

Université Libre de Bruxelles
Faculté des Sciences Appliquées

Etude de noyaux à halo par la méthode des coordonnées hypersphériques

Clément DANIEL

2000 - 2001

Promoteurs

Daniel BAYE et Pierre DESCOUVEMONT

Travail de Fin d'Etude
présenté en vue de l'obtention
du titre d'Ingénieur Civil Physicien

Remerciements

Je tiens à remercier mes deux promoteurs Daniel Baye et Pierre Descouvemont qui m'ont aidé, soutenu, et conseillé. Tout au long de cette année académique, j'ai pu bénéficier de leur grande expérience et de leurs connaissances. Ils ne m'ont jamais tenu rigueur de mes nombreux doutes, questions et interrogations et ont toujours su y répondre. Si grâce à ce travail, je crois avoir pris le goût d'une certaine démarche scientifique, c'est bien à mes deux promoteurs que je le dois. Durant ces quelques mois, j'ai pu appréhender pour la première fois, à mon modeste niveau, le monde de la recherche nucléaire théorique. Le sujet de ce travail extrêmement intéressant en soi se place dans une perspective scientifique à long terme. Je remercie mes promoteurs de m'avoir fait confiance en me confiant cette première étape.

Mes remerciements vont aussi à Jean-Luc Sida, à Cédric, à Antoine, à Valérie et à tous les chercheurs du Service de Physique Nucléaire du CEA. Les quelques semaines passées en leur compagnie m'ont permis de découvrir les noyaux à halo et le monde de la recherche nucléaire expérimentale. Je garde grâce à eux un excellent souvenir de ma prise de contact avec ce domaine. Le stage effectué dans ce laboratoire et ce travail de fin d'études partagent une thématique, les noyaux à halo, une démarche scientifique rigoureuse et une très bonne qualité humaine. Je remercie Daniel Baye, Pierre Descouvemont et Jean-Luc Sida de m'avoir chacun témoigné cette marque de confiance.

Ma famille entière m'a soutenu, réconforté et supporté. Mes parents et mes trois frères, Julien, Jan et Martin se sont intéressés à ce travail (ou du moins ont bien fait semblant) malgré leur ignorance initiale du formidable monde des noyaux à halo, je les remercie tendrement pour leur gentillesse et leur affection.

Je remercie enfin mes amis, Bram, Benoît et les autres sans qui cette année aurait été bien trop studieuse.

Chapitre 1

Un Noyau à Halo : ${}^6\text{He}$

1.1 Une description physique des noyaux à halos

Les noyaux à halo sont des noyaux exotiques dont l'étendue physique est anormalement grande comparée à celles des noyaux de masse semblable.

Leurs grands rayons de matière ont été à l'origine de leur découverte en 1985 par l'équipe de Tanihata (voir [1]). Leur première étude consacrée à la famille d'isotopes du lithium a mis en évidence des sections efficaces anormalement élevées pour des noyaux légers riches en neutrons. Les rayons de matière déduits des sections efficaces expérimentales sont sensiblement plus grands que ceux prédits par les modèles habituels¹.

Une grande extension spatiale est une première caractéristique des noyaux à halo mais leur dénomination provient de leur structure très particulière : on interprète ces noyaux comme étant formés d'un cœur normal entouré d'un halo très étendu de un ou plusieurs nucléons.

L'extension spatiale est principalement due au halo. Cette interprétation est confirmée par toutes les expériences menées sur les noyaux à halo connus depuis 1985. Ces expériences ont notamment mis en évidence, lors de réactions de fragmentation à haute énergie, des distributions très étroites des impulsions du cœur et des neutrons du halo. Ces distributions étroites d'impulsions sont associées aux larges distributions spatiales des noyaux à halo comme le montre par exemple le principe d'incertitude d'Heisenberg (une faible incertitude sur la position implique une grande incertitude sur l'impulsion et réciproquement ; voir entre autres [2]) ou le fait que la distribution d'impulsions est la transformée de Fourier de la distribution de positions.

