



HAL
open science

Description microscopique des propriétés moyennes des noyaux

P. Quentin

► **To cite this version:**

P. Quentin. Description microscopique des propriétés moyennes des noyaux. École thématique. Ecole Joliot Curie "La physique nucléaire du laboratoire aux étoiles", Maubuisson, (France), du 10-15 septembre 1990 : 9ème session, 1990. cel-00647700

HAL Id: cel-00647700

<https://cel.hal.science/cel-00647700>

Submitted on 2 Dec 2011

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

DESCRIPTION MICROSCOPIQUE
DES PROPRIETES MOYENNES DES NOYAUX

Philippe QUENTIN

Laboratoire de Physique Théorique⁺, Université de Bordeaux I,
Rue du Solarium, 33170 GRADIGNAN, FRANCE

et

C.S.N.S.M.⁺⁺, Bât. 104-108, 91405 ORSAY-Campus, FRANCE*

-
- (+) Unité de recherche associée au C.N.R.S.
(++) Unité de recherche propre de l'I.N2.P3 (CNRS)
(*) Adresse actuelle.
-

RESUME

Dans une première leçon, nous montrerons en quoi l'approximation Hartree-Fock (avec traitement des corrélations d'appariement à la BCS) fournit une description microscopique possible des propriétés statiques des noyaux. Nous étudierons en particulier, dans le cadre d'un développement de la fonctionnelle énergie autour de la densité réduite Hartree-Fock, les théorèmes de Koopmans et de Strutinsky. La seconde leçon développera une approche des propriétés moyennes nucléaires dans le cadre de l'approximation semi-classique de Wigner-Kirkwood. Les relations fonctionnelles de Thomas-Fermi étendues seront présentées dans leur principe. Enfin, un bref survol des approches semi-classiques sera effectué dans la troisième leçon. Il apparaîtra alors possible de retrouver microscopiquement le modèle de la goutte liquide et de restaurer à une très bonne approximation les effets de couche. L'extension de ces approches à température finie sera également abordée.

I - INTRODUCTION

Notre but est de décrire microscopiquement des propriétés moyennes. Pour certains, l'adjectif *moyenne* s'opposerait d'emblée à l'adverbe *microscopiquement*, en quelque sorte sur le mode d'une opposition entre phénoménologique et théorique. Il n'en est rien et c'est le but avoué de ce cours de montrer que rien n'empêche de faire intelligemment une moyenne de résultats microscopiques

Une description microscopique de propriétés moyennes suppose :

- 1) que l'on se place au niveau des interactions entre constituants élémentaires (*) (d'où il est clair que toute microscopie est phénoménologique au minimum à la mesure du choix des constituants élémentaires) ;
- 2) que l'on soit capable d'effectuer de tels calculs de façon systématique (en effet, pour faire une moyenne valable, il faut une statistique suffisante) ;
- 3) que l'on ait une procédure fondée physiquement pour effectuer une telle moyenne.

La condition 1) ci-dessus écarte a priori toute approche phénoménologique du type modèle de la goutte liquide ou encore ce qu'on appelle parfois la méthode macroscopique-microscopique utilisant de façon ad hoc le développement de l'énergie à la Strutinsky ¹⁾ (on verra cependant plus loin que ce développement peut être défini et utilisé de façon authentiquement microscopique).

La condition 2) pour sa part, écarte a priori dans l'état actuel de l'art numérique, des approches du type calculs de modèle en couches. En effet de tels calculs sont restreints pour l'instant au voisinage plus ou moins immédiat des nombres magiques, malgré des progrès récents tout à fait impressionnants ²⁾.

En revanche, l'approximation de Hartree-Fock, incluant un traitement supplémentaire adéquat des corrélations d'appariement, utilisant des interactions effectives (**) phénoménologiques a prouvé sa capacité à traiter tous les noyaux de façon extensive et satisfaisante (par une revue des possibilités de tels calculs, cf par exemple la référence 5). Notons au passage que de tels calculs ont été rendus possibles à partir de travaux de pionniers ^{6,7)} effectués à Orsay au début des années 1970.

Ainsi qu'on le verra plus loin, l'approximation de Hartree-Fock entraîne la définition d'un potentiel à un corps attractif dans le cas nucléaire qu'on appelle champ moyen. Or il est un fait bien connu en Mécanique Quantique, que pour des potentiels attractifs (au moins -en général- pour des valeurs faibles des nombres quantiques associés à l'énergie) on observe un groupement des niveaux d'énergie associés, qu'on appelle "couches". Si K est l'énergie cinétique et $H = K + V$ le Hamiltonien, l'énergie minimale $E(N)$ d'un système de N particules (H c'est-à-dire V étant supposé indépendant de N), s'écrira :

$$E(N) = \sum_{i=1}^N e_i \quad (1)$$

(*) c'est en effet le sens courant du terme microscopique appliqué à une théorie physique (par exemple la mécanique statistique comme thermodynamique microscopique).

(**) Interaction effective s'oppose ici à interaction réaliste, en tant que la première est une interaction dérivée de la seconde par "habillage" des effets de milieu (cf par exemple les références 3 et 4).

où la sommation des énergies propres e_1 de H s'effectuera pour les N énergies les plus basses. De telle sorte que l'on obtiendra :

$$E(N+1) = E(N) + e_{N+1} \quad (2)$$

Compte tenu de l'existence de couches (cf figure 1), on aura avec les notations de la figure 1 :

$$|e_a| \sim |e_{a'}| > |e_b| \quad (3)$$

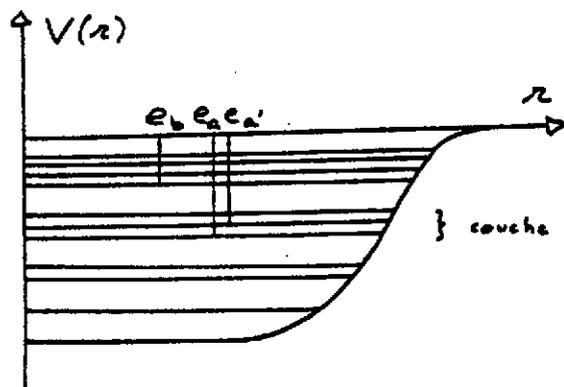


Figure 1 : Représentation schématique de l'existence de couches dans un potentiel $V(r)$ attractif où r est la distance au centre du potentiel.

Ce fait se traduit en Physique Atomique (où V est le champ noyau-électron dans une description simplifiée où l'on néglige l'écrantage des interactions électron-électron) à de brusques variations du potentiel d'ionisation (cf la figure 2 tirée de la référence 8), conduisant à la définition des nombres magiques (nombres autour desquels on passe d'une couche à une autre) et donc à la classification périodique des éléments de Mendeleev.

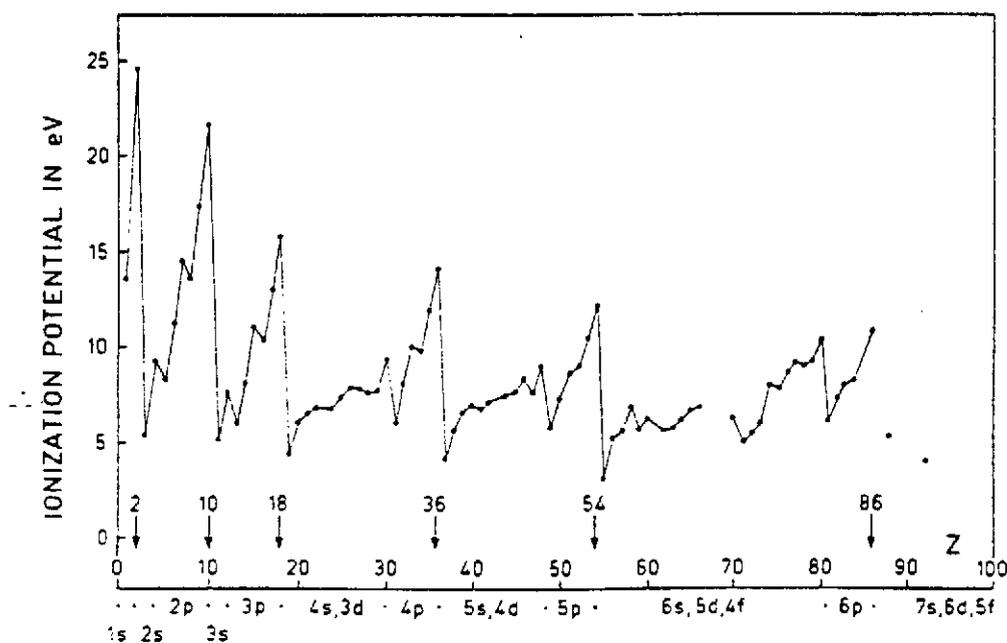


Figure 2 : Potentiel d'ionisation (en eV) en fonction du nombre d'électrons Z de l'atome. Les flèches indiquent les nombres magiques.

Cette figure est tirée de la référence 8.

De tels phénomènes sont également observés en Physique Nucléaire où l'équivalent du potentiel d'ionisation est l'énergie de séparation du dernier nucléon. Comme on le voit en effet sur la figure 3, le nombre de neutrons $N = 126$ est magique autour du plomb ($Z = 82$), puisque l'énergie de séparation des deux derniers neutrons S_{2n} y expérimente une forte discontinuité (*). A ces variations de l'énergie on peut montrer théoriquement et expérimentalement (par exemple sur les déplacements isotopiques) que sont associées des variations plus ou moins brusques de la distribution de fermions, au-delà de la variation d'échelle en $A^{1/3}$ pour un système saturant de A fermions (en fait, outre l'extension spatiale différente on observe également des variations de la déformabilité).

Une façon de faire disparaître ces fluctuations et donc d'accéder à des propriétés moyennes -en ce sens précis- consiste à faire une approximation semi-classique, c'est-à-dire : exprimer les résultats quantiques sous forme de développement en puissance de \hbar et tronquer ce développement en n'en retenant que les premiers termes. Un tel développement autour de $\hbar = 0$ revient en fait à se placer dans des conditions de nombre quantique associé à l'énergie d'excitation E^* , élevé ($E^* \gg$ un quantum élémentaire proportionnel à \hbar). On peut montrer explicitement dans certains cas (cf par exemple la référence 9) que cela est équivalent à un élargissement de la densité spectrale : la somme de fonctions delta est remplacée par une somme de fonctions à largeur finie. Pour une largeur suffisamment élevée, on élimine ainsi les fluctuations quantiques.

C'est dans le cadre d'un tel développement, appelé développement de Wigner-Kirkwood, appliqué aux solutions Hartree-Fock que nous nous placerons pour décrire microscopiquement les propriétés moyennes nucléaires. Le chapitre II sera consacré à un bref rappel de la nature et des résultats de l'approximation de Hartree-Fock en Physique Nucléaire. Dans le chapitre III nous présenterons rapidement l'approximation semi-classique à la Wigner-Kirkwood et les relations fonctionnelles de Thomas-Fermi étendues. Nous esquisserons enfin au chapitre IV les résultats récents obtenus dans la détermination microscopique des propriétés moyennes des noyaux.

(*) Cette énergie de séparation S_{2n} est obtenue par simple différence des énergies de liaison. L'interprétation de S_{2n} en termes de valeurs propres d'un Hamiltonien à 1 corps H repose sur l'équation (2) que l'on verra plus tard être plus générale que ce qu'il y paraît pour l'instant.

