ \sum_{\alpha'} \sum_n \tilde{\gamma} E |V| \tilde{\alpha}' \rangle_n a_{\alpha'} + (E_{Y_\ell} + E - E) a_{Y(\epsilon)} + \sum_{Y'} \sum_n \tilde{\gamma} E |V| \gamma_\ell' \varphi_{Y'} \rangle_n = 0. & (II-30b) \end{cases}$$

Multiplions l'équation (II-30b) par le ket $|\epsilon i\rangle$ et intégrons sur la variable continue ϵ .

Le deuxième terme de cette équation fait apparaître l'action de h sur l'état individuel de diffusion :

$$\int d\epsilon (E_{\gamma_\ell} + \epsilon - E) |\epsilon i\rangle a_\gamma(\epsilon) = (E_{\gamma_\ell} + h - E) |\varphi_\gamma\rangle. \quad (\text{II-31})$$

Les deux autres termes sont des sommes d'éléments de matrice de la forme $\sum_n \langle \tilde{\gamma} \epsilon | \tilde{V} | \tilde{\alpha}' \rangle_n$. Par application de (D-25), n'antisymétrisons totalement que le ket de ces éléments de matrice de façon à isoler l'état individuel $\langle \epsilon i |$ appartenant à l'un des espaces $\mathcal{E}^{(1)}$ du produit tensoriel $\mathcal{E}^{(N)}$ (D-4), par exemple le $N^{\text{ième}}$, soit explicitement :

$$\sum_n \langle \tilde{\gamma} \epsilon | \tilde{V} | \tilde{\alpha}' \rangle_n = \sum_n \langle \tilde{\gamma}_{\ell}(1, \dots, N-1) | \langle \epsilon i(N) | \tilde{V} | \tilde{\alpha}' \rangle_n \sqrt{N}, \quad (\text{II-32})$$

$$\sum_n \langle \tilde{\gamma} \epsilon | \tilde{V}_d | \tilde{\gamma}'_{\ell} \tilde{\varphi}_{\gamma'} \rangle_n = \sum_n \langle \tilde{\gamma}_{\ell}(1, \dots, N-1) | \langle \epsilon i(N) | \tilde{V}_d \mathcal{R}(N-1, 1) | \tilde{\gamma}'_{\ell}(1, \dots, N-1) \rangle_n | \tilde{\varphi}_{\gamma'}(N) \rangle. \quad (\text{II-33})$$

Sur cet espace de Hilbert à un corps $\mathcal{E}^{(1)}_{(N)}$ ainsi isolé, on utilise la restriction de la relation de fermeture (II-4) au sous-espace des états ayant le même nombre quantique i que l'état individuel de diffusion, pour exprimer l'intégrale sur ϵ par :

$$\int d\epsilon |\epsilon i\rangle \langle \epsilon i| = \mathbb{1}_i(N) - \sum_n |ni(N)\rangle \langle ni(N)|, \quad (\text{II-34})$$

où $\mathbb{1}_i(N)$ est l'opérateur identité sur ce sous-espace et $|ni\rangle$ un état lié.

Nous obtenons ainsi une nouvelle expression pour les équations (II-30b) :

$$\sum_{\alpha'} \left[\sum_n \langle \tilde{\gamma}_{\ell} | \mathbb{1}_i(N) \tilde{V} | \tilde{\alpha}' \rangle_n - \sum_n |ni(N)\rangle \langle \tilde{\gamma}_{\ell} | \langle ni(N) | \tilde{V} | \tilde{\alpha}' \rangle_n \right] \sqrt{N} a_{\alpha'} + (E_{\gamma_\ell} + h - E) |\varphi_\gamma(N)\rangle + \sum_{\gamma'} \left[\sum_n \langle \tilde{\gamma}_{\ell} | \mathbb{1}_i(N) \tilde{V}_d | \tilde{\gamma}'_{\ell} \tilde{\varphi}_{\gamma'} \rangle_n - \sum_n |ni(N)\rangle \langle \tilde{\gamma}_{\ell} | \langle ni(N) | \tilde{V}_d | \tilde{\gamma}'_{\ell} \tilde{\varphi}_{\gamma'} \rangle_n \right] = 0. \quad (\text{II-35})$$

Outre les termes potentiels, il apparaît des termes correctifs dépendant des états liés de même nombre quantique i que l'état individuel de diffusion $|\varphi_\gamma\rangle$.

Ces derniers termes sont essentiels pour assurer l'antisymétrisation du nucléon diffusé avec ceux du noyau résiduel ; le paragraphe II.4 sera consacré à leur étude.

On obtient la représentation position en considérant la base propre de $|\vec{r}|$ et des autres opérateurs dont l'ensemble des nombres quantiques est désigné par i (on suppose qu'ils forment un ensemble complet d'observables qui commutent). Cette base satisfait les relations de fermeture et d'orthogonalité suivantes* :

$$\sum_i \int_0^\infty r^2 dr |\tau i\rangle \langle \tau i| = \mathbb{1} \quad , \quad (\text{II-36})$$

$$\langle \tau i | \tau' i' \rangle = \frac{\delta(\tau - \tau')}{\tau^2} \delta_{ii'} \quad . \quad (\text{II-37})$$

En particulier sur cette base, l'opérateur identité sur le sous-espace des états de nombre quantique i s'écrit :

$$\mathbb{1}_i = \int_0^\infty r^2 dr |\tau i\rangle \langle \tau i| \quad . \quad (\text{II-38})$$

On définit les fonctions radiales (C-26) des états liés à une particule $|ni\rangle$ et de diffusion $|\varphi_\gamma\rangle$ respectivement par :

$$f_{ni}(r) = \langle \tau i | ni \rangle \quad , \quad \varphi_\gamma(r) = \langle \tau i | \varphi_\gamma \rangle \quad . \quad (\text{II-39})$$