Les noyaux à halo observés sont toujours des noyaux légers riches en neutrons ou en protons. En effet, leur deuxième caractéristique est d'être situés loin de la vallée de stabilité (regroupant les isotopes stables) et proches des "drip-lines" (les limites en protons et en neutrons à partir desquelles les noyaux ne sont plus liés). Ils sont donc faiblement liés et radioactifs de courte durée de vie.

Les énergies nécessaires pour arracher les nucléons du halo sont très inférieures à celles nécessaires pour arracher un nucléon d'un noyau stable. Une interprétation très simpliste permet de lier l'extension du halo et ces faibles énergies de liaison : moins un nucléon est lié, plus il sera en moyenne éloigné du cœur.

La troisième caractéristique des noyaux à halo est le petit moment angulaire des neu-

¹notamment ceux prédits par la règle habituelle $r = r_0 A^{1/3}$, voir 5.3.5

trons du halo. Les noyaux à halo déjà observés ont tous des neutrons dans une combinaison des états s ($l = 0$) et p ($l = 1$).

En 1988, six noyaux à halo de neutrons étaient connus : ^{11}Li , ^{17}B , ^{11}Be , ^{14}Be , ^6He et ^8He (voir [3]). Le ^{19}C sera découvert peu après. Depuis 1985, beaucoup de recherches ont été entreprises et plusieurs candidats comme noyau à halo sont étudiés. Les halos peuvent être composés d'un proton (pour ^8B ou ^{17}F), d'un neutron (pour ^{14}B ou ^{17}C) ou de deux neutrons (pour ^{17}B ou ^{32}Ne).

Les noyaux à halo de deux neutrons (^6He , ^{11}Li ou ^{14}Be) ont une propriété remarquable : ces systèmes à trois corps sont faiblement liés mais aucun de leurs systèmes binaires n'est lié. De tels systèmes sont appelés "borroméens"². Il existe plusieurs noyaux borroméens normaux. Cette propriété semble être plus ou moins liée à la proximité des "drip-lines".

Deux difficultés rendent la réalisation d'expériences impliquant des noyaux à halo difficile : leurs courtes durées de vie et leurs faibles taux de production. Des développements récents dans le domaine des accélérateurs de particules ont permis la production de faisceaux radioactifs relativement intenses. La méthode consiste à envoyer un faisceau primaire de noyaux sur une cible choisie de manière à ce que la réaction nucléaire produise un maximum de noyaux à halo (un exemple de réaction est $^6\text{Li}(n,p)^6\text{He}$). Ces noyaux sont recueillis pour former un faisceau secondaire utilisé pour les expériences (le flux de ce faisceau est de l'ordre de 10^6 nucléons par seconde). Les noyaux à halo sont alors étudiés pour eux-mêmes et pour sonder les théories de physique nucléaire existantes (voir [4], [5], [6] et [7]).

Nous nous intéresserons au noyau à halo de deux neutrons ^6He . Ce noyau est le plus léger noyau borroméen connu et il présente une structure de halo prononcée. Son cœur, une particule alpha, est très bien connu ce qui permettra de définir précisément les interactions entre le cœur et le halo.

Ce noyau est radioactif β^- . Il se désintègre en un noyau ^6Li (stable), un électron et un antineutrino électronique ; sa demi-vie est légèrement inférieure à une seconde (elle vaut 806.7 ms). Le rayon de matière en moyenne quadratique s'élève à 2.57 ± 0.1 fm (ces valeurs sont obtenues en analysant les résultats d'expériences, voir par exemple [8]). L'énergie de liaison de l'ensemble formé par la particule alpha et les deux neutrons est de l'ordre du MeV (elle vaut 0.973 ± 0.04 MeV). Remarquons que cette énergie de liaison n'est pas celle du noyau ^6He . Elle ne prend pas en compte l'énergie de liaison de la particule alpha et représente en fait l'énergie de séparation de deux neutrons (souvent notée S_{2n}). L'énergie de liaison du noyau ^6He est la somme de l'énergie de liaison de la particule alpha (environ 28,30 MeV) et de l'énergie de séparation des deux neutrons et vaut 29.27 MeV.