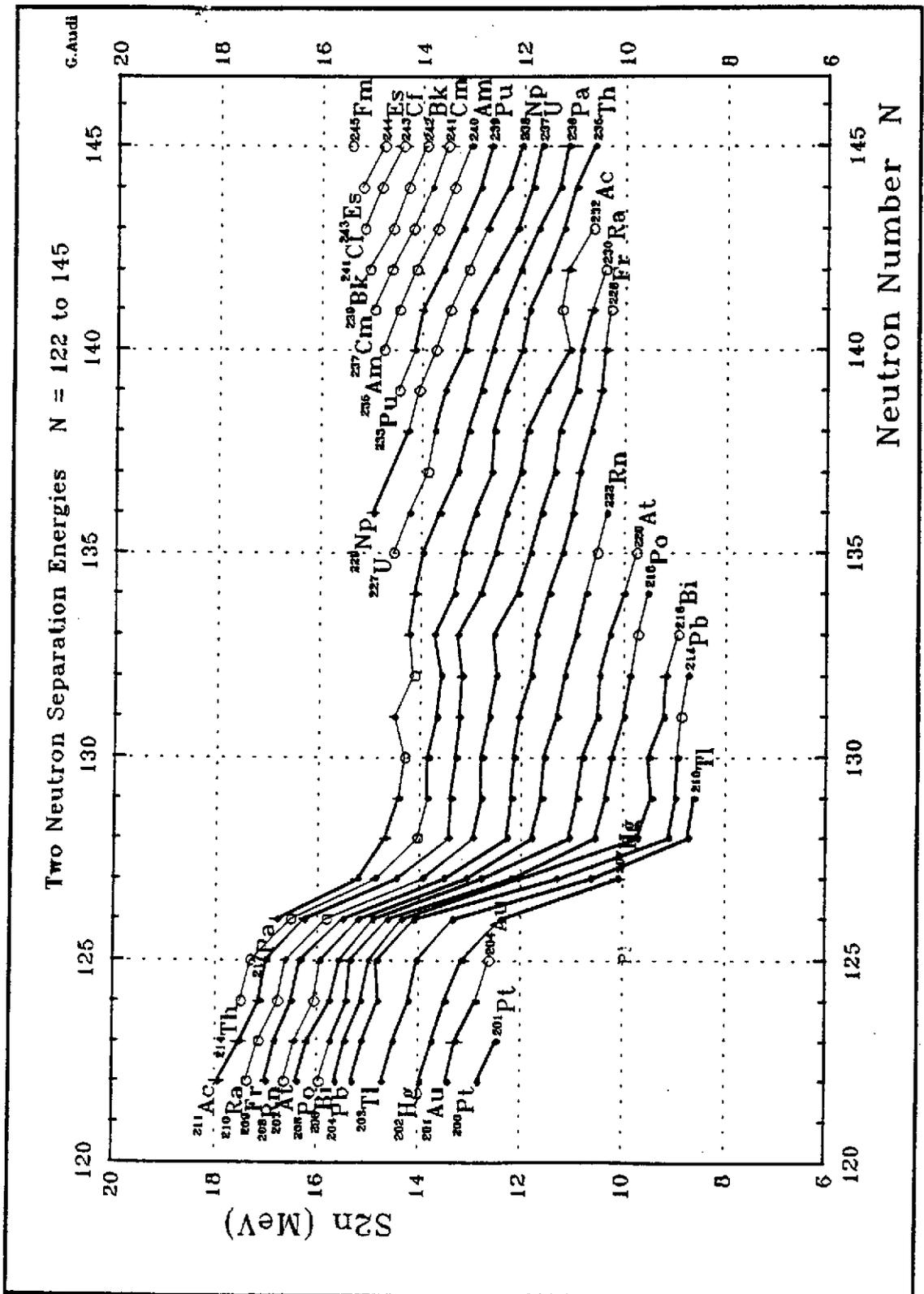


Figure 3 : Energie de séparation de deux neutrons S_{2n} (en MeV) en fonction du nombre de neutrons N pour différentes valeurs de Z correspondant à des éléments lourds (les isotopes sont connectés par des lignes en traits pleins).

Cette figure est due à G. Audi (Communication privée).

II - L'approximation de particules indépendantes (ou approximation de Hartree-Fock)

Dans l'approximation de particules indépendantes, l'adjectif *indépendantes* doit être pris au sens des probabilités indépendantes, c'est-à-dire où les probabilités pour N particules sont factorisées en produits de N probabilités pour chacune des particules. Sachant que (en ne s'attachant qu'aux variables d'espace \vec{r}_1), la probabilité de présence en $(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$ est donnée par $|\psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)|^2$, une condition suffisante pour qu'on ait cette factorisation est bien évidemment :

$$\psi_0(\{\vec{r}_i\}) = \prod_{i=1}^N \varphi_i(\vec{r}_i) \quad (4)$$

Pour satisfaire au principe de Pauli qui postule que tout état physique de fermions doit être état propre avec la valeur propre 1 de l'antisymétriseur \mathcal{A}_N de N particules (état complètement antisymétrique) on prendra $\mathcal{A}_N \psi_0$ au lieu de ψ_0 , c'est-à-dire le déterminant de Slater :

$$\psi_0(\{\vec{r}_i\}) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \varphi_1(\vec{r}_1) & \dots & \varphi_N(\vec{r}_1) \\ \varphi_1(\vec{r}_N) & \dots & \varphi_N(\vec{r}_N) \end{vmatrix} \quad (5)$$

Pour obtenir la solution de l'équation de Schrödinger stationnaire associée au Hamiltonien H

$$H |\psi\rangle = E |\psi\rangle \quad (6)$$

on peut appliquer le principe variationnel de Ritz

$$\delta E[\psi] = 0 \quad (7)$$

où la fonctionnelle E[\psi] est définie à partir de |\psi\rangle comme

$$E[\psi] = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (8)$$

L'approximation de Hartree-Fock consistera à résoudre (7) en limitant l'espace variationnel au sous-ensemble (*) des déterminants de Slater définis en (5).

Dans les appendices A et B nous rappelons les définitions et les propriétés des opérateurs à 1 et 2 corps d'une part et de la matrice densité réduite à un corps ρ d'autre part.

En Physique Nucléaire, on prendra pour Hamiltonien H :

$$H = K + v \quad (9)$$

(*) hélas ! ce n'est pas un sous-espace : la somme de deux déterminants de Slater n'est pas un déterminant de Slater !

où K est l'énergie cinétique (opérateur à 1 corps) et v l'interaction nucléon-nucléon (opérateur à 2 corps). Pour un déterminant de Slater $|\phi\rangle$, défini par sa matrice densité ρ on aura :

$$\langle \phi | H | \phi \rangle = E[\rho] \quad (10)$$

où (compte tenu des équations (A4, A5)) :

$$E[\rho] = \text{tr } K\rho + 1/2 \text{tr tr } \rho \tilde{v} \rho \quad (11).$$

L'application du principe variationnel approché conduira donc à annuler la variation de E en fonction de ρ . Cependant ρ étant la matrice densité associée à un déterminant de Slater normé est soumis à deux contraintes (équations (B2) et (B7)). Introduisant la matrice de multiplicateurs de Lagrange Λ et un autre tel multiplicateur λ , on cherchera donc à annuler les variations de E' défini par :

$$E' = E[\rho] - \text{tr } \Lambda(\rho^2 - \rho) - \lambda \text{tr } \rho \quad (12)$$

Ceci conduit à :

$$K + \text{tr } \rho \tilde{v} - \Lambda\rho - \rho\Lambda + \Lambda - \lambda = 0 \quad (13)$$

où $\text{tr } \rho \tilde{v}$ est un opérateur à 1 corps dont il est aisé de voir en prenant les éléments de matrice qu'il n'est rien d'autre que le potentiel Hartree-Fock \mathcal{V} défini pour des états à 1 corps quelconque i et j par :

$$\langle i | \mathcal{V} | j \rangle = \sum_{\lambda \text{ occupés}} \langle i\lambda | \tilde{v} | j\lambda \rangle \quad (14).$$

On appellera Hamiltonien de Hartree-Fock, l'opérateur h :

$$h = K + \mathcal{V} \quad (15).$$

Prenant le commutateur avec ρ , de l'équation variationnelle (13), on obtient :

$$[h, \rho] - [\Lambda\rho, \rho] - [\rho\Lambda, \rho] + [\Lambda, \rho] = 0 \quad (16)$$

qui, puisque :

$$[\Lambda\rho, \rho] + [\rho\Lambda, \rho] = [\Lambda, \rho] \quad (17)$$

à cause de l'équation (B7), se simplifie en :

$$[h, \rho] = 0 \quad (18).$$

Donc h et ρ ont un jeu commun de vecteurs propres. C'est-à-dire que les états propres occupés $|\lambda\rangle$ de ρ apparaissant dans l'équation (B5) sont solutions de l'équation non linéaire (h dépendant de ρ via \mathcal{V}) :

$$h | \lambda \rangle = e_{\lambda} | \lambda \rangle \quad (19)$$

appelée équation de Hartree-Fock.

Dans ce qui suit nous allons brièvement montrer en quoi une interaction effective, l'interaction de Skyrme SIII ajustée il y a presque vingt ans essentiellement sur les propriétés de saturation de 3 noyaux sphériques, est capable de décrire quantitativement les propriétés nucléaires. Cette interaction phénoménologique n'a que six paramètres valables pour toute la table

des noyaux (pour les corrélations d'appariement s'ajoutent deux paramètres supplémentaires présentement ajustés pour une région de masse donnée).

Tout d'abord, les propriétés de saturation des noyaux sont parfaitement reproduites ¹⁰⁾. Pour les noyaux magiques, les énergies de liaison B sont calculées à moins de 2 MeV près, du noyau ¹⁶O (B ≈ 128 MeV) au noyau ²⁰⁸Pb (B ≈ 1636 MeV). Les rayons de charge r_c de ces mêmes noyaux sont également bien évalués puisqu'ils reproduisent les données à environ 0.05 fm près (du noyau ¹⁶O où r_c = 2.73 fm au noyau ²⁰⁸Pb où r_c = 5.50 fm). Les propriétés de déformation (moments quadrupolaires ou hexadécapolaires) des noyaux bien déformés de la région des terres rares ¹¹⁾ ou de la région des actinides ¹²⁾ sont quantitativement bien décrites par de tels calculs. De façon plus générale, l'ensemble des propriétés spatiales des solutions Hartree-Fock (plus BCS) sondées par des opérateurs à 1 corps est contenu dans la matrice densité ρ, notamment dans ses éléments de matrice diagonaux :

$$\rho(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \rho | \vec{r} \rangle = \sum_{\lambda \text{ occupés}} |\psi_{\lambda}(\vec{r})|^2 \quad (20).$$

La reproduction des données de diffusion d'électrons par la densité de charge calculée selon l'équation (20) après convolution par le facteur de forme du proton est généralement très bonne ¹⁰⁾.

Au-delà des propriétés statiques, on s'intéresse aux propriétés d'excitations notamment collectives. Pour ce faire, on peut calculer la déformabilité des noyaux en effectuant des calculs HF sous contrainte. Un exemple de tels calculs extensifs ¹³⁾ pour 17 isotopes pairs du Fer -de A = 52 (N=Z=26) à A = 84 (N=58)- est présenté sur la figure 4 où l'énergie totale E est portée en fonction du moment quadrupolaire (axial) de masse Q. On voit qu'en fonction du remplissage de neutrons, on obtient des noyaux rigidelement sphériques (pour les nombres magiques N = 28, 50) des noyaux mous, des noyaux déformés oblate et prolata ainsi que l'amorce d'un minimum superdéformé (pour A = 66) ^(*).