Décomposant $|\varphi_\gamma\rangle$ sur la base $(|ri\rangle)$ suivant :

$$|\varphi_\gamma\rangle = \int_0^\infty r^2 dr |\tau i\rangle \varphi_\gamma(r) \quad , \quad (\text{II-40})$$

et projetant les équations (II-35) sur l'état $|ri\rangle$ de l'espace $\mathcal{E}_{(N)}^{(1)}$, on obtient l'ensemble des équations intégral-différentielles couplées de la variable r :

$$\left\{ \begin{aligned} (E_\alpha - E) a_\alpha + \sum_{\alpha'} \int_0^\infty \tilde{\alpha} \tilde{\alpha}' |V| \tilde{\alpha}' \rangle_n a_{\alpha'} + \sum_{\gamma'} \int_0^\infty r'^2 dr' \langle \tilde{\alpha} | V | \gamma' \rangle_{\ell} \langle \tau i' | \gamma' \rangle_n \varphi_{\gamma'}(r') = 0 \quad (\text{II-41a}) \\ \sum_{\alpha'} [\langle \gamma_\ell, \tau i | V | \tilde{\alpha}' \rangle_n - \sum_n f_{ni}(r) \langle \gamma_\ell, ni | V | \tilde{\alpha}' \rangle_n] \sqrt{N} a_{\alpha'} \quad (\text{II-41b}) \\ + (E_{\gamma_\ell} - E) \varphi_\gamma(r) + \int_0^\infty r'^2 dr' \langle \tau i | R | \tau' i' \rangle \varphi_\gamma(r') \\ + \sum_{\gamma'} \int_0^\infty r'^2 dr' [\langle \gamma_\ell, \tau i | V | \gamma' \rangle_{\ell} \langle \tau' i' | \gamma' \rangle_n - \sum_n f_{ni}(r) \langle \gamma_\ell, ni | V | \gamma' \rangle_{\ell} \langle \tau' i' | \gamma' \rangle_n] \varphi_{\gamma'}(r') = 0 \end{aligned} \right.$$

* Cette base n'appartient pas en fait à l'espace de Hilbert, n'étant pas normalisable.

Les potentiels à un corps que nous considérons (C.3.2) sont diagonaux sur la base $(|ri\rangle)$.

En (E.3.1), on montre dans le cas d'un potentiel V à deux corps, comment le calcul des éléments de matrice comprenant des états $|ri\rangle$ permet de définir des potentiels locaux et non-locaux :

$${}_n \langle \tilde{\alpha} | V | \tilde{\gamma} \rangle_n |ri\rangle \sqrt{N} = W_{\alpha\gamma}(r) \quad (E-43)$$

$$\langle \gamma_e, ri | V_d | \tilde{\gamma}_e, ri' \rangle = \frac{\delta(r-r')}{r^2} V_{\gamma\gamma'}^L(r) + V_{\gamma\gamma'}^{NL}(r, r'). \quad (E-44)$$

D'où l'expression générale du système d'équations intégral-différentielles couplées :

$$\left\{ \begin{aligned} (E_\alpha - E) a_\alpha + \sum_{\alpha'} \tilde{\alpha} | V | \alpha' \rangle_n a_{\alpha'} + \sum_{\gamma'} \int_0^\infty r'^2 dr' W_{\alpha\gamma'}(r') \varphi_{\gamma'}(r') &= 0 \quad (II-42a) \\ \sum_{\alpha'} \left[W_{\alpha\gamma}^*(r) - \sum_n f_{ni}(r) \int_0^\infty r'^2 dr' f_{ni}^*(r') W_{\alpha\gamma}^*(r') \right] a_{\alpha'} & \\ + [E_{\gamma_e} + h(r) - E] \varphi_\gamma(r) + \sum_{\gamma'} \left\{ V_{\gamma\gamma'}^L(r) \varphi_{\gamma'}(r) + \int_0^\infty r'^2 dr' V_{\gamma\gamma'}^{NL}(r, r') \varphi_{\gamma'}(r') \right. & \\ \left. - \sum_n f_{ni}(r) \int_0^\infty r''^2 dr'' f_{ni}^*(r'') \left[V_{\gamma\gamma'}^L(r'') \varphi_{\gamma'}(r'') + \int_0^\infty r''^2 dr'' V_{\gamma\gamma'}^{NL}(r'', r') \varphi_{\gamma'}(r') \right] \right\} & \end{aligned} \right. \quad (II-42b)$$

où le hamiltonien radial $h(r)$ est défini par (C-21, 22) :

$$h(r) = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] + \frac{V}{\ell_j}(r), \quad (II-43)$$

μ étant la masse réduite :

$$\mu = \frac{N-1}{N} m.$$

Remarque : Dans le cas d'un hamiltonien H invariant par rotation dans les espaces de spin et d'isospin, on utilisera des états $|\tilde{\alpha}\rangle_n$ et $|\gamma_e, ri\rangle_n$ couplés en spin et isospin (D.2).

Les équations correspondant à ces états s'obtiennent par combinaison linéaire des équations (II-41) avec pour coefficients les produits de Clebsch-Gordan nécessaires aux couplages. La nature des équations (II-42) n'est pas modifiée, on doit seulement ajouter les nombres quantiques correspondant à ces couplages, le hamiltonien H couplant alors uniquement les voies de réaction correspondant aux mêmes spin et isospin total.

Les techniques utilisées pour résoudre numériquement le système d'équations (II-42), sont détaillées dans l'appendice F.

II.4. LE PROBLEME DE L'ANTISYMETRISATION.

II.4.1. Orthogonalité entre états individuels liés et de diffusion.