1.2 Représentation utilisée

L'objet de notre modélisation sera les noyaux à halo de deux neutrons.

Ces noyaux se comportent comme des systèmes à trois corps et n'ont pas d'états liés à deux corps. Ils peuvent donc être modélisés comme un problème nucléaire à trois corps.

Le noyau ^6He est composé du noyau ^4He dans son état fondamental et d'un halo de deux neutrons. Notons que cette configuration n'est pas la seule envisageable : en

²Ce nom vient des anneaux Borroméens, le symbole héraldique des Princes de Borroméo du nord de l'Italie. Ces trois anneaux sont liés de telle manière que si un seul d'entre eux venait à être retiré, les deux autres se sépareraient.

toute généralité il faudrait traiter un problème à six corps et tenir compte d'autres configurations comme ${}^3\text{H} + {}^3\text{H}$. Néanmoins, le caractère prononcé de noyau à halo de deux neutrons pour ${}^6\text{He}$ montre l'importance de la configuration à trois corps (l'importance des autres configurations est un problème complexe investigué actuellement théoriquement et expérimentalement).

Ce noyau ${}^6\text{He}$ n'a qu'un seul état lié. Nous ne nous intéressons qu'à ce niveau fondamental. Il comprend un nombre pair de protons (deux) et de neutrons (quatre). Son niveau fondamental a un moment cinétique total nul et une parité paire (il vérifie la règle empirique postulant que tous les noyaux pair - pair ont un moment cinétique total nul et une parité paire à cause des forces d'appariement des nucléons, voir [9]).

Le moment cinétique total J résulte de la composition du moment cinétique orbital total L et du spin total S . L'état $J = 0$ ne comporte que des états de moment cinétique orbital total égal au spin total ($L = S$). Dans le modèle à trois corps, le spin total résulte de la composition des spins des deux neutrons et du moment cinétique total de la particule alpha. En toute généralité, le spin total pourrait prendre les valeurs 0, 1 ou 2. On constate expérimentalement que les contributions des trois composantes sont très différentes : la composante $S = 0$ compte pour environ 85% de la fonction d'onde, la composante $S = 1$ pour environ 15% et la composante $S = 2$, très inférieure aux deux autres, est négligeable. Le modèle à trois corps permet d'expliquer l'absence de la composante $S = 2$ si la particule alpha est dans son niveau fondamental. Dans ce cas, son moment cinétique total est nul (c'est aussi un noyau pair - pair), S ne peut prendre que les valeurs 0 ou 1 et seules les deux composantes $L = S = 0$ et $L = S = 1$ interviennent.

Dans cette première phase de développement du modèle, pour simplifier, nous nous limiterons à la composante de spin total nul. La seule composante envisagée sera donc $J = L = 0$. Cette approximation sera la principale source d'erreur pour notre modélisation mais simplifie grandement le problème.

Dans la modélisation à trois corps, la parité résulte de la parité de la particule alpha (parité paire dans son état fondamental) et de celles des mouvements relatifs des particules. La parité totale est le produit des parités des deux mouvements relatifs. La parité paire impose donc l'égalité des moments cinétiques orbitaux si $L = 0$ ou $L = 1$.

Pour modéliser le noyau, nous aurons besoin d'interactions entre les trois corps, c'est-à-dire neutron - neutron et particule alpha - neutron.

Si nous négligeons les termes dépendant des spins, l'interaction neutron - neutron est relativement simple et peut être approchée par un terme central dépendant uniquement de la distance entre les deux neutrons. Néanmoins, le postulat d'antisymétrisation s'applique à l'échange des deux neutrons du halo. La fonction d'onde doit être antisymétrique par l'échange des coordonnées des deux neutrons. Si le spin total S est nul, cette partie de la fonction d'onde est antisymétrique; la partie orbitale doit donc être symétrique, le moment cinétique orbital l_x doit être pair et entraîne donc la parité paire de l_y (parité impaire si S est impaire).