Les énergies de séparation calculées sont en bon accord avec les données expérimentales là où ces dernières sont connues. Bien entendu, la seule donnée d'énergies potentielles est insuffisante, il faut connaître également les paramètres d'inertie. Ces derniers ont été également calculés ¹⁵⁾ (sans autres paramètres que ceux de la force de Skyrme SIII) pour les 5 modes quadrupolaires qui sont connus depuis Bohr et Mottelson ¹⁶⁾ comme étant ceux qui dominent la dynamique collective à basse énergie d'excitation. Ayant ainsi

(*) L'isotone ⁵⁶Ni présente un minimum superdéformé beaucoup plus marqué ⁽¹⁴⁾

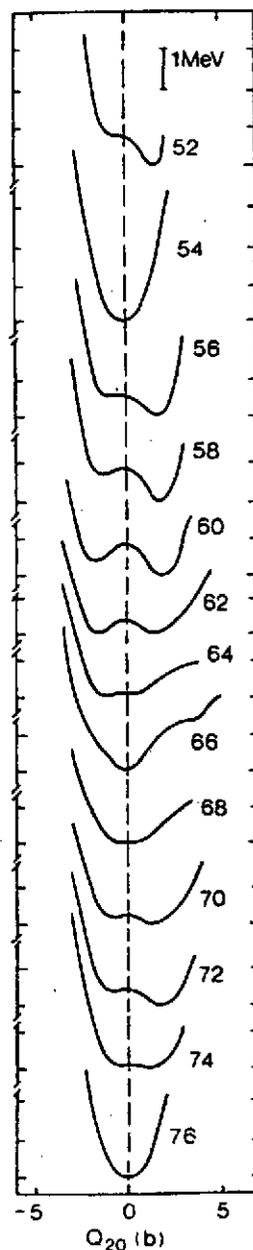


Figure 4 :

Courbes d'énergies de déformation d'isotopes du Fer en fonction du moment quadrupolaire Q_{20} de la distribution de masse, pour des nombres totaux de nucléons A allant de 52 à 76, de haut en bas. Cette figure est tirée de la référence 13).

déterminé microscopiquement les paramètres du Hamiltonien de Bohr ¹⁷⁾, sa diagonalisation ¹⁸⁾ conduit à des spectres de noyaux transitionnels en excellent accord avec les données expérimentales comme on le voit sur la figure 5 dans le cas ¹⁹⁾ du noyau ¹⁹⁰Pt.

Autour de la solution d'équilibre, le noyau peut effectuer des vibrations harmoniques (résonances géantes) comme la résonance géante isovectorielle dipolaire. Les propriétés de cette dernière sont bien reproduites avec l'interaction de Skyrme SIII dans des calculs RPA explicites ¹⁹⁾ ou en termes de règles de somme RPA ²⁰⁾ pour les noyaux sphériques. Dans le cadre du modèle rotor plus une (ou deux) quasi-particule(s), on peut décrire ¹⁶⁾ les états de basse énergie des noyaux bien déformés impairs (ou impair-impairs). La parfaite reproduction de l'évolution des têtes de bande pour un certain nombre

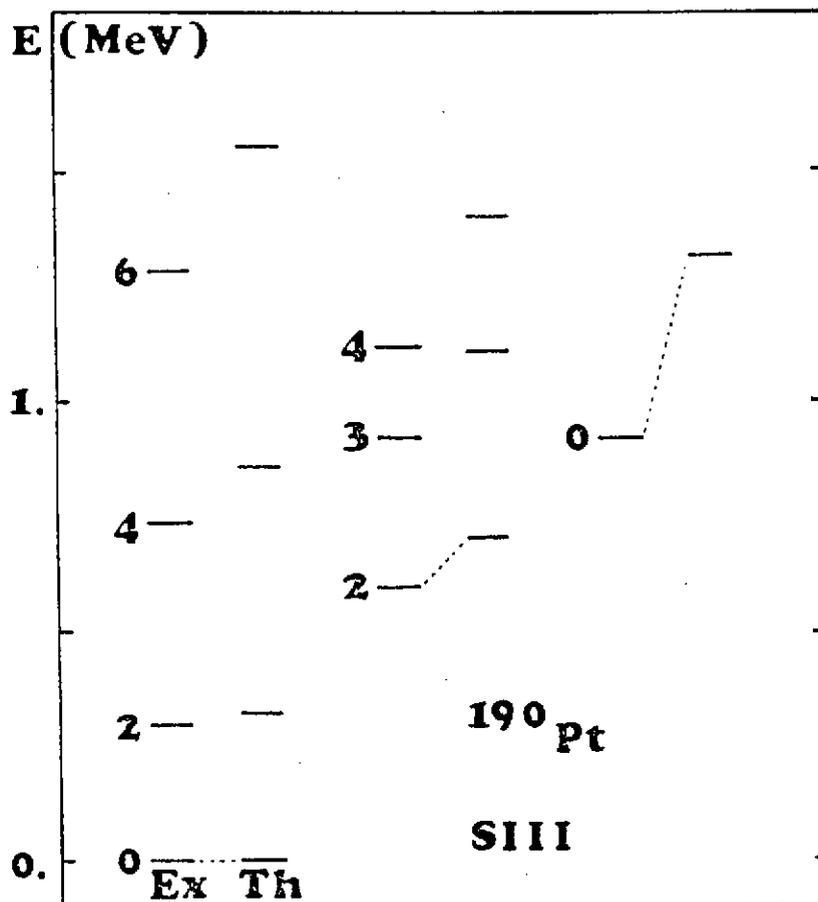


Figure 5 : Comparaison entre spectres à basse énergie expérimental et calculé dans le noyau ^{190}Pt . L'interaction de Skyrme SIII a été utilisée. Cette figure est tirée de la référence 19).

d'isotopes impairs de l'Uranium ²¹⁾ indique clairement la qualité du spectre des états Hartree-Fock correspondant à l'interaction de Skyrme SIII. Ceci est confirmé par l'étude dans ce même cadre de noyaux impair-impairs ²²⁾. Dans certains cas (éléments de matrice de type Newby, ou Gallagher-Moskowsky), on peut relier les énergies d'excitation mesurées à des éléments de matrice de l'interaction effective. Comme on le voit dans les tables 1 et 2, l'accord obtenu avec l'interaction de Skyrme SIII est tout à fait remarquable dans l'ensemble.

Table 1 : Eléments de matrice du type Gallagher-Moskowsky, expérimentaux et théoriques (en keV). Une valeur moyenne est portée dans les cas où la même configuration est considérée dans plusieurs noyaux.

Configuration proton	Configuration neutron	Noyau	Exp.	Théor.
$1/2^+$ [400]	$1/2^+$ [631]	^{238}Np	88	8
$1/2^+$ [530]	$7/2^-$ [743]	^{234}Pa	79	84
	$1/2^+$ [631]	^{238}Np	102	52
$5/2^+$ [642]	$1/2^+$ [631]	^{238}Np	82	51
	$5/2^+$ [622]	$^{238}\text{Np}, ^{242}\text{Am}$	36	70
$5/2^-$ [523]	$1/2^-$ [501]	$^{240}, ^{242}\text{Am}$	45	40
	$1/2^+$ [631]	$^{238}\text{Np}, ^{240}, ^{242}, ^{244}\text{Am}$	62	70
	$1/2^+$ [620]	^{242}Am	22	22
	$5/2^+$ [622]	$^{238}\text{Np}, ^{240}, ^{242}, ^{244}\text{Am}$	6	12
	$7/2^+$ [624]	^{244}Am	200	341

Table 2 : Eléments de matrice du type Newby, expérimentaux et théoriques (en keV). Une valeur moyenne est portée dans les cas où la même configuration est considérée dans plusieurs noyaux.

Configuration proton	Configuration neutron	Noyau	Exp.	Théor.
$1/2^+$ [400]	$1/2^+$ [631]	^{238}Np	-3	-8
$1/2^-$ [530]	$1/2^+$ [631]	$^{234}, ^{236}\text{Pa}, ^{238}\text{Np}$	-44	26
$5/2^+$ [642]	$5/2^+$ [622]	$^{238}\text{Np}, ^{242}\text{Am}$	-54	-29
$5/2^-$ [523]	$5/2^+$ [622]	$^{238}\text{Np}, ^{240}, ^{242}, ^{244}\text{Am}$	26	27
$7/2^+$ [633]	$7/2^+$ [624]	^{244}Am	33	63
	$7/2^+$ [613]	^{250}Bk	-25	-19

Ce qui précède ne constitue qu'un exemple de comparaison entre données expérimentales et calculs self-consistants. On aurait pu montrer le même type d'accord avec une interaction due à Gogny ⁷⁾, dont la partie centrale est constituée par deux gaussiennes. Le but ici était seulement de montrer les capacités prédictives de ce type d'approche dans la description des propriétés nucléaires statiques et à relativement basse énergie d'excitation.

Nous allons maintenant démontrer et discuter deux théorèmes concernant l'énergie d'un déterminant de Slater : le théorème de Koopmans et le théorème de Strutinsky. Dans les deux cas, il s'agit d'un développement de la fonctionnelle énergie. Partant de l'expression de $E[\rho]$ donnée en (11) et écrivant ρ sous la forme :

$$\rho = \rho_0 + \delta\rho$$

on obtient :

$$E[\rho] = E[\rho_0] + \text{tr} (K + V_0) \delta\rho + 1/2 \text{trtr} \delta\rho \tilde{v} \delta\rho \quad (21)$$

où V_0 est le potentiel Hartree-Fock ($\text{tr} \tilde{v} \rho_0$) associé à ρ_0 . Similairement, on aurait :

$$E[\rho] = E[\rho_0] + \text{tr} (K + V) \delta\rho - 1/2 \text{trtr} \delta\rho \tilde{v} \delta\rho \quad (22).$$

Il est clair que si ρ et ρ_0 sont des déterminants de Slater correspondant à N particules, donc satisfaisant aux deux conditions (B2) et (B7), le caractère variationnel de ρ_0 pour E' , définie en (12), conduit à l'annulation du terme linéaire en $\delta\rho$ dans (21) ou (22).