Dans le formalisme présenté ci-dessus, l'antisymétrisation complète des états à N nucléons est introduite dès le début en choisissant une base de particules indépendantes totalement antisymétrisée (II-7).

Le passage en représentation position à l'aide de la relation de fermeture (II-34) a introduit dans les équations (II-35), les termes correctifs suivants :

$$\begin{aligned}
 & - \sum_{\alpha'} \sum_n |ni(N)\rangle \langle \tilde{\gamma}_\ell | \langle ni(N) | \mathcal{V} | \tilde{\alpha}' \rangle_n \sqrt{N} a_{\alpha'} \quad , \\
 & - \sum_{\gamma'} \sum_n |ni(N)\rangle \langle \tilde{\gamma}_\ell | \langle ni(N) | \mathcal{V}_d | \tilde{\gamma}' \rangle_n \varphi_{\gamma'} \quad ,
 \end{aligned}
 \tag{II-44}$$

où la somme sur n porte sur tous les états liés $|ni\rangle$ de même nombre quantique i que l'état individuel de diffusion $|\varphi_\gamma\rangle$ ($\gamma \equiv \gamma_\ell, i$), ces états liés $|ni\rangle$ étant ou non introduits pour décrire l'état $|\tilde{\gamma}_\ell\rangle_n$ du noyau résiduel.

Les termes correctifs précédents correspondent à l'antisymétrisation entre le nucléon incident et les nucléons du noyau cible.

Ils assurent l'orthogonalité, pour i donné, entre $|\varphi_\gamma\rangle$ et les états liés $|ni\rangle$. En effet, multiplions l'équation (II-35) par le bra $\langle ni|$ appartenant au dual de l'espace à une particule isolée $\mathcal{E}_{(N)}^{(1)}$. Grâce à l'orthogonalité (II-5) des états liés, les deux termes entre crochets de (II-35) s'annulent séparément, il reste ainsi :

$$\langle ni | E_{\gamma_\ell} + h - E | \varphi_\gamma \rangle = 0 \quad , \tag{II-45}$$

qui, $|ni\rangle$ étant par définition état propre de h conduit au résultat annoncé :

$$\langle ni | \varphi_\gamma \rangle = 0 \quad , \quad \gamma \equiv \gamma_\ell, i \quad . \tag{II-46}$$

Contrairement aux relations d'orthogonalité (II-5) entre les états liés et du continu d'un même hamiltonien h, le résultat précédent est non trivial, l'état de diffusion $|\varphi_\gamma\rangle$ étant gouverné par le hamiltonien complet.

II.4.2. Elimination dans un espace modèle des états $|ni\rangle$ inoccupés dans le noyau résiduel.

Pour une voie de réaction $\gamma \equiv \gamma_{\rho}, i$, on distingue les états liés $|ni\rangle$ selon qu'ils figurent ou non dans les états de particules indépendantes $|\tilde{\beta}_{\rho}\rangle_n$ dont $|\tilde{\gamma}_{\rho}\rangle_n$ est une combinaison linéaire (II-20).

Nous désignerons par $|\mu i\rangle$ les états $|ni\rangle$ présents dans ce développement et par $|vi\rangle$ les autres. Les états $|vi\rangle$ seront dits inoccupés dans $|\tilde{\gamma}_{\rho}\rangle_n$, et $|\mu i\rangle$ occupés ou partiellement occupés selon que $|\tilde{\gamma}_{\rho}\rangle_n$ se réduit ou non à un état de particules indépendantes.

Par exemple, dans la diffusion d'un neutron sur O^{16} ou F^{19} , pour la voie de réaction définie par le fondamental du noyau cible et l'état s de diffusion, les seuls états s liés dans le champ moyen h de ces noyaux sont : $1s$ et $2s$ (Tab. 6 et 8).

Dans un modèle où le fondamental de O^{16} est décrit par un état de particules indépendantes formé des couches complètes en protons et neutrons, $1s$, $1p_{3/2}$, $1p_{1/2}$, l'état $1s$ est occupé et l'état $2s$ ne l'est pas.

Par contre, en décrivant le fondamental de F^{19} comme le coeur précédent de O^{16} et un mélange de configurations pour un proton et deux neutrons dans la couche $2s-1d$, l'état $1s$ est occupé alors que l'état $2s$ ne l'est que partiellement ($2s$ n'est présent que dans certaines configurations du tableau 11).

Montrons que dans un espace modèle, on peut éliminer les termes correctifs (II-44) d'antisymétrisation avec les états liés $|vi\rangle$ inoccupés dans les états $|\tilde{\gamma}_{\rho}\rangle_n$ du noyau résiduel.

Pour cela, l'espace de configurations restreint est défini de la façon suivante :

- on suppose qu'il existe un sous-ensemble d'états $|vi\rangle$ inoccupés dans toutes les configurations $|\tilde{\gamma}_{\rho}\rangle_n$ considérées pour le noyau résiduel,
- seuls seront introduits les états à N nucléons liés obtenus par antisymétrisation et normalisation (et éventuellement couplage) des états précédents $|\tilde{\gamma}_{\rho}\rangle_n$ et $|vi\rangle$, soit :

$$|\tilde{\gamma} \nu \rangle_n = |\tilde{\gamma}_\ell, \nu i \rangle_n \quad (II-47)$$