Examinons les conséquences du principe d'exclusion de Pauli appliqué à un neutron et à la particule alpha comprenant deux neutrons. Lorsque cette particule est dans son état fondamental, les neutrons ont des moments cinétiques orbitaux nuls. Les états s déjà occupés sont interdits pour les deux neutrons du halo. Le potentiel particule alpha - neutron doit donc exclure les ondes s . Deux méthodes existent, la première consiste à ajouter un projecteur sur les états interdits multiplié par une constante élevée de manière à ce qu'une méthode variationnelle conduise à les éliminer (c'est la méthode du "pseudo-

projecteur”, voir [10]). Ce potentiel est non local et rend la résolution du problème très délicate. La deuxième méthode consiste à transformer le potentiel par une opération appelée “supersymétrie”, le potentiel obtenu n’a plus d’états liés tout en conservant les autres propriétés (voir [11]). Le potentiel transformé est pour les ondes s répulsif à très courte distance et décroît très rapidement vers zéro (cette méthode modifie seulement la composante $l = 0$ du potentiel). Pour simplifier le calcul, nous utilisons une approximation simple de ce potentiel et nous prenons un potentiel nul pour les ondes s .

En résumé, les moments cinétiques orbitaux des deux neutrons par rapport à la particule alpha doivent donc être différents de zéro (état interdit par le principe d’exclusion), pairs (pour satisfaire le postulat d’antisymétrisation) et égaux (pour avoir une parité paire et que leur composition donne $L = 0$). Nous pouvons considérer trois couples de mouvements relatifs ; pour chacun des couples, les deux moments cinétiques orbitaux doivent être égaux pour avoir une parité paire et $L = 0$ ou 1.

Nous utiliserons pour l’interaction particule alpha - neutron un potentiel central dépendant à la fois de la distance entre la particule alpha et le neutron et du moment cinétique orbital du mouvement relatif. Les interactions sont des approximations, elles négligent tous les termes dépendant du spin.

Nous ferons donc successivement les approximations suivantes : l’approximation à un problème à trois corps, l’approximation du spin total nul, l’approximation des interactions centrales et l’exclusion approximative des ondes s pour les neutrons du halo.

Chapitre 2

La Méthode des Coordonnées Hypersphériques

2.1 Les coordonnées de Jacobi

2.1.1 Les différents systèmes de coordonnées de Jacobi

Soit un système de N particules ($i = 1, \dots, N$), et soient \vec{r}_i leurs positions et m_i leurs masses, on introduit la coordonnée de centre de masse $\vec{R} = \sum_{i=1}^N m_i \vec{r}_i / M$ et la masse totale $M = \sum_{i=1}^N m_i$. Les coordonnées de Jacobi sont définies comme l'ensemble des $N - 1$ vecteurs \vec{x}_i

$$\vec{x}_i = \vec{r}_{i+1} - \frac{1}{M_i} \sum_{j=1}^i m_j \vec{r}_j \quad (2.1)$$

avec $M_i = \sum_{j=1}^i m_j$. Ces coordonnées ont une interprétation physique directe : la $j^{\text{ième}}$ coordonnée de Jacobi est la coordonnée relative de la $(j + 1)^{\text{ième}}$ particule par rapport au centre de masse des j premières particules, nous pouvons donc partir d'une particule et définir récursivement toutes les coordonnées de Jacobi. Pour les problèmes atomiques, il est intéressant de prendre le noyau comme première particule de référence car alors les coordonnées de Jacobi sont approximativement équivalentes aux coordonnées relatives des électrons vis-à-vis du noyau (voir l'article de F. T. Smith [12] pour une présentation des coordonnées de Jacobi).