* Théorème de Koopmans

Considérons une densité ρ_0 associée à un déterminant de Slater $|\phi_0\rangle$ correspondant à N particules. On définit ρ comme la densité associée au déterminant de Slater $|\phi\rangle$ ayant $N+1$ particules, construit à partir des N fonctions d'onde à 1 corps définissant $|\phi_0\rangle$ et de la fonction d'onde φ_{N+1} état propre de $K + V_0$ non occupé dans $|\phi_0\rangle$, d'énergie propre e_{N+1} . Alors $\delta\rho$ est donné par :

$$\delta\rho = |\varphi_{N+1}\rangle \langle\varphi_{N+1}| \quad (23).$$

Il est clair que la condition (B2) satisfaite par ρ_0 avec N particules n'est pas satisfaite par ρ . En conséquence, dans le développement (21) on aura un terme du premier ordre non nul. On obtient aisément :

$$(K + V_0) \delta\rho = e_{N+1} \delta\rho \quad (24)$$

et à cause du caractère antisymétrique de \tilde{v} :

$$\delta\rho \tilde{v} \delta\rho = 0 \quad (25).$$

L'énergie associée à $|\phi\rangle$ s'écrira alors :

$$E[\rho] = E[\rho_0] + e_{N+1} \quad (26).$$

Le résultat est connu sous le nom de théorème de Koopmans. Il généralise l'équation (2) obtenue avec des seuls potentiels à 1 corps. Dans le cadre du formalisme Hartree-Fock, ce résultat est un résultat approché, car en général le champ Hartree-Fock associé à N+1 particules est différent du champ V_0 , on dit que la dernière particule "polarise" ce champ. En fait, dans des calculs réalistes ¹⁰⁾, on s'aperçoit que :

$$E(N+1) = E(N) + 1/2 (e_{N+1}^{(N)} + e_{N+1}^{(N+1)}) \quad (27)$$

où $e_{N+1}^{(N)}$ ($e_{N+1}^{(N+1)}$ respectivement) note l'état propre du Hamiltonien de Hartree-Fock pour N (N+1 respectivement) particules. Bien entendu, le théorème de Koopmans est à la base de la définition "expérimentale" des énergies Hartree-Fock à un corps e_{N+1} . Indépendamment des effets de polarisation mentionnés plus haut, il faut mentionner que la lecture de $\Delta E = E(N+1) - E(N)$ comme un état propre du Hamiltonien de Hartree-Fock, repose sur la validité de l'approximation de Hartree-Fock. En particulier, près des noyaux magiques, des effets importants de couplage entre les degrés de liberté d'une particule individuelle avec les vibrations de l'ensemble du noyau entraînent que ΔE en peut être assimilée que grossièrement à une énergie propre du Hamiltonien de Hartree-Fock ²³⁻²⁶⁾.

* Théorème de Strutinsky

On prendra maintenant pour ρ la densité d'une solution Hartree-Fock à N particules et pour ρ_0 (qu'on appellera ici $\bar{\rho}$) son approximation semi-classique. Contrairement à ce qui était le cas précédemment, on aura bien :

$$\text{tr } \bar{\rho} = N \quad (28)$$

mais en revanche :

$$\bar{\rho}^2 \neq \bar{\rho} \quad (29).$$

Le développement (22) de l'énergie $E[\rho]$ aura donc bien un terme du premier ordre, et à partir de (21) on écrira :

$$E[\rho] = E[\bar{\rho}] + \text{tr} (K + \bar{V}) \delta\rho + 1/2 \text{tr } \delta\rho \tilde{v} \delta\rho \quad (30)$$

où \bar{V} est le potentiel de Hartree-Fock semi-classique

$$\bar{V} = \text{tr } \tilde{v} \bar{\rho} \quad (31).$$

Le terme du premier ordre δE est appelé énergie de correction de couches. Il peut s'écrire ($|\mu\rangle$ étant un état propre de $h = K + \bar{V}$, d'énergie propre e_μ):

$$\delta E = \text{tr } \bar{h} \delta\rho = \sum_{\mu} e_{\mu} (\rho_{\mu} - \bar{\rho}_{\mu}) \quad (32)$$

où $\rho_{\mu} = \langle \mu | \rho | \mu \rangle$ prend les valeurs 1 ou 0 suivant que l'état $|\mu\rangle$ est occupé ou non alors que $\bar{\rho}_{\mu}$ suit une loi de distribution "douce" (valant 1 pour e_{μ}

très inférieur au potentiel chimique λ et 0 pour e_μ très supérieur à λ). Cette énergie δE peut donc être considérée comme la fluctuation autour de sa valeur moyenne $\bar{S} = \text{tr } \bar{h} \bar{\rho}$ de la somme S des énergies propres des états $|\mu\rangle$ occupés :

$$S = \sum_{\mu \text{ occupés}} e_\mu \quad (33)$$

et donc :

$$\delta E = S - \bar{S} \quad (34).$$

Il est donc clair que δE sera négative quand le potentiel chimique λ appartiendra à une région de faible densité spectrale pour \bar{h} (situation correspondant à un nombre magique de particules, c'est-à-dire au début ou à la fin d'une couche). Elle sera en revanche positive quand λ sera situé en milieu de couches. Ce terme correctif s'ajoute (au terme de second ordre en $\delta\rho$ près) à $E[\bar{\rho}]$ pour contribuer à l'essentiel de $E[\rho]$. Il est important de noter que cette énergie moyenne $E[\bar{\rho}]$ qui est par construction lentement variable en fonction du nombre de particules (donc insensible à la position de λ à l'intérieur ou au bord d'une couche). Ce supplément de stabilité explique pourquoi les noyaux magiques (c'est-à-dire ayant des nombres de particules magiques) seront sphériques ^{27,28}. En effet, la forte dégénérescence des niveaux due à la symétrie sphérique ($2j + 1$ niveaux pour un niveau de moment angulaire j) est levée quand cette symétrie est brisée et en conséquence $|\delta E|$ diminue (cet effet s'ajoutant en le dominant à une lente augmentation de $E[\bar{\rho}]$ quand le noyau se déforme). Il revient à Strutinsky ²⁹ d'avoir remarqué que cette situation de magicité pouvait également exister (quoique dans une moindre mesure qu'à la sphéricité) pour des potentiels déformés, voire très déformés. Cette remarque a été à la base de l'explication ³⁰ qu'il a fourni du phénomène d'isomérisme de forme (cf par exemple l'existence de noyaux super déformés à bas spin ¹⁴).

Ce qu'il est convenu d'appeler la "méthode de Strutinsky" comprend plusieurs éléments. Fondamentalement, elle s'appuie sur le théorème donné par l'équation (30) supplémenté par les hypothèses suivantes :

- a) $E[\bar{\rho}]$ est donnée par la formule de la goutte liquide par exemple dans la paramétrisation de la référence 28 ;
- b) le terme du premier ordre δE donné par l'expression de l'équation (34) peut être calculé en remplaçant h par un potentiel à un corps phénoménologique (modèle de Nilsson, Saxon-Woods, etc...) ;
- c) le terme d'ordre 2 dans le développement (30) est négligeable ;
- d) une méthode pratique pour calculer la valeur moyenne \bar{S} est proposée ³².

Partant d'une solution Hartree-Fock ρ et définissant de façon self-consistante la matrice densité $\bar{\rho}$ ³³, on a pu montrer explicitement ³³⁻³⁵

pour une grande variété de noyaux et de déformations que les hypothèses a), b) et c) précédentes étaient fondées. Ceci est en particulier illustré sur la figure 6 où l'énergie Hartree-Fock $E[\rho]$ (traits pleins légers) est pratiquement non discernable significativement de $E[\bar{\rho}]$, appelée sur la figure \tilde{E} ,

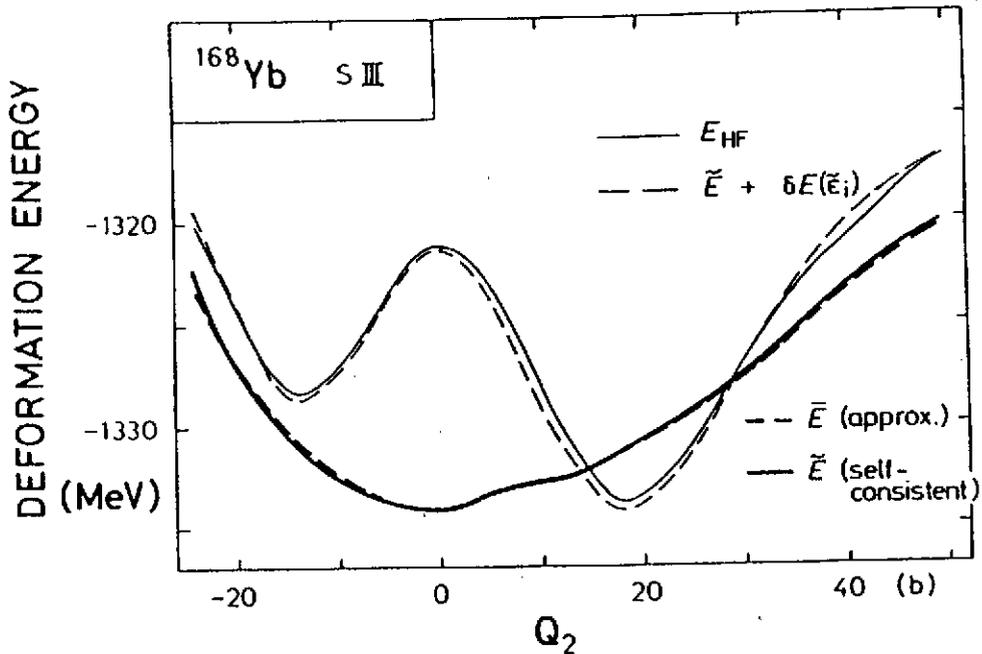


Figure 6

Comparaison entre énergies de déformation self-consistantes et semi-classiques ainsi qu'avec leurs approximations dans le noyau ^{168}Yb calculé avec l'interaction de Skyrme SIII. Cette figure est tirée de la référence 33).

augmenté de δE . La petitesse du terme $1/2 \text{trtr } \delta\rho \tilde{V} \delta\rho$ est également patente pour les résultats présentés dans la table 3. Notons enfin que le rapport existant entre "méthode de Strutinsky" et approche microscopique self-consistante a pu être établi également en présence de corrélations d'appariement et à température finie ³⁵⁾.

Le lien entre la procédure proposée par Strutinsky pour calculer \bar{S} et l'approximation semi-classique discutée au chapitre III a été approfondi au cours des années notamment (et principalement) dans les travaux de R.K. Bhaduri et collaborateurs ³⁶⁾.

Table 3

Noyau	$E[\rho]$	$E[\bar{\rho}]$	δE	$\delta_2 E$
^{16}O	-126.8	-122.1	-4.7	0.0
^{40}Ca	-339.6	-337.5	-2.6	0.5
^{56}Ni	-479.9	-473.7	-6.8	0.6
^{90}Zr	-779.2	-774.3	-5.5	0.6
^{114}Sn	-960.4	-961.1	0.5	0.2
^{168}Yb	-1352.2	-1349.6	-3.0	0.4
^{208}Pb	-1625.4	-1606.6	-19.2	0.4

Valeur des énergies (en MeV) apparaissant dans le développement de l'énergie à la Strutinsky. Les différents termes sont définis dans le texte sauf $\delta_2 E$ qui est la différence entre $E[\rho]$ et $E[\bar{\rho}] + \delta E$. Les calculs ont été effectués avec l'interaction de Skyrme SIII.

III - Développement semi-classique

Dans ce qui suit nous considérerons, sauf mention du contraire, un Hamiltonien ($H = K + V$) à un corps avec un potentiel local V .