La normalisation de ces états se réduit au facteur de comptage (D-30) :

$$|\tilde{\gamma} \nu \rangle_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \mathcal{A}(N-1, 1) |\tilde{\gamma}_\ell(1, \dots, N-1) \rangle_n |\nu i(N) \rangle, \quad (II-48)$$

ceci reste vrai pour un état couplé, l'antisymétrisation n'introduisant pas de règles de sélection sur les couplages (D.1.2b). En fonction des états orthogonaux $|\tilde{\gamma} \nu \rangle_n$, les équations (II-30a) s'écrivent :

$$[\langle \tilde{\gamma} \nu | H_0 | \tilde{\gamma} \nu \rangle_n - E] a_{\gamma \nu} + \sum_{\gamma' \nu'} \langle \tilde{\gamma} \nu | \mathcal{V} | \tilde{\gamma}' \nu' \rangle_n a_{\gamma' \nu'} + \sum_{\gamma'} \langle \tilde{\gamma} \nu | \mathcal{V} | \tilde{\gamma}' \nu' \rangle_n \varphi_{\gamma'} = 0. \quad (II-49)$$

Les états individuels $|\tilde{\gamma}_\ell \rangle_n$ et $|\tilde{\gamma}'_\ell \rangle_n$ étant par hypothèse orthogonaux aux états liés $|\nu i \rangle$ et $|\nu' i' \rangle$, la décomposition (II-16) de \mathcal{V} en $v_e + v_d$ s'applique :

$$\langle \tilde{\gamma} \nu | \mathcal{V} | \tilde{\gamma}' \nu' \rangle_n = \delta_{\nu \nu'} \delta_{i i'} \langle \tilde{\gamma}_\ell | v_e | \tilde{\gamma}'_\ell \rangle_n + \langle \tilde{\gamma} \nu | v_d | \tilde{\gamma}' \nu' \rangle_n \quad (II-50)$$

Pour la même raison, on a :

$$\langle \tilde{\gamma} \nu | H_0 | \tilde{\gamma} \nu \rangle_n = \langle \tilde{\gamma}_\ell | H_0 | \tilde{\gamma}_\ell \rangle_n + \epsilon_{\nu i} \quad (II-51)$$

En regroupant les termes ci-dessus en H_0 et v_e , on fait apparaître dans (II-49) les éléments de matrice de H sur sa base propre ($|\tilde{\gamma}_\ell \rangle_n$) (II-20) dans le sous-espace des états liés à N-1 nucléons. Nous en déduisons pour (II-49) une forme analogue à (II-30b) :

$$(E_\ell + \epsilon_{\nu i} - E) a_{\gamma \nu} + \sum_{\gamma' \nu'} \langle \tilde{\gamma} \nu | v_d | \tilde{\gamma}' \nu' \rangle_n a_{\gamma' \nu'} + \sum_{\gamma'} \langle \tilde{\gamma} \nu | v_d | \tilde{\gamma}' \nu' \rangle_n \varphi_{\gamma'} = 0, \quad (II-52)$$

où dans le dernier élément de matrice on a remplacé \mathcal{V} par v_d , la contribution de v_e étant nulle en raison de l'orthogonalité de $|\nu i \rangle$ avec l'état de diffusion $|\varphi_\gamma \rangle$.

Dans chaque voie de réaction γ , définissons de façon analogue à (II-28), l'état lié $|\chi_\gamma \rangle$ par :

$$|\chi_\gamma\rangle = \sum_{\nu} a_{\gamma\nu} |\nu i\rangle, \quad (\text{II-53})$$

ainsi que le nouvel état individuel de diffusion :

$$|\Psi_\gamma\rangle = |\chi_\gamma\rangle + |\varphi_\gamma\rangle. \quad (\text{II-54})$$

Avec ces notations, les équations (II-52) s'écrivent :

$$(E_{\gamma_\ell} + E_{\nu i} - E) a_{\gamma\nu} + \sum_{\gamma'} \sum_{\tilde{n}} \tilde{\gamma}_\ell | \langle \nu i(N) | \mathcal{U}_d \mathcal{A}(N-1,1) | \tilde{\gamma}'_\ell \rangle_{\tilde{n}} | \Psi_{\gamma'} \rangle = 0, \quad (\text{II-55})$$

où comme en (II-32) on a isolé l'espace $\mathcal{E}_{(N)}^{(1)}$ en n'antisymétrisant totalement que le ket des éléments de matrice.

Après multiplication par $|\nu i(N)\rangle$, additionnons les équations (II-55) correspondant à une même voie de réaction γ et aux différentes valeurs de ν , il vient :

$$(E_{\gamma_\ell} + h - E) |\chi_\gamma(N)\rangle + \sum_{\gamma'} \sum_{\nu} |\nu i(N)\rangle \sum_{\tilde{n}} \tilde{\gamma}_\ell | \langle \nu i(N) | \mathcal{U}_d \mathcal{A}(N-1,1) | \tilde{\gamma}'_\ell \rangle_{\tilde{n}} | \Psi_{\gamma'} \rangle = 0. \quad (\text{II-56})$$

Dans l'espace de configurations restreint considéré ci-dessus, les équations (II-35) prennent, en fonction de $|\Psi_\gamma\rangle$, une forme condensée analogue à (II-56) :

$$(E_{\gamma_\ell} + h - E) |\varphi_\gamma(N)\rangle + \sum_{\gamma'} \left[\sum_{\tilde{n}} \tilde{\gamma}_\ell | \mathbb{1}_i(N) \mathcal{U}_d \mathcal{A}(N-1,1) | \tilde{\gamma}'_\ell \rangle_{\tilde{n}} | \Psi_{\gamma'} \rangle - \sum_{\tilde{n}} |n i(N)\rangle \sum_{\tilde{n}} \tilde{\gamma}_\ell | \langle n i(N) | \mathcal{U}_d \mathcal{A}(N-1,1) | \tilde{\gamma}'_\ell \rangle_{\tilde{n}} | \Psi_{\gamma'} \rangle \right] = 0. \quad (\text{II-57})$$