Notons \vec{p}_i l'impulsion de la particule i , \vec{P}_{cm} l'impulsion de centre de masse et \vec{p}_{x_i} l'impulsion conjuguée canoniquement à la coordonnée de Jacobi \vec{x}_i , on peut montrer que l'énergie cinétique s'écrit dans ce cas (un calcul plus détaillé est effectué ci-dessous pour l'expression des coordonnées effectivement employées)

$$T = \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m_i} = \frac{\vec{P}_{cm}^2}{2M} + \sum_{i=1}^{N-1} \frac{1}{2} \left(\frac{1}{m_{i+1}} + \frac{1}{M_i} \right) \vec{p}_{x_i}^2 \quad (2.2)$$

Ces coordonnées permettent donc de séparer le mouvement du centre de masse.

Dans le cas d'un système à trois particules, nous choisissons de noter \vec{x}_1 et \vec{x}_2 , respectivement \vec{x} et \vec{y} . Pour les problèmes à trois particules, les coordonnées de Jacobi sont souvent normalisées, c'est-à-dire multipliées par un facteur dépendant des masses. Les coordonnées que nous utiliserons suivent cette pratique et ne sont plus simplement des

longueurs mais ont comme unité des unités de longueur multipliées par la racine carrée d'unités de masse ($[\vec{x}] = [\vec{y}] = [\vec{R}] = [M^{1/2}L]$). Cela permet de généraliser le problème et de le traiter systématiquement et indépendamment des masses absolues de toutes les particules.

Nous utiliserons donc comme ensemble de coordonnées de Jacobi l'ensemble des trois vecteurs suivants (ces définitions forment une variante de celles utilisées dans l'article de J. Raynal et J. Revai [13], elles diffèrent par la définition de \vec{R}) :

$$\begin{cases} \vec{R} &= \sum_{i=1}^3 \frac{m_i}{\sqrt{M}} \vec{r}_i \\ \vec{x}_i &= \sqrt{\frac{m_j m_k}{m_j + m_k}} (\vec{r}_j - \vec{r}_k) \\ \vec{y}_i &= \sqrt{\frac{m_i (m_j + m_k)}{M}} \left(\vec{r}_i - \frac{m_j \vec{r}_j + m_k \vec{r}_k}{m_j + m_k} \right) \end{cases} \quad (2.3)$$

Nous noterons \vec{P}_R , \vec{p}_{x_i} et \vec{p}_{y_i} les impulsions canoniquement associées.

Nous pouvons interpréter physiquement ces trois coordonnées. La première est proportionnelle à la coordonnée du centre de masse des trois particules (\vec{R}_{cm}), la seconde à la coordonnée relative entre les deux particules j et k , enfin, la troisième est proportionnelle à la coordonnée relative de la particule k par rapport au centre de masse des particules i et j .

Cette définition (2.3) est triple, elle dépend de la particule choisie comme référence (ici la particule i). Dans un problème nucléaire comme celui-ci, nous ne pouvons plus utiliser une asymétrie naturelle comme celle entre le noyau et les électrons pour les problèmes atomiques. Trois jeux de coordonnées sont donc possibles ; pour les distinguer, nous leur attribuons un indice i , $i = 1, 2, 3$ (il ne faut pas le confondre avec l'ancien indice des différentes coordonnées de Jacobi d'un même groupe que nous ne notons plus). La coordonnée du centre de masse est invariable mais nous verrons que le passage d'un jeu de coordonnées à un autre fait varier \vec{x}_i et \vec{y}_i .

Nous pouvons calculer la transformation inverse qui permet de retrouver les coordonnées des trois particules \vec{r}_i , \vec{r}_j et \vec{r}_k . Inversons la matrice de transformation et définissons les trois vecteurs suivants (pour des raisons de lisibilité)

$$\begin{cases} \vec{R}_{cm} = \sum_{i=1}^3 \frac{m_i}{M} \vec{r}_i = \frac{\vec{R}}{\sqrt{M}} \\ \vec{X} = \vec{r}_j - \vec{r}_k = \vec{x}_i \sqrt{\frac{m_j + m_k}{m_j m_k}} \\ \vec{Y} = \vec{r}_i - \frac{m_j \vec{r}_j + m_k \vec{r}_k}{m_j + m_k} = \vec{y}_i \sqrt{\frac{M}{m_i (m_j + m_k)}} \end{cases} \quad (2.4)$$