Définissons tout d'abord l'opérateur de Bloch C^β dépendant d'un paramètre réel β comme :

$$C^\beta = e^{-\beta H} \quad (35).$$

Il satisfait à l'équation :

$$H C^\beta = - \frac{\partial}{\partial \beta} C^\beta \quad (36).$$

On l'appelle propagateur de Bloch parce qu'il est formellement identique (au remplacement près de β par it/\hbar) au propagateur de la Mécanique Quantique $C(t_0, t)$ défini pour une fonction d'onde ψ dépendant du temps t par :

$$\psi(t) = C(t_0, t) \psi(t_0) \quad (37)$$

et qui satisfait à l'analogie de (36), c'est-à-dire l'équation de Shrödinger :

$$H C = i \hbar \frac{\partial C}{\partial t} \quad (38).$$

Si le spectre de H est défini par des états propres $|n\rangle$, de fonction d'onde en représentation - \vec{r} , $\varphi_n(\vec{r})$ et des énergies propres ε_n , la représentation - \vec{r} de C^β sera :

$$C^\beta(\vec{r}, \vec{r}') = \langle \vec{r} | C^\beta | \vec{r}' \rangle = \sum_n \varphi_n(\vec{r}) \varphi_n^*(\vec{r}') e^{-\beta \varepsilon_n} \quad (39)$$

et la trace de C^β , évaluée sur la base complète $\{|n\rangle\}$ sera la fonction de partition $Z(\beta)$.

Définissons maintenant l'opérateur densité spectrale g° :

$$g^\circ = \delta(e-H) \quad (40).$$

Sa représentation - \vec{r} est donnée par :

$$g^\circ(\vec{r}, \vec{r}') = \langle \vec{r} | g^\circ | \vec{r}' \rangle = \sum_n \varphi_n(\vec{r}) \varphi_n^*(\vec{r}') \delta(e - \epsilon_n) \quad (41)$$

et sa trace est la ("fonction") densité spectrale :

$$\text{tr } g^\circ = g(e) = \sum_n \delta(e - \epsilon_n) \quad (42).$$

Nous allons maintenant montrer que la connaissance de C^β entraîne la connaissance de g° et de la densité ρ .

Il est clair que :

$$C^\beta(\vec{r}, \vec{r}') = \int_0^\infty e^{-\beta e} \sum_n \delta(e - \epsilon_n) \varphi_n(\vec{r}) \varphi_n^*(\vec{r}') = \int_0^\infty e^{-\beta e} g^\circ(\vec{r}, \vec{r}') de \quad (43)$$

donc que C^β est la transformée de Laplace de g° :

$$C^\beta = \mathcal{L}_{e \rightarrow \beta} g^\circ \quad (44)$$

et donc que g° est obtenu par transformation de Laplace inverse à partir de C^β

$$g^\circ = \mathcal{L}_{\beta \rightarrow e}^{-1} C^\beta \quad (45).$$

Supposons que dans le déterminant de Slater représenté par ρ , on prenne pour états occupés, tous les états propres de H jusqu'à une certaine valeur maximum λ . On aura donc (en supposant que les valeurs propres de H sont non-négatives)

$$N = \int_0^\lambda g(e) de \quad (46)$$

ou encore :

$$\rho^\lambda(\vec{r}, \vec{r}') = \int_0^\infty de g^\circ(\vec{r}, \vec{r}') \Theta(\lambda - e) \quad (47)$$

où $\Theta(x)$ est la fonction "échelon" de Heavyside ($\Theta(x) = 1$ pour $x > 0$, $\Theta(x) = 0$ pour $x = 0$). L'équation (47) manifeste que ρ^λ est le produit de corrélation de g° et $\Theta(x)$. En conséquence, utilisant un théorème bien connu concernant les transformées de Laplace de produit de convolution, on a :

$$\mathcal{L}_{\lambda \rightarrow \beta} \rho^\lambda = (\mathcal{L}_{\lambda \rightarrow \beta} g^\lambda) (\mathcal{L}_{\lambda \rightarrow \beta} \Theta(\lambda)) \quad (48)$$

soit :

$$\mathcal{L}_{\lambda \rightarrow \beta} \rho^\lambda = \frac{C^\beta}{\beta} \quad (49)$$

et par transformation de Laplace inverse :

$$\rho^\lambda = \mathcal{L}_{\beta \rightarrow \lambda}^{-1} \left(\frac{C^\beta}{\beta} \right) \quad (50)$$

Il résulte de ce qui précède qu'avec C^β on connaît le nombre de particules $N(\lambda)$ et l'énergie totale $E(\lambda)$. Pour $N(\lambda)$, ceci est une conséquence directe de l'équation (50). En effet, en en prenant la trace on obtient :

$$N(\lambda) = \mathcal{L}_{\beta \rightarrow \lambda}^{-1} \left(\frac{Z(\beta)}{\beta} \right) \quad (51).$$

L'énergie $E(\lambda)$ peut s'écrire comme :

$$E(\lambda) = \text{tr} \left[\int_0^\infty g^e e \Theta(\lambda - e) \right] \quad (52)$$

soit en identifiant e à $\lambda - (\lambda - e)$:

$$E(\lambda) = \lambda N(\lambda) - \text{tr} \left[\int_0^\infty g^e (\lambda - e) \Theta(\lambda - e) \right] \quad (53).$$

Utilisant

$$\mathcal{L}_{x \rightarrow \beta} (x \Theta(x)) = \frac{1}{\beta^2} \quad (54)$$

on obtient :

$$E(\lambda) = \lambda N(\lambda) - \mathcal{L}_{\beta \rightarrow \lambda}^{-1} \left(\frac{Z(\beta)}{\beta^2} \right) \quad (55).$$

En résumé, il apparaît donc que C^β contient toute l'information souhaitée sur les vecteurs propres et les valeurs propres de H . C'est donc pour cette quantité que nous allons essayer d'évaluer une approximation semi-classique, c'est-à-dire sa valeur dans un développement tronqué en puissance de \hbar . Avant de le faire cependant, nous allons étudier exactement un cas particulier simple, le cas de Thomas-Fermi où le potentiel V est constant et égal à V_0 .

Dans ce cas les éléments de matrice (\vec{r}, \vec{r}') de l'équation de Bloch s'écrivent :

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_0 \right) C^\beta(\vec{r}, \vec{r}') = -\frac{\partial}{\partial \beta} C^\beta(\vec{r}, \vec{r}') \quad (56).$$

Passant en coordonnées relatives $(\vec{s} = \vec{r} - \vec{r}')$ et en coordonnées du centre de masse $(\vec{R} = 1/2 (\vec{r} + \vec{r}'))$ et se plaçant dans le repère du centre de masse, $C^\beta(\vec{R}, \vec{s})$ ne dépend plus que de \vec{s} comme :

$$C^\beta(\vec{s}) = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \beta^{-3/2} e^{-\frac{m s^2}{2\pi\hbar^2} - \beta V_0} \quad (57).$$

A l'aide de l'équation (50), on obtient la densité correspondante. Par exemple sa partie locale $(\vec{s} = 0)$ est :

$$\rho^\lambda = \mathcal{L}_{\beta \rightarrow \lambda}^{-1} \left[\beta^{-5/2} e^{-\beta V_0} \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \right] \quad (58)$$

soit :

$$\rho^\lambda = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \frac{4}{3\pi^{1/2}} (\lambda - V_0)^{3/2} \Theta(\lambda - V_0) \quad (59).$$

On définit un "moment de Fermi" k_F par :

$$k_F = \left(\frac{2m}{\hbar^2} (\lambda - V_0) \right)^{1/2} \quad (60)$$

et la densité ρ^λ s'écrit alors (en tenant compte d'une dégénérescence quadruple de spin et d'isospin) :

$$\rho^\lambda = \frac{2}{3\pi^2} k_F^3 \Theta(\lambda - V_0) \quad (61).$$

Pour la partie non-locale ($\vec{s} \neq 0$) de ρ^λ on montre que :

$$\rho^\lambda(\vec{s}) = \rho_\lambda \frac{3}{k_F s} j_1(k_F s) \quad (62)$$

où $j_1(u)$ est la fonction de Bessel sphérique donnée par :

$$j_1(u) = \frac{1}{u^2} (\sin u - u \cos u) \quad (63).$$

En pratique, cette partie non-locale de ρ^λ n'intervient que pour calculer $\langle K \rangle$. Définissant une densité d'énergie cinétique τ^λ comme :

$$\tau^\lambda(\vec{r}) = \vec{\nabla}_{\vec{r}'} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}} \rho^\lambda(\vec{r}, \vec{r}') \Big|_{\vec{r}=\vec{r}'} \quad (64),$$

on obtient aisément :

$$\langle K \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} \int d^3r \tau^\lambda(\vec{r}) \quad (65).$$

A partir de l'équation (62), la densité τ peut s'écrire dans le cas Thomas-Fermi :

$$\tau^\lambda = \frac{2}{5\pi^2} k_F^5 \Theta(\lambda - V_0) \quad (66)$$

Si on se place en deçà du point tournant classique ($\lambda - V_0 > 0$), on peut se débarrasser de la fonction de Heavyside. Des équations (61) et (66), on tire par élimination de k_F :

$$\tau^\lambda = \frac{3}{5} \left(\frac{3\pi^2}{2} \right)^{2/3} (\rho^\lambda)^{5/3} \quad (67).$$

En conclusion quand V est constant, la solution est invariante par translation : ρ^λ et τ^λ sont constants comme il se doit. En outre ces deux quantités sont reliées par la relation de Thomas-Fermi de l'équation (67) valable en deçà du point tournant classique.

En général V n'est pas constant. Dans ce cas, on effectue généralement une approximation dite approximation de densité locale qui revient à

postuler que dans une portion de l'espace où $V(\vec{r})$ peut être considéré comme constant, les relations obtenues dans le cas de Thomas-Fermi sont encore valables. Ainsi, si $V(\vec{r})$ dépend de \vec{r} : $\rho^\lambda(\vec{r})$, $\tau^\lambda(\vec{r})$, $k_F(\vec{r})$ dépendent de \vec{r} . Dans ces expressions, on note la présence d'une racine carrée $\sqrt{\lambda-V}$ à certaines puissances positives. Il convient de rappeler ici que cette quantité est réelle en deçà des points tournants classiques (qui dans ce cas d'espèce sont localisés aux endroits où $V(\vec{r}) = \lambda$).

Ainsi, dans le cas de l'approximation de densité locale, la relation (67) d'égalité numérique devient relation fonctionnelle. En fait, il a été récemment montré ³⁷⁾ que cette relation pouvait être étendue au delà du point tournant. Pour ce faire, M. Brack remarque que :

- a) une certaine relation fonctionnelle existe, identique de part et d'autre du point tournant quand on se place à température T finie ;
- b) à la limite où T tend vers zéro par valeurs positives, cette relation fonctionnelle tend vers l'équation (67) de part et d'autre du point tournant.