En additionnant les équations (II-56) et (II-57) correspondant aux mêmes voies de réaction γ , on obtient un ensemble d'équations couplées qui dépendent uniquement des états individuels de diffusion $|\Psi_\gamma\rangle$ et des configurations $|\tilde{\gamma}'_\ell\rangle_{\tilde{n}}$ du noyau résiduel :

$$(E_{\gamma_\ell} + h - E) |\Psi_\gamma(N)\rangle + \sum_{\gamma'} \left[\sum_{\tilde{n}} \tilde{\gamma}_\ell | \mathbb{1}_i(N) \mathcal{U}_d \mathcal{A}(N-1,1) | \tilde{\gamma}'_\ell \rangle_{\tilde{n}} | \Psi_{\gamma'} \rangle - \sum_{\mu} | \mu i(N) \rangle \sum_{\tilde{n}} \tilde{\gamma}_\ell | \langle \mu i(N) | \mathcal{U}_d \mathcal{A}(N-1,1) | \tilde{\gamma}'_\ell \rangle_{\tilde{n}} | \Psi_{\gamma'} \rangle \right] = 0. \quad (\text{II-58})$$

Nous avons utilisé la décomposition du projecteur sur les états liés de nombre quantique i :

$$\sum_{\tilde{n}} |n i\rangle \langle n i| = \sum_{\mu} | \mu i \rangle \langle \mu i | + \sum_{\nu} | \nu i \rangle \langle \nu i |. \quad (\text{II-59})$$

Ainsi, n'apparaissent que les termes d'antisymétrisation correspondant aux états liés $|\mu i\rangle$ effectivement présents dans la description des configurations $|\Psi_\rho\rangle_n$ du noyau résiduel.

La résolution des équations précédentes détermine les états individuels de diffusion $|\psi_\gamma\rangle$. Les comportements asymptotiques aux grandes distances des fonctions d'onde associées à $|\psi_\gamma\rangle$ et $|\phi_\gamma\rangle$ sont identiques, et par suite conduisent aux mêmes déphasages et sections efficaces.

Les composantes $a_{\gamma\nu}$ des états liés à N nucléons $|\tilde{\gamma\nu}\rangle_n$ s'obtiennent par projection sur les états $|\nu i\rangle$

$$a_{\gamma\nu} = \langle \nu i | \Psi_\gamma \rangle \quad . \quad (\text{II-60})$$

Par contre, les termes correctifs d'antisymétrisation assurent encore l'orthogonalité entre les états individuels de diffusion $|\psi_\gamma\rangle$ et les états liés $|\mu i\rangle$ introduits dans la description du noyau résiduel :

$$\langle \mu i | \Psi_\gamma \rangle = 0 \quad , \quad \gamma \equiv \gamma_\ell, i \quad . \quad (\text{II-61})$$

Ainsi, dans ce modèle, les équations (a) correspondant aux projections de l'équation de Schrödinger sur les états $|\gamma\nu\rangle$ à N nucléons liés ont-elles pu être éliminées. Il ne subsiste qu'un ensemble d'équations (II-58) du type (b), sans terme de couplage avec des états $|\tilde{\gamma\nu}\rangle_n$, et dont les termes correctifs d'antisymétrisation ne portent que sur les états à une particule liés présents dans le noyau résiduel.

Rappelons, avec des notations évidentes, les espaces de configurations restreints considérés dans ce modèle :

- décomposition de l'espace à une particule :

$$\mathcal{E}^{(1)} = (|\mu i\rangle) + (|\nu i\rangle) + (|\varepsilon i\rangle) \quad ,$$

- espace des états liés à N-1 nucléons de l'étape de prédiagonalisation (II.3.1) :

$$\mathcal{E}_{\text{liés}}^{(N-1)} = (|\mu i\rangle \otimes^{N-1}) \quad ,$$

- espace des états à N nucléons :

$$\mathcal{E}^{(N)} = \mathcal{E}_{\text{liés}}^{(N-1)} \otimes (|\nu i\rangle) + \mathcal{E}_{\text{liés}}^{(N-1)} \otimes (|\varepsilon i\rangle) \quad .$$

Ce cas modèle montre le lien étroit qui existe entre le choix des espaces de configurations et le traitement de l'antisymétrisation entre le nucléon dans le continu et les nucléons liés.

La diffusion de neutrons thermiques sur les noyaux C^{12} , C^{13} , O^{16} , O^{17} et Ca^{40} sera étudiée au chapitre IV dans le cadre du modèle simple présenté ci-dessus.

Par contre, dans le cas de la diffusion de neutrons sur le F^{19} , l'état $2s$ étant partiellement occupé dans ce noyau, l'étude de l'antisymétrisation entre les états s nous amènera à discuter au chapitre V différentes approximations pour l'espace à vingt nucléons liés correspondant aux états du F^{20} .

II.4.3. Importance des termes correctifs d'antisymétrisation.

a) Les équations utilisées couramment s'obtiennent en négligeant dans (II-42) les termes correctifs d'antisymétrisation.