Nous obtenons

$$\begin{cases} \vec{r}_i = \frac{m_j + m_k}{M} \vec{Y} + \vec{R}_{cm} \\ \vec{r}_j = \frac{m_k}{m_j + m_k} \vec{X} - \frac{m_i}{M} \vec{Y} + \vec{R}_{cm} \\ \vec{r}_k = -\frac{m_j}{m_j + m_k} \vec{X} - \frac{m_i}{M} \vec{Y} + \vec{R}_{cm} \end{cases} \quad (2.5)$$

La définition exacte des coefficients massiques varie d'un auteur à l'autre, il importe de toujours vérifier la concordance des coordonnées utilisées (une très bonne présentation des différentes définitions de coordonnées de Jacobi est faite dans le mémoire de M. Foquet [14]). Une autre définition relativement souvent utilisée est la suivante. Soit le paramètre d_k ,

$$d_k^2 = \sqrt{\frac{m_k}{M m_i m_j}} (m_i + m_j) \quad (2.6)$$

on définit les trois coordonnées de Jacobi (notées \vec{R}' , \vec{x}'_k et \vec{y}'_k pour les différencier des coordonnées choisies notées \vec{R} , \vec{x}_k et \vec{y}_k)

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{R}' = \sum_{i=1}^3 \frac{m_i}{M} \vec{r}_i = \frac{\vec{R}}{\sqrt{M}} \\ \vec{x}'_k = \frac{1}{d_k} (\vec{r}_i - \vec{r}_j) = \sqrt[4]{\frac{M}{m_i m_j m_k}} \vec{x}_k \\ \vec{y}'_k = d_k \left(\vec{r}_k - \frac{m_i \vec{r}_i + m_j \vec{r}_j}{m_i + m_j} \right) = \sqrt[4]{\frac{M}{m_i m_j m_k}} \vec{y}_k \end{array} \right. \quad (2.7)$$

Pour éviter toute confusion, je n'utiliserai jamais cet autre jeu de coordonnées.

2.1.2 La séparation du centre de masse

Les coordonnées que nous avons choisies (2.3) nous permettent d'exprimer de façon simple l'opérateur énergie cinétique T . Nous partons de l'expression générale de cet opérateur pour un système à trois particules :

$$T = \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} + \frac{p_3^2}{2m_3} \quad (2.8)$$

Nous effectuons un changement de variable de \vec{r}_1 , \vec{r}_2 , \vec{r}_3 vers \vec{R} , \vec{x}_i et \vec{y}_i en utilisant la règle générale de changement de variable pour les dérivées partielles

$$\frac{\partial}{\partial x_i} = \sum_{j=1}^N \frac{\partial x'_j}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x'_j} \quad (2.9)$$

Le tableau des dérivées partielles des nouvelles variables en fonction des anciennes est :

$$\left[\frac{\partial x'_j}{\partial x_i} \right] = \begin{bmatrix} \frac{m_i}{\sqrt{M}} & \frac{m_j}{\sqrt{M}} & \frac{m_k}{\sqrt{M}} \\ 0 & \sqrt{\frac{m_j m_k}{m_j + m_k}} & -\sqrt{\frac{m_j m_k}{m_j + m_k}} \\ \sqrt{\frac{m_i(m_k + m_j)}{M}} & \frac{-m_j}{m_j + m_k} \sqrt{\frac{m_i(m_k + m_j)}{M}} & \frac{-m_j}{m_j + m_k} \sqrt{\frac{m_i(m_k + m_j)}{M}} \end{bmatrix} \quad (2.10)$$

Ces coefficients nous permettent d'écrire simplement les \vec{p}_1 , \vec{p}_2 , \vec{p}_3 en fonction des \vec{P}_R , \vec{p}_{x_i} et \vec{p}_{y_i} . En les remplaçant dans l'expression de T , tous les produits $\vec{p}_i \cdot \vec{p}_j$ se simplifient et les coefficients prennent une forme simple. Nous obtenons l'expression de l'énergie cinétique :

$$T = \frac{1}{2} (P_R^2 + p_{x_i}^2 + p_{y_i}^2) \quad (2.11)$$

Remarquons que les trois variables \vec{R} , \vec{x}_i et \vec{y}_i comprennent des facteurs massiques et les impulsions qui leur sont canoniquement associées ne sont pas multipliées par d'autres facteurs dans notre expression de l'énergie cinétique.