Dans l'appendice C, nous rappelons brièvement la définition et les propriétés essentielles de la transformation de Wigner dont nous aurons besoin pour poursuivre notre brève description du développement semi-classique ³⁸⁻⁴¹⁾. Nous allons en effet calculer maintenant la transformée de Wigner du propagateur de Bloch C^β que nous pouvons développer comme :

$$C^\beta = \sum_n (-1)^n \frac{\beta^n}{n!} H^n \quad (68).$$

Pour le Hamiltonien H considéré, on trouve que sa transformée de Wigner \hat{H} n'est rien d'autre que le Hamiltonien classique :

$$\hat{H} = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V \quad (69).$$

La transformée de Wigner du carré du Hamiltonien

$$H^2 = K^2 + KV + VK + V^2 \quad (70)$$

s'écrit avec les notations de l'appendice C :

$$\hat{H}^2 = \left(\frac{\vec{p}^2}{2m} \right)^2 + 2 \left(\frac{\vec{p}^2}{2m} V - \frac{1}{2} \frac{\hbar^2}{4} \frac{\vec{p}^2}{2m} \Delta^2 V \right) + V^2 \quad (71).$$

Puisque :

$$\frac{\vec{p}^2}{2m} \Delta^2 V = 2 \Delta V \quad (72),$$

on obtient finalement :

$$\hat{H}^2 = \hat{H}^2 - \frac{\hbar^2}{4m} \Delta V \quad (73).$$

Donc la transformée de Wigner de C^β écrit sous la forme de l'équation (68) sera :

$$C^\beta = 1 - \beta \hat{H} + \frac{\beta^2}{2} \left(\hat{H}^2 - \frac{\hbar^2}{4m} \Delta V \right) + \dots \quad (74).$$

Si on somme toutes les contributions (c'est-à-dire à tous les ordres en β) du premier ordre en \hbar , on note que :

$$C^{\beta(0)} = e^{-\beta \hat{H}} \quad (75).$$

Incidentement en faisant la transformation de Fourier inverse de $C^{\beta(0)}$ on retrouve le résultat à la Thomas-Fermi de l'équation (57). A l'ordre 2 du développement en puissance de \hbar , la même sommation sur tous les ordres en β conduit à :

$$C^{\beta(2)} = e^{-\beta \hat{H}} \frac{\hbar^2 \beta^2}{8m} \left[-\Delta V + \frac{\beta}{3} (\vec{\nabla} V)^2 + \frac{\beta}{3m} \left(\vec{p} \cdot \vec{\nabla} \right)^2 V \right] \quad (76).$$

En faisant la transformation de Laplace inverse de $(C^{\beta(0)} + C^{\beta(2)})/\beta$, on obtient la transformée de Wigner de ρ valide à l'ordre 2 en puissances de \hbar (cf équation (50)). En intégrant ce résultat sur \vec{k} , la densité $\rho(\vec{R})$, à cette approximation, s'écrit :

$$\rho(\vec{R}) = \Theta(\lambda - V) \left[\frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} (\lambda - V)^{3/2} - \frac{1}{24\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{1/2} \left(\frac{(\vec{\nabla} V)^2}{4(\lambda - V)^{3/2}} + \frac{\Delta V}{(\lambda - V)^{1/2}} \right) \right] \quad (77).$$

Pour la densité d'énergie cinétique τ on obtient à partir de la transformée de Wigner $\hat{\rho}(\vec{R}, \vec{p})$ précédemment obtenue à l'ordre \hbar^2 :

$$\tau(\vec{R}) = \Theta(\lambda - V) \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{5/2} \left[\frac{3}{5} (\lambda - V)^{5/2} - \frac{1}{8} \frac{\hbar^2}{2m} \left(5 \Delta V (\lambda - V)^{1/2} - \frac{9}{4} \frac{(\vec{\nabla} V)^2}{(\lambda - V)^{1/2}} \right) \right] \quad (78).$$

La relation de Thomas-Fermi entre τ et ρ peut alors être étendue à l'ordre \hbar^2 (en anglais "Extended Thomas-Fermi" ou "ETF") en éliminant $(\lambda - V)^{1/2}$ entre les expressions (77) et (78) de ρ et τ . On obtient alors (noter que dans les équations (77) et (78) on n'a pris en compte qu'une dégénérescence 2, de spin par exemple) :

$$\tau[\rho] = \frac{3}{5} (3\pi^2)^{2/3} \rho^{5/3} + \frac{(\vec{\nabla} \rho)^2}{36\rho} + \frac{\Delta \rho}{3} \quad (79).$$

On peut pousser un tel développement en puissances de \hbar jusqu'à l'ordre 4. Après cet ordre, on obtient des termes divergents du type $\rho^{-1/3}$ dans la relation (80) par exemple. Les expressions deviennent beaucoup plus compliquées quand la masse possède une dépendance radiale ⁴⁰⁾ (masse effective reflétant la non-localité du potentiel de Hartree-Fock avec des interactions du type de celle de Skyrme par exemple) c'est-à-dire quand pour les fonctions d'onde en \vec{r}

$$K = - \frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla} \cdot f(\vec{r}) \vec{\nabla} \quad (80),$$

ou quand le Hamiltonien H contient en plus du potentiel central local V, un potentiel spin orbite ⁴¹⁾.

Nous allons maintenant esquisser très rapidement les diverses méthodes employées pour effectuer des calculs self-consistants classiques. Tout d'abord certains auteurs (cf la référence 38 pour une revue de l'approche et des résultats) ont utilisé une méthode variationnelle. La matrice densité semi-classique $\bar{\rho}$, à un ordre en \hbar donné, est déterminée par :

$$\delta E [\bar{\rho}] = 0 \quad (81)$$

avec :

$$\text{tr } \bar{\rho}_q = N_q ; q = n, p \quad (82).$$

Si on utilise une interaction de type Skyrme, on peut montrer ⁶⁾ que pour un déterminant de Slater $|\phi\rangle$, pair par renversement du sens du temps :

$$\langle \phi | H | \phi \rangle = \int d^3r \mathcal{K} \left[\rho(\vec{r}), \tau(\vec{r}), \vec{J}(\vec{r}) \right] \quad (83)$$

où ρ et τ ont été définis précédemment, \vec{J} est une densité dite de spin-orbite définie dans la référence 6 et $H = K + v$ (Skyrme). Sachant que dans le cadre d'une approximation semi-classique on peut définir une relation fonctionnelle liant \vec{J} à $\bar{\rho}$ de même nature que celle liant $\bar{\tau}$ à $\bar{\rho}$, il résulte de ce qui précède que :

$$E[\bar{\rho}] = \text{tr } K \bar{\rho} + \frac{1}{2} \text{tr} \bar{\rho} \tilde{v} \bar{\rho} = \int d^3r \tilde{\mathcal{K}} [\bar{\rho}(\vec{r})] \quad (84)$$

où $\tilde{\mathcal{K}}$ est une fonctionnelle bien définie (une fois que v est donnée) de la fonction densité $\bar{\rho}(\vec{r})$.

Le résultat de la variation (81) sera donc une fonction densité $\bar{\rho}(\vec{r})$ résultant soit de la solution d'équations du style Euler-Lagrange, soit de la variation de paramètres définissant la forme analytique de $\bar{\rho}(\vec{r})$. C'est cette deuxième méthode qui a été largement utilisée ³⁸⁾, la solution des équations d'Euler étant réservée pour l'ordre \hbar^4 à des cas particulièrement simples (cf par exemple la référence 42).

Une autre méthode a été également employée ⁴³⁾. Elle consiste en une détermination itérative de C^β . A partir d'un ansatz pour $\bar{\rho}(\vec{r})$, on détermine un potentiel local à 1 corps V (dans le cas d'une interaction v à la Skyrme) et une masse effective à insérer dans K de la forme de celle donnée dans l'équation (80). Employant une technique dite de resommation partielle ^{44,45)} du développement de Wigner-Kirkwood, on définit alors C^β à partir de $H = K + V$ d'où l'on déduit un nouveau $\bar{\rho}(\vec{r})$ sans passer par des relations fonctionnelles du type de celle de l'équation (79).

IV - Quelques exemples d'application

Par manque de temps nous nous contenterons ici de donner quelques grandes lignes renvoyant à la littérature citée pour plus de détails sur à la fois le formalisme employé et les résultats obtenus. De même nous ne mentionnerons que quelques exemples d'application, le but ici n'étant pas d'être exhaustif mais d'indiquer quelques axes de développement récent.

IV.1 - La goutte liquide retrouvée

Pour retrouver microscopiquement les paramètres de la goutte liquide, on peut penser à deux approches possibles. L'une consiste à définir ces paramètres intervenant dans :

$$E/A = a_v (1+k_v I^2) + a_s (1+k_s I^2) A^{-1/3} + a_c Z^2 A^{-1/3} \quad (85)$$

(avec des notations usuelles) par un calcul de matière nucléaire infinie pour a_v et k_v et de matière nucléaire semi-infinie pour a_s et k_s . Pour ce dernier calcul, on considère un profil $\rho(\vec{r})$ indépendant de x et y . Pour un cylindre de section droite dS parallèle à xOy , l'énergie de surface est calculée comme la perte de liaison dE_s due à la non-saturation dans la direction Oz soit :

$$dE_s = dS \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\tilde{H}(\rho(z)) - a_v \rho(z) \right] dz \quad (86).$$

Intégrant ceci sur la surface $4\pi r_0^2 A^{2/3}$ d'un noyau sphérique défini ^(*) par un rayon $r_0 A^{1/3}$ (où A est le nombre de nucléons), on obtient donc a_s comme :

$$a_s = 4\pi r_0^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\tilde{H}(\rho(z)) - a_v \rho(z) \right] dz \quad (87).$$

Les paramètres d'asymétrie k_v et k_s sont obtenus en effectuant ce même type de calculs pour la matière nucléaire infinie ou semi-infinie avec $N \neq Z$.

(*) Ce paramètre de rayon r_0 est défini par $(4/3)\pi r_0^3 \rho_0 = 1$, où ρ_0 est la densité de saturation de la matière nucléaire infinie.

Un des problèmes de cette approche est que par nécessité, l'énergie coulombienne n'est pas prise en compte. Elle doit donc être évaluée à part, de telle sorte qu'elle n'est pas traitée de façon cohérente avec l'interaction forte nucléon-nucléon.

La seconde approche s'appuie sur la constatation évidente que par construction $E[\bar{\rho}]$ ne possède pas de fluctuations quantiques (effets de couche). L'ajustement d'une formule de goutte liquide telle que celle de l'équation (85) doit donc être beaucoup plus aisé que dans le cas d'énergies possédant ces fluctuations. On calcule donc $\bar{\rho}$ pour un nombre suffisant de noyaux finis (avec l'énergie de Coulomb cette fois-ci !) et on n'a plus qu'à ajuster les paramètres.

On trouvera dans la référence 38 une discussion exhaustive de ces déterminations de paramètres de la goutte liquide. Volontairement dans ce cours, le modèle ⁴⁶⁾ de la gouttelette (droplet model) n'a pas été discuté, à la fois pour alléger l'exposé et parce qu'il n'est pas clair que le développement effectué jusqu'à présent dans ce modèle, soit microscopiquement fondé pour les valeurs de A considérées en Physique Nucléaire ^{38,47)}.

IV.2 - Extension à température finie

Comme dans toute description canonique (ou grand-canonique), l'approche variationnelle sera formellement identique au cas de température nulle, si on remplace E par l'énergie libre de Helmholtz $F = E - TS$ (où T est la température et S l'entropie). En outre, à température suffisamment élevée, l'élargissement thermique de la densité spectrale rend les calculs à l'approximation semi-classique indiscernable des calculs quantiques à l'approximation de Hartree-Fock (cf par exemple la discussion de la référence 35). On peut montrer en effet ³⁵⁾ que la densité spectrale à température T finie, $g_T(e)$ est donnée comme un produit de convolution de la densité spectrale $g(e)$ à $T = 0$ avec une fonction $f_T(e)$ donnée par :

$$f_T(e) = (1/4T) \frac{1}{ch^2(e/2T)} \quad (88).$$

La fonction de Bloch à T finie qui est définie (cf équation (44)) par transformation de Laplace à partir de g^e , sera donc un simple produit de la fonction de Bloch à $T = 0$ et de la transformée de Laplace de $f_T(e)$ soit ^(*) :

$$C^\beta(T) = C^\beta(T=0) \frac{\pi\beta T}{\sin(\pi\beta T)} \quad (89).$$

(*) Il est très important de noter que le paramètre β entrant dans la définition (35) de C^β n'a rien à voir avec la température T considérée ici.