Cette approximation laisse la possibilité à la particule incidente de se diffuser dans les états à une particule présents dans le noyau résiduel. L'état de diffusion $|\varphi_V\rangle$ possède alors des composantes non nulles sur les états liés $|ni\rangle$ de même nombre quantique i . Evaluons dans un modèle simple, l'effet des corrections d'antisymétrisation sur la longueur de diffusion :

Les fonctions radiales multipliées par r seront désignées par g . Supposons que les potentiels V^L et V^{NL} (E-44) se réduisent à un potentiel local $V(r)$ (cf. ci-dessous, cas d'une interaction à deux corps de portée nulle), et soit $v(r)$ le potentiel à un corps. Dans le cas d'une seule voie de réaction, la forme de l'équation (II-42b) incluant un seul terme correctif d'antisymétrisation avec l'état lié de fonction d'onde radiale g_1 , est la suivante, quand on néglige le couplage avec les équations (II-42a) (avec g et g_1 réelles) :

$$g''(r) + v(r)g(r) + V(r)g(r) - g_1(r) \int_0^\infty g_1(r') V(r') g(r') dr' = 0. \quad (II-62)$$

On s'intéresse à la solution nulle à l'origine et dont le comportement asymptotique aux grandes valeurs de r est :

$$g(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\simeq} 1 - \frac{r}{b}. \quad (II-63)$$

La fonction d'onde radiale de diffusion approchée g_0 , obtenue en négligeant le terme correctif d'antisymétrisation satisfait :

$$g_0''(r) + v(r)g_0(r) + V(r)g_0(r) = 0, \quad (II-64)$$

et les conditions aux limites

$$g_0(0) = 0, \quad g_0(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\simeq} 1 - \frac{r}{b_0}. \quad (II-65)$$

Multipliant la première équation (II-62) par g_0 et la seconde (II-64) par g , et retranchant ces deux équations, on fait apparaître la dérivée du Wronskien de g_0 et g . Après intégration sur r de zéro à l'infini, on obtient :

$$|W(g_0, g)|_0^\infty = \frac{1}{b_0} - \frac{1}{b} = \int_0^\infty g_0(r) g_1(r) dr \times \int_0^\infty g_1(r') V(r') g(r') dr'. \quad (\text{II-66})$$

La fonction radiale g_1 de l'état lié satisfait l'équation :

$$g_1''(r) + v(r) g_1(r) + \epsilon_1 g_1(r) = 0, \quad \epsilon_1 < 0. \quad (\text{II-67})$$

La technique précédente, appliquée aux équations (II-64) et (II-67) permet d'écrire l'intégrale de recouvrement de g_0 avec g_1 sous la forme :

$$\int_0^\infty g_0(r) g_1(r) dr = \frac{1}{\epsilon_1} \int_0^\infty g_1(r) V(r) g_0(r) dr. \quad (\text{II-68})$$

D'où la nouvelle expression pour (II-66) de structure analogue à un développement perturbatif :

$$\frac{1}{b_0} - \frac{1}{b} = \frac{1}{\epsilon_1} \int_0^\infty g_1(r) V(r) g_0(r) dr \times \int_0^\infty g_1(r') V(r') g(r') dr'. \quad (\text{II-69})$$

Remarque : en supposant g_1 , g_0 et g peu différentes dans la région interne où le potentiel à courte portée $V(r)$ contribue de façon importante aux intégrales de (II-69), on obtient :

$$\frac{1}{b_0} < \frac{1}{b}, \quad \text{soit} \quad b < b_0, \quad (\text{II-70})$$

quand b et b_0 sont de même signe.

Pour un état de diffusion à énergie positive ϵ , un calcul analogue au précédent conduit au résultat suivant :

$$\sin(\delta_0 - \delta) = \frac{1}{k(\epsilon_1 - \epsilon)} \int_0^\infty g_1(r) V(r) g_0(r) dr \int_0^\infty g_1(r') V(r') g(r') dr'. \quad (\text{II-71})$$

Les corrections d'antisymétrisation apparaissent ainsi comme des effets du second ordre dans le potentiel V , et sont d'autant plus importantes que la différence des énergies $\epsilon_1 - \epsilon$ est faible en valeur absolue.

Cependant, même si $|\epsilon_1 - \epsilon|$ est grand, la section efficace de réaction photonucléaire ($\sigma(\gamma, n)$, $\sigma(\gamma, p)$), peut être sensible à de petites composantes sur les états liés. Cela a été montré pour O^{16} [13], où l'amplitude photonucléaire pour l'état occupé $1s$ est beaucoup plus importante que celle correspondant

aux états 2s et s dans le continu (les fonctions d'onde radiales de ces deux derniers états ayant un noeud à distance finie non nulle, alors que celle de l'état 1s n'en a pas).

Dans les problèmes de diffusion nucléon-noyau à énergie d'excitation nulle ou très faible, que nous considérerons aux chapitres IV et V, les corrections d'antisymétrisation avec les états s liés seront importantes, en particulier pour l'état 2s de faible énergie de liaison (Tab. 4,5,6,7 et 8). Nous comparerons les résultats obtenus en négligeant ces corrections, puis en introduisant celle correspondant à l'état 1s et enfin simultanément celles correspondant aux états 1s et 2s.

b) Pour une interaction \mathcal{V} à deux corps de portée nulle :

$$\mathcal{V}_{12} = V_0 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \quad , \quad (\text{II-72})$$

le potentiel non local $V_{\gamma\gamma}^{\text{NL}}(r, r')$ est proportionnel à $\delta(r-r')$. En effet, la partie radiale $V_\rho(r, r')$ du développement multipolaire de cette interaction est $\frac{1}{4\pi} \frac{\delta(r-r')}{r^2}$ (E-19), par suite "l'intégrale" radiale (E-40) du terme d'échange de l'élément de matrice (E-35) s'écrit :

$$\mathcal{R}_{a, \rho i, \rho' i', c}^\rho = \frac{1}{4\pi} \int_a(\rho) \int_b(\rho) \frac{\delta(\rho - \rho')}{\rho^2} \quad . \quad (\text{II-73})$$

Négligeant les termes correctifs d'antisymétrisation, les équations (II-42b) se réduisent alors à des équations différentielles avec un potentiel local.

Cependant, même avec une telle interaction, les termes correctifs d'antisymétrisation, lorsqu'ils sont présents, maintiennent le caractère intégral-différentiel des équations.

II.5. AVANTAGES DE LA DESCRIPTION CONSIDEREE POUR LES ETATS A N NUCLEONS.