On est donc capable d'effectuer les mêmes calculs semi-classiques qu'à température nulle à l'aide d'une modification somme toute mineure. Ceci requiert dans le cadre d'une approche ETF que les relations fonctionnelles comme celles existant entre τ et ρ soient généralisées à température finie. Ceci a été effectuée dans la référence 37.

A température finie, on pourra ainsi définir des paramètres de goutte liquide chaude qui diffèrent de ceux de la goutte liquide froide ⁴⁸⁾. C'est ainsi par exemple que la tension de surface a_s est une fonction décroissante de T, de même que le coefficient coulombien a_c (ce qui est évident car le rayon croît avec T). Aussi tenant compte du fait que a_s décroît plus vite que a_c avec T, la fissilité x qui mesure la stabilité d'une goutte de liquide chargée croîtra avec T. C'est ainsi ⁴⁹⁾ qu'avec l'interaction de Skyrme SkM* de la référence 50, le noyau ^{240}Pu est trouvé instable par fission à une température légèrement supérieure à 4 MeV/k (où k est la constante de Boltzmann) alors que $x \approx 0.75$ à T = 0.

IV.3 - Restauration des effets de couche

Le fait que $E[\rho] - E[\bar{\rho}]$ soit une quantité relativement faible a inspiré diverses approches microscopiques permettant de calculer rapidement une bonne approximation des résultats obtenus de façon plus compliquée dans le formalisme Hartree-Fock.

Partant d'un Hamiltonien construit avec une interaction effective nucléon-nucléon à la Skyrme, on vient de voir qu'il était possible d'obtenir une densité $\bar{\rho}$ semi-classique-self-consistante (c'est-à-dire sa partie locale ainsi que les parties non locales "utiles" telles que τ via les relations fonctionnelles ETF). On peut alors définir une bonne approximation du potentiel de Hartree-Fock comme étant donnée par :

$$\bar{V} = \text{tr } \bar{\rho} \tilde{v} \quad (90),$$

définissant donc un Hamiltonien de Hartree-Fock approché :

$$\bar{h} = K + \bar{V} \quad (91).$$

Les solutions propres de \bar{h} ($e_n, |n\rangle$) permettent, en particulier, de calculer une correction de couches :

$$\delta E = \text{tr } \bar{h} (\rho - \bar{\rho}) \quad (92),$$

qui ajoutée à $E[\bar{\rho}]$ fournit une approximation de $E[\rho]$, à l'aide du théorème de Strutinsky. D'autre part, avec le bras $|n\rangle$ on peut construire un déterminant de Slater $|\phi\rangle$ qui est une approximation du déterminant de Slater de Hartree-Fock, conduisant à une autre approximation de $E[\rho]$:

$$E[\rho] \approx \langle \phi | K+v (\text{Skyrme}) | \phi \rangle \quad (93)$$

appelée approximation de la valeur moyenne (en anglais "Expectation Value Method" ou "EVM") proposée dans un contexte plus phénoménologique, il y a assez longtemps ⁵¹⁾.

Quand des solutions semi-classiques self-consistantes sont utilisées pour définir \bar{h} , on a pu montrer, récemment ⁵²⁾, que ces deux approximations à $E[\rho]$ conduisent à des approximations tout à fait bonnes des énergies relatives (comme par exemple des énergies potentielles de déformation) ainsi qu'à une description satisfaisante des déterminants de Slater, solutions des équations de Hartree-Fock.

Remerciements

Je tiens à remercier très vivement J. Bartel, K. Bencheikh, M. Brack et J. Meyer pour de nombreuses discussions qui ont considérablement accru ma compréhension des sujets discutés ici. Je suis très reconnaissant envers M. Perrin pour le travail fourni lors de la préparation matérielle des ces notes de cours.

REFERENCES

- 1) V.M. Strutinsky, Nucl. Phys. A95 (1967) 420; *ibid.* A122 (1968) 1.
- 2) E. Caurier, A. Poves and A. Zuker, *priv. comm.* (1990).
- 3) P. Grangé, Ecole Joliot Curie (1989).
- 4) E. Suraud, Ecole Joliot Curie (1990).
- 5) P. Quentin and H. Flocard, Ann. Rev. Nucl. Part. Sci. 28 (1978) 523.
- 6) D. Vautherin and D.M. Brink, Phys. Rev. C5 (1972) 626.
- 7) D. Gogny, in "Proc. Int. Conf. Nucl. Phys.", eds. J. de Boer and H.J. Mang, Vol. 1 (Amsterdam, North Holland, 1973) p. 48.
- 8) Å. Bohr and B. Mottelson, "Nuclear Structure" (New York, Benjamin, 1969), Vol. 1.
- 9) J. Bartel, M. Durand and M. Brack, Z. Phys. A315 (1984) 341.
- 10) M. Beiner, H. Flocard, Nguyen Van Giai and P. Quentin, Nucl. Phys. A238 (1975) 29.
- 11) H. Flocard, P. Quentin and D. Vautherin, Phys. Lett. 46B (1973) 304.
- 12) J. Libert and P. Quentin, Phys. Rev. C25 (1982) 571.
- 13) J. Meyer, M. Meyer, N. Redon, P. Quentin, P. Bonche, H. Flocard, P.-H. Heenen and M.S. Weiss, Contrib. to the 3rd Int. Conf. on Nucleus-Nucleus Collision, Saint-Malo, France (June 1988).
- 14) P. Bonche, S.J. Krieger, P. Quentin, M.S. Weiss, J. Meyer, M. Meyer, N. Redon and P.-H. Heenen, Nucl. Phys. A500 (1989) 308.
- 15) I. Deloncle, J. Libert, L. Bennour and P. Quentin, Phys. Lett. B233 (1989) 16.
- 16) Å. Bohr and B.M. Mottelson, Nuclear Structure (Benjamin, New York), Vol.2.
- 17) Å. Bohr, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 26 (1952) N° 14.
- 18) J. Libert and P. Quentin, Z. Phys. A306 (1982) 315.
- 19) P. Quentin, I. Deloncle, J. Libert and J. Sauvage, Inv. Talk to the 7th Int. Symp. on Capture Gamma-Ray Spectroscopy, Asilomar (U.S.A.), October 1990.
- 20) J. Meyer, P. Quentin and B.K. Jennings, Nucl. Phys. A385 (1982) 269.
- 21) J. Libert, M. Meyer and P. Quentin, Phys. Rev. C25 (1982) 586.
- 22) L. Bennour, J. Libert, M. Meyer and P. Quentin, Nucl. Phys. A465 (1987) 35 ; L. Bennour, J. Libert, M.-G. Porquet, R.W. Hoff and P. Quentin, Contrib. to the Int. Nucl. Phys. Conf., Sao Paulo (Brasil), August 1989.
- 23) G. Alaga, Varenna Lecture 40 (1967) 28.
- 24) I. Hamamoto and P. Siemens, Nucl. Phys. A269 (1976) 199.
- 25) P.F. Bortignon, R.A. Broglia, D.R. Bes and R.J. Liotta, Phys. Rev. 30C (1977) 305.
- 26) Cf aussi in P. Ring and P. Schuck, "The Nuclear Many-Body Problem" (Springer, New York, 1980), Section 9.3.

- 27) D.L. Hill and J.A. Wheeler, Phys. Rev. 89 (1953) 1102.
- 28) W.D. Myers and W.J. Swiatecki, Nucl. Phys. 81 (1966) 1.
- 29) V.M. Strutinsky, Ark. Fys. 36 (1966) 629.
- 30) V.M. Strutinsky, Nucl. Phys. A95 (1967) 420 ; ibidem A122 (1968) 1.
- 31) S.M. Polikanov, V.A. Druin, V.A. Karnaukhov, V.L. Mikheev, A.A. Pleve, N.K. Skobelev, V.G. Subbotin, G.M. Ter Akopian and V.A. Fomichev, J. Exptl. Theoret. Phys. (USSR) 42 (1962) 1464 [Soviet Phys. JETP 15 (1962) 1016].
- 32) pour une exposition et une discussion systématiques de ce point, cf M. Brack and H.C. Pauli, Nucl. Phys. A207 (1973) 401.
- 33) M. Brack and P. Quentin, Phys. Lett. 56B (1975) 421.
- 34) M. Brack and P. Quentin, in "Physics and Chemistry of Nuclear Fission 1973" (IAEA, Vienna, 1974) Vol. I, p. 231.
- 35) M. Brack and P. Quentin, Nucl. Phys. A361 (1981) 35.
- 36) cf par exemple, B.K. Jennings, R.K. Bhaduri and M. Brack, Nucl. Phys. A253 (1975) 29.
- 37) M. Brack, Phys. Rev. Lett. 53 (1984) 119 ; see also the erratum in Phys. Rev. Lett. 54 (1985) 851.
- 38) M. Brack, C. Guet and H.-B. Håkansson, Phys. Rev. 193 (1985) 275.
- 39) in P. Ring and P. Schuck, "The Nuclear Many-Body Problem" (Springer, New York, 1980) Section 13.2.
- 40) B. Grammaticos and A. Voros, Ann. Phys. (N.Y.) 123 (1979) 359.
- 41) B. Grammaticos and A. Voros, Ann. Phys. (N.Y.) 129 (1980) 153.
- 42) J. Bartel, M. Brack and M. Durand, Nucl. Phys. A445 (1985) 263.
- 43) J. Bartel and M. Vallières, Phys. Lett. 114B (1982) 303.
- 44) R.K. Bhaduri, Phys. Rev. Lett. 39 (1977) 329.
- 45) M. Durand, M. Brack and P. Schuck, Z. Phys. A286 (1978) 381 ; ibidem A196 (1980) 87.
- 46) W.D. Myers and W.J. Swiatecki, Ann. Phys. (N.Y.) 55 (1969) 395 ; ibidem 84 (1974) 186.
- 47) M. Pearson, Nucl. Phys. A376 (1982) 507.
- 48) C. Guet, E. Strumberger and M. Brack, Phys. Lett. 205B (1988) 427.
- 49) J. Bartel and P. Quentin, Phys. Lett. 152B (1985) 29.
- 50) J. Bartel, P. Quentin, M. Brack, C. Guet and H.-B. Håkansson, Nucl. Phys. A386 (1982) 79.
- 51) C.M. Ko, H.-C. Pauli, M. Brack and G.E. Brown, Phys. Lett. 45B (1973) 433; Nucl. Phys. A236 (1974) 269.
- 52) I. Deloncle, K. Bencheikh, L. Bennour, M. Brack, J. Libert, J. Meyer and P. Quentin, Contrib. to the "10^{ème} Session d'Etudes Biennale de Physique Nucléaire", Aussois (March 1989) ; and to be published.

APPENDICE A

Opérateurs à 1 et 2 corps

On appelle O_1 (O_2 respectivement) un opérateur à 1 (2 respectivement) corps les opérateurs :

$$O_1 = \sum_i O_i \quad (A1)$$

et

$$O_2 = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} O_{ij} \quad (A2)$$

où les sommations portant sur chacune des N particules du problème. Les opérateurs O_i et O_{ij} ne font intervenir que les variables dynamiques des $i^{\text{ème}}$ et $j^{\text{ème}}$ particules, en outre

$$O_{ij} = O_{ji} \quad (A3)$$

et la dépendance de O_i et O_{ij} dans les variables considérées est formellement identique pour toutes valeurs des indices i et j. L'énergie cinétique ou le potentiel électron-noyau sont des exemples d'opérateur O_1 alors que les interactions forte nucléon-nucléon ou coulombienne électron-électron sont des cas particuliers d'opérateurs O_2 .