L'espace de configurations restreint considéré des états $|\tilde{\alpha}\rangle_n$ et $|\tilde{\gamma}\epsilon\rangle_n$, peut également être engendré par le produit tensoriel des états liés $|\tilde{\gamma}_\rho\rangle_n$ de la cible par tous les états à une particule, liés ou non.

Pour décrire ces derniers états individuels, adoptons la base propre de l'opérateur $|\vec{r}|$ et des autres opérateurs dont l'ensemble des valeurs propres est désigné par i (on suppose qu'ils forment un ensemble complet d'observables qui commutent). Cette base satisfait les relations de fermeture et d'orthogonalité (II-36, 37). On considère ainsi pour l'espace à N nucléons, le système

générateur défini par les états :

$$|\tilde{\Phi}_{\gamma r}\rangle_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \mathcal{A}(N-1, 1) |\delta_\rho(1, \dots, N-1)\rangle_n |\tau i(N)\rangle, \quad (\text{II-74})$$

où l'indice γ de voie de réaction, désigne à la fois γ_ρ et i ainsi qu'éventuellement les couplages en spin et isospin. L'état général $|\tilde{\Psi}\rangle$ (II-8) s'exprime alors comme une intégrale sur r et une somme sur l'indice discret γ :

$$|\tilde{\Psi}\rangle = \sum_\gamma \int r^2 dr \psi_\gamma(r) |\tilde{\Phi}_{\gamma r}\rangle_n, \quad (\text{II-75})$$

où $\psi_\gamma(r)$ est la fonction d'onde radiale d'un état individuel $|\psi_\gamma\rangle$:

$$|\psi_\gamma\rangle = \int_0^\infty r^2 dr \psi_\gamma(r) |\tau i\rangle. \quad (\text{II-76})$$

Cet état $|\psi_\gamma\rangle$ présente des composantes à la fois sur les états liés et les états du continu :

$$|\psi_\gamma\rangle = \sum_n a_n^\gamma |n i\rangle + \int d\varepsilon a^\gamma(\varepsilon) |\varepsilon i\rangle. \quad (\text{II-77})$$

Remarquons que le développement (II-75) est identique à celui que l'on utiliserait dans le formalisme du groupe résonnant ou de la coordonnée génératrice [14], appliqué au cas élémentaire de la diffusion d'un nucléon par un noyau, la distance r entre le centre de masse du noyau résiduel et le nucléon incident étant la coordonnée génératrice, l'indice γ de voie de réaction pouvant être considéré comme une coordonnée génératrice discrète.

Les amplitudes $\psi_\gamma(r)$ s'obtiennent en résolvant l'équation de Schrödinger $H |\tilde{\Psi}\rangle = E |\tilde{\Psi}\rangle$, projetée sur les états $|\tilde{\Phi}_{\gamma r}\rangle_n$, soit :

$$\sum_{\gamma'} \int_0^\infty r'^2 dr' \langle \tilde{\Phi}_{\gamma r} | H - E | \tilde{\Phi}_{\gamma' r'} \rangle_n \psi_{\gamma'}(r') = 0. \quad (\text{II-78})$$

Les difficultés de résolution dans cette représentation résident dans l'évaluation du noyau de cette équation intégrale. En particulier, les états générateurs $|\tilde{\Phi}_{\gamma r}\rangle_n$ ne sont pas orthogonaux et par suite il s'introduit une matrice de norme :

$$N_{\gamma\gamma'}(r, r') = \langle \tilde{\Phi}_{\gamma r} | \tilde{\Phi}_{\gamma' r'} \rangle_n. \quad (\text{II-79})$$

Donnons seulement les grandes lignes de ce calcul :

On n'antisymétrise totalement (D-25) que le ket de l'élément de matrice :

$$\langle \tilde{\Phi}_{\gamma, \tau} | H - E | \tilde{\Phi}_{\gamma', \tau'} \rangle = \langle \gamma_{\ell}(1, \dots, N-1) | \langle \tau i(N) | (H - E) \mathcal{R}(N-1, 1) | \gamma'_{\ell}(1, \dots, N-1) \rangle | \tau i(N) \rangle, \quad (\text{II-80})$$

puis, les contributions dues à la substitution identité de $\mathcal{R}(N-1, 1)$, se séparent des autres, suivant le schéma :

$\mathcal{R}(N-1, 1) = \mathbb{1}$ <p><u>Noyau de recouvrement :</u></p> $M_{\gamma\gamma'}(\tau, \tau') = \delta_{\gamma\gamma'} \frac{\delta(\tau - \tau')}{\tau^2} \delta_{ii'}$ <p><u>Noyau d'énergie $H = T + V$:</u></p> <p>T + V sur les espaces $1, \dots, N-1$:</p> $\delta_{\gamma\gamma'} \frac{\delta(\tau - \tau')}{\tau^2} E_{\gamma_{\ell}}$ <p>T sur l'espace N :</p> $-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{\delta''(\tau - \tau')}{\tau^2} + \frac{2\delta'(\tau - \tau')}{\tau^3} + \frac{\ell_i(\ell_i + 1)}{\tau^2} \right] \delta_{\gamma\gamma'}$ <p>V incluant l'espace N :</p> $\frac{\delta(\tau - \tau')}{\tau^2} V_{\gamma\gamma'}^L(\tau)$	$- \sum_{\mathcal{P}} \mathcal{P}$ $- M_{\gamma\gamma'}(\tau, \tau')$ <p>T :</p> $\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{\delta''(\tau - \tau')}{\tau^2} + \frac{2\delta'(\tau - \tau')}{\tau^3} + \frac{\ell_i(\ell_i + 1)}{\tau^2} \right] M_{\gamma\gamma'}(\tau, \tau')$ <p>V :</p> $V_{\gamma\gamma'}^{NL}(\tau, \tau')$
--	--