Pour un déterminant de Slater $|\psi\rangle$ on montre que :

$$\langle \psi | O_1 | \psi \rangle = \sum_i \langle i | O | i \rangle \quad (A4)$$

et

$$\langle \psi | O_2 | \psi \rangle = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \langle ij | \tilde{O} | ij \rangle \quad (A5)$$

avec

$$\tilde{O} = (1 - P) O \quad (A6)$$

où P est l'opérateur permutation de toute les variables dynamiques (de i et j dans l'exemple de l'équation (A5)). Dans les expressions (A4-A6) on a négligé de noter la dépendance en i et j des opérateurs O_i et \tilde{O}_{ij} , pour simplifier l'écriture.

APPENDICE B

Matrice densité réduite à 1 corps

Soit $|\psi\rangle$ un état normé correspondant à N particules. On définit un opérateur ρ , matrice densité réduite à 1 corps ^(*), agissant dans l'espace des états à 1 corps par (quels que soient α et β états à 1 corps orthonormés) :

$$\langle \alpha | \rho | \beta \rangle = \langle \psi | a_{\beta}^{\dagger} a_{\alpha} | \psi \rangle \quad (B1)$$

où a_{α} est un opérateur qui détruit une particule dans l'état α et a_{β}^{\dagger} un opérateur qui crée une particule dans l'état β . La définition de l'action de a_{α} et a_{β}^{\dagger} sur l'état $|\psi\rangle$ est opératoire quel que soit $|\psi\rangle$ car on peut toujours décomposer $|\psi\rangle$ sur une base de déterminants de Slater construits avec des états à 1 corps α, β pour lesquels leur action est connue. A cet effet, on définit que a_{α} agissant sur un déterminant de Slater $|\phi\rangle$ ne comportant pas de particules dans l'état α donne zéro. Il en résulte que $\langle \psi | a_{\alpha}^{\dagger} a_{\alpha} | \psi \rangle$ compte le nombre de particules dans l'état α présent dans $|\psi\rangle$.

Limitons-nous maintenant au cas de la densité ρ définie à partir d'un déterminant de Slater $|\phi\rangle$ construit avec N états à 1 corps $|\lambda\rangle$ orthonormalisés. Complétons la base $\{ |\lambda\rangle \}$ avec des états $\{ |\mu\rangle \}$ de telle sorte que $\{ |\lambda\rangle, |\mu\rangle \}$ forme une base complète orthonormalisée des états à 1 corps. Il résulte de ce qui précède qu'en effectuant la trace de ρ (défini pour $|\phi\rangle$) sur cette base, on a :

$$\text{tr } \rho = N \quad (B2)$$

D'autre part, on voit que $\langle \nu' | \rho | \nu \rangle$ ne sera différent de zéro que si $\nu = \nu'$ et ν est un état occupé dans $|\phi\rangle$, soit :

$$\langle \nu | \rho | \nu' \rangle = \delta_{\nu\nu'} \rho_{\nu} \quad (B3)$$

où $\rho_{\nu} = 1$ pour un état occupé dans $|\phi\rangle$ et zéro pour un état inoccupé. Donc la base $\{ |\lambda\rangle, |\mu\rangle \}$ diagonalise ρ .

De la définition de a_{ν}^{\dagger} et a_{ν} , on déduit que $a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu}$ est le projecteur d'un état quelconque à 1 particule sur l'état ν soit :

$$a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu} = |\nu\rangle \langle \nu| \quad (B4)$$

d'où d'après le théorème de la décomposition spectrale

$$\rho = \sum_{\lambda} |\lambda\rangle \langle \lambda| \quad (B5)$$

où la somme est restreinte sur les états occupés dans $|\phi\rangle$. A cause de l'orthonormalisation de la base, on a :

(*) dans ce qui suit on appellera ρ matrice densité pour simplifier.

$$(|\nu\rangle \langle \nu|) (|\nu'\rangle \langle \nu'|) = \delta_{\nu\nu'}, |\nu\rangle \langle \nu| \quad (\text{B6})$$

et donc :

$$\rho^2 = \rho \quad (\text{B7}).$$

Soient O les opérateurs provenant des définitions (A1) et (A2) des opérateurs à 1 et 2 corps. On aura :

$$\text{tr } \rho O = \sum_{\nu\nu'} \langle \nu | \rho | \nu' \rangle \langle \nu' | O | \nu \rangle \quad (\text{B8})$$

où ν, ν' sont a priori des états quelconques à 1 corps. Compte tenu des équations (B3) et (A4) on voit que :

$$\text{tr } \rho O = \sum_{\lambda \text{ occupés}} \langle \lambda | O | \lambda \rangle = \langle \psi | O_1 | \psi \rangle \quad (\text{B9})$$

De même, si on définit pour le cas d'un opérateur à 2 corps :

$$\text{trtr } \rho O \rho = \sum_{\nu\nu' \nu''\nu'''} \langle \nu | \rho | \nu' \rangle \langle \nu'' | \rho | \nu''' \rangle \langle \nu' \nu'' | \tilde{O} | \nu \nu'' \rangle \quad (\text{B10})$$

alors :

$$1/2 \text{trtr } \rho O \rho = 1/2 \sum_{\lambda\lambda' \text{ occupés}} \langle \lambda\lambda' | \tilde{O} | \lambda\lambda' \rangle = \langle \psi | O_2 | \psi \rangle \quad (\text{B11}).$$

APPENDICE C

Transformée de Wigner

Soit un opérateur O dont les éléments de matrice dans la représentation - \vec{r} sont :

$$O(\vec{r}, \vec{r}') = \langle \vec{r}' | O | \vec{r} \rangle \quad (C1).$$

Passant dans le système de coordonnées relatives et du centre de masse (\vec{R}, \vec{z}) décrit dans le texte, on définira la transformée de Wigner de O comme la transformée de Fourier de $O(\vec{R}, \vec{z})$ par rapport à \vec{z} soit :

$$\hat{O}(\vec{R}, \vec{p}) = \int d^3s e^{-i\vec{k} \cdot \vec{s}} O\left(\vec{R} + \frac{\vec{s}}{2}, \vec{R} - \frac{\vec{s}}{2}\right) \quad (C2)$$

avec :

$$\vec{p} = \hbar \vec{k} \quad (C3).$$

En prenant la transformation inverse, on a :

$$O\left(\vec{R} + \frac{\vec{z}}{2}, \vec{R} - \frac{\vec{z}}{2}\right) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{i\vec{k} \cdot \vec{z}} \hat{O}(\vec{R}, \vec{p}) \quad (C4).$$

Dans le cas particulier où l'opérateur O est la densité ρ , on obtient la fonction densité en intégrant $\hat{\rho}$ sur \vec{k} [équation (C4) avec $\vec{z} = 0$] :

$$\rho(\vec{R}) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \hat{\rho}(\vec{R}, \vec{p}) \quad (C5)$$

et la "densité" d'impulsion en intégrant $\hat{\rho}$ sur \vec{R} :

$$\rho(\vec{p}) = \langle \vec{p}' | \rho | \vec{p} \rangle = \int d^3R \hat{\rho}(\vec{R}, \vec{p}) \quad (C6)$$

où le bra $|\vec{p}'\rangle$ est l'onde plane d'impulsion \vec{p}' . De façon plus générale, si ρ représente un déterminant de Slater $|\phi\rangle$, on aura pour des opérateurs ne dépendant que de l'opérateur position ou de l'opérateur impulsion :

$$\langle \phi | O | \phi \rangle = \iint \frac{d^3R d^3k}{(2\pi)^3} \hat{\rho}(\vec{R}, \vec{p}) O(\vec{R} \text{ ou } \vec{p}) \quad (C7)$$

où $O(\vec{R} \text{ ou } \vec{p})$ est le nombre réel obtenu en remplaçant dans O l'opérateur position ou l'opérateur impulsion par \vec{R} ou \vec{p} . Ces propriétés (C5- C7) font apparaître que $\hat{\rho}$ est presque une densité en phase à un corps. Ceci est en toute rigueur impossible à définir en mécanique quantique à cause du principe d'incertitude de Heisenberg. C'est d'ailleurs à cause de la non-commutation des opérateurs position et impulsion que l'équation (C7) n'est pas valable pour des opérateurs O les plus généraux (dépendant de la position et de l'impulsion). En outre, s'il est aisé de montrer que $\hat{\rho}$ ne prend que des valeurs réelles, il s'avère que cette densité peut prendre des valeurs

négatives, la disqualifiant donc comme une densité de probabilité en \vec{R} et \vec{p} , indépendamment de ce qui précède.

Solent deux opérateurs A et B, on montre que :

$$\widehat{[AB]} = \hat{A} e^{i\hbar\Lambda/2} \hat{B} \quad (C8)$$

où A est l'opérateur "crochet de Poisson" défini comme :

$$\Lambda = \overset{\leftarrow}{\nabla}_R \cdot \overset{\rightarrow}{\nabla}_p - \overset{\leftarrow}{\nabla}_p \cdot \overset{\rightarrow}{\nabla}_R \quad (C9)$$

avec les flèches à droite (\rightarrow), respectivement à gauche (\leftarrow), signifiant que la dérivation s'effectuera sur la quantité se trouvant à droite, respectivement à gauche de l'opérateur. Il est clair que :

$$\hat{A} \Lambda^p \hat{B} = (-)^p \hat{B} \Lambda^p \hat{A} \quad (C10).$$

En conséquence :

$$\widehat{[A, B]} = \hat{A} \left(e^{i\hbar\Lambda/2} - e^{-i\hbar\Lambda/2} \right) \hat{B} \quad (C11)$$

soit :

$$\widehat{[A, B]} = 2i \hat{A} \sin(\hbar\Lambda/2) \hat{B} \quad (C12).$$

Donnons maintenant, quelques exemples de transformées de Wigner (\tilde{R}_x signifiant l'opérateur R_x , composante sur O_x de \vec{R} , et une notation identique pour \tilde{p}_x)

$$\begin{aligned} A = \tilde{R}_x ; & \quad \hat{A} = R_x \\ B = \tilde{p}_x ; & \quad \hat{B} = p_x \end{aligned} \quad (C13)$$

donc :

$$\widehat{[\tilde{R}_x, \tilde{p}_x]} = 2i \frac{\hbar}{2} = i\hbar \quad (C14),$$

comme il se doit. L'énergie cinétique K et un potentiel local V auront donc pour transformées de Wigner :

$$\hat{K} = \frac{\vec{p}^2}{2m} \quad (C15)$$

et :

$$\hat{V} = V(\vec{R}) \quad (C16).$$

Enfin à l'ordre le plus bas en \hbar (limite classique), on tire de l'équation (C12) que :

$$\widehat{[A, B]} = i\hbar \hat{A} \Lambda \hat{B} \equiv \{ \hat{A}, \hat{B} \} \quad (C17)$$

la notation $\{ , \}$ étant la notation traditionnelle pour le crochet de Poisson. On retrouve donc le fait bien connu qu'on passe formellement de la mécanique classique à la mécanique quantique en remplaçant un crochet de Poisson par un commutateur divisé par $i\hbar$ (exemple : de l'équation de Liouville à l'équation de Von Neumann).