Les équations (II-78) s'écrivent alors sous la forme d'un ensemble d'équations intégral-différentielles :

$$\begin{aligned} & \left[E_{\gamma_{\ell}} - \frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{1}{\tau} \frac{d^2}{d\tau^2} \tau + \frac{\ell(\ell+1)}{\tau^2} \right) - E \right] \Psi_{\gamma}(\tau) \\ & + \sum_{\gamma'} V_{\gamma\gamma'}^L(\tau) \Psi_{\gamma'}(\tau) + \int_0^{\infty} \tau'^2 d\tau' V_{\gamma\gamma'}^{NL}(\tau, \tau') \Psi_{\gamma'}(\tau') \\ & - \sum_{\gamma'} \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{1}{\tau} \frac{d^2}{d\tau^2} \tau + \frac{\ell(\ell+1)}{\tau^2} \right) - E \right] \int_0^{\infty} \tau'^2 d\tau' M_{\gamma\gamma'}(\tau, \tau') \Psi_{\gamma'}(\tau') = 0. \quad (\text{II-81}) \end{aligned}$$

Le dernier terme est un pseudo-potential dépendant de l'énergie, qui assure, par l'intermédiaire du recouvrement $M_{\gamma\gamma'}(\tau, \tau')$, l'antisymétrisation avec les états liés à une particule de même nombre quantique i que l'état individuel $|\Psi_{\gamma}\rangle$.

Cette description des états à N nucléons, différente de celle adoptée en (II.1.2), conduit à une formulation qui présente essentiellement deux inconvénients :

1- On doit résoudre l'équation de Schrödinger sur une base non orthogonale. Les termes correctifs d'antisymétrisation apparaissent alors globalement sous la forme d'une matrice de norme $N_{\gamma\gamma}(r, r')$; et non séparément, comme en (II-44), pour chaque état lié à une particule de même nombre quantique i que l'état individuel de diffusion.

2- N'ayant pas séparé dans l'état individuel de diffusion $|\psi_{\gamma}\rangle$ (II-76) les composantes liées de celles dans le continu, l'étude du couplage entre les configurations à N-1 nucléons liés et un dans le continu avec les états liés à N nucléons, est malaisée.

La formulation (II.3), que nous avons adoptée, est par contre bien adaptée à l'étude de l'approximation qui consiste pour certaines voies de réaction fermées, à négliger les composantes dans le continu en se limitant à celles à N nucléons liés. On approche ainsi ces voies de réaction par des états quasi-liés correspondant à des états excités du noyau cible plus la particule incidente liée.

Montrons qu'avec ces approximations, la formulation précédente conduit à des équations du même type que les équations (II-42) que nous avons utilisées. Pour cela, considérons un exemple simple d'équations (II-81) avec deux voies de réaction couplées correspondant aux fonctions d'onde radiales de diffusion y et z satisfaisant des équations du type :

$$\left\{ \begin{array}{l} (E_y + h - E) y + V y + W z = 0 \\ (E_z + h - E) z + V z + W y = 0 \end{array} \right. , \quad \begin{array}{l} \text{(II-82)} \\ \text{(II-83)} \end{array}$$

où h est le hamiltonien à un corps, V et W sont des potentiels (éventuellement non locaux), calculés à partir des forces à deux corps. Les énergies E_y et E_z sont celles des états γ_y et γ_z de la cible, définissant les voies considérées.

Négligeant la composante dans le continu de z , nous approchons cette voie de réaction par un état quasi-lié :

$$z \approx a f , \quad \text{(II-84)}$$

où a est un coefficient à déterminer, et f une fonction d'onde radiale d'état lié, telle que la configuration à N nucléons liés $|\widetilde{\gamma}_Z, f\rangle_n$ soit état propre du hamiltonien vrai H , d'énergie E_0 . Montrons que l'on peut alors remplacer l'équation de diffusion (II-83) par une équation linéaire intégrale en a et y , semblable à (II-42a). Pour cela, multiplions l'équation (II-83) par f et intégrons sur la variable r :

$$\int_0^\infty r^2 dr f (E_Z + k + V - E) \zeta + \int_0^\infty r^2 dr f W y = 0 . \quad (\text{II-85})$$

Le premier terme fait apparaître l'action de H sur l'état quasi-lié $|\widetilde{\gamma}_Z, f\rangle_n$, cette équation s'écrit donc :

$$(E_0 - E) a + \int_0^\infty r^2 dr f W y = 0 , \quad (\text{II-86})$$

ce qui est bien une équation du type (II-42a).

Notons enfin, un autre inconvénient de la description (II-75) des états à N nucléons, à savoir : les états quasi-liés sont définis par le produit tensoriel antisymétrisé d'états de la cible par un état lié à une particule. Une telle représentation de ces états liés à N nucléons n'est pas nécessairement bien adaptée, en particulier, dans le cas d'un mélange de configurations important comme pour le F^{19} que nous étudierons au chapitre V. En effet, les états excités du F^{20} ne s'identifient pas simplement avec des états de la cible de F^{19} plus un neutron lié.

En conclusion, la formulation présentée au début de ce chapitre, et conduisant aux équations (II-42) est bien adaptée à la description microscopique de la diffusion d'un nucléon par un noyau, en permettant :

- 1- un traitement aisé de l'antisymétrisation complète de l'ensemble cible plus nucléon incident,
- 2- une étude du couplage avec certaines voies de réaction fermées, correspondant à des états excités de la cible, pour lesquelles on néglige les composantes dans le continu en les approchant par des états quasi-liés. Ces états correspondent à des résonances interprétées habituellement dans le modèle du noyau composé.