2.1.3 La permutation des coordonnées par rotation

Considérons deux jeux de coordonnées de Jacobi (nous ne notons pas la coordonnée de centre de masse qui ne joue pas de rôle ici) :

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{x}_i = \sqrt{\frac{m_j m_k}{m_j + m_k}} (\vec{r}_j - \vec{r}_k) \\ \vec{y}_i = \sqrt{\frac{m_i(m_j + m_k)}{M}} \left(\vec{r}_i - \frac{m_j \vec{r}_j + m_k \vec{r}_k}{m_j + m_k} \right) \end{array} \right. \quad (2.12)$$

et

$$\begin{cases} \vec{x}_k &= \sqrt{\frac{m_i m_j}{m_i + m_j}} (\vec{r}_i - \vec{r}_j) \\ \vec{y}_k &= \sqrt{\frac{m_k (m_i + m_j)}{M}} \left(\vec{r}_k - \frac{m_i \vec{r}_i + m_j \vec{r}_j}{m_i + m_j} \right) \end{cases} \quad (2.13)$$

Soit l'angle φ_{ki} défini par la relation

$$\varphi_{ki} = \arctan \left((-)^P \sqrt{\frac{M m_j}{m_i m_k}} \right) \quad (2.14)$$

avec P pair (impair) si (kij) est une permutation paire (impaire) de (123).

Nous allons montrer que cet angle définit une rotation permettant de passer d'un ensemble de coordonnées à l'autre. Cette rotation s'écrit :

$$\begin{cases} \vec{x}_k &= -\cos \varphi_{ki} \vec{x}_i + \sin \varphi_{ki} \vec{y}_i \\ \vec{y}_k &= -\sin \varphi_{ki} \vec{x}_i - \cos \varphi_{ki} \vec{y}_i \end{cases} \quad (2.15)$$

En effet, calculons $\sin(\varphi_{ki})$ et $\cos(\varphi_{ki})$

$$\begin{cases} \cos \varphi_{ki} &= \sqrt{\frac{1}{1 + \tan^2 \varphi_{ki}}} = \sqrt{\frac{m_i m_k}{m_i m_k + M m_j}} \\ \sin \varphi_{ki} &= \sqrt{\frac{\tan \varphi_{ki}}{1 + \tan^2 \varphi_{ki}}} = -\sqrt{\frac{M m_j}{m_i m_k + M m_j}} \end{cases} \quad (2.16)$$

En remplaçant $\vec{x}_i, \vec{y}_i, \vec{x}_k, \vec{y}_k, \sin \varphi_{ki}$ et $\cos \varphi_{ki}$ dans le système 2.15, on démontre immédiatement les deux relations (tous les termes en \vec{r}_j disparaissent et les coefficients restent se simplifient).

2.2 Les coordonnées hypersphériques

2.2.1 La définition de l'hyperrayon et des cinq hyperangles

Le but des coordonnées hypersphériques est de rassembler les coordonnées métriques du problème en une seule : l'hyperrayon ρ .

En analyse numérique, il est souvent difficile de traiter des domaines de variation infinis car cela nécessite de modéliser les comportements asymptotiques. Les coordonnées métriques variant sur $[0, \infty]$, il est intéressant de limiter au maximum leur utilisation dans la modélisation.

Les coordonnées hypersphériques se fondent sur les coordonnées de Jacobi. Elles permettent de ramener N coordonnées vectorielles à une coordonnée radiale et $3N - 1$ coordonnées angulaires. Les angles qui sont définis ne sont pas forcément des angles géométriques du problème mais des variables ayant un domaine de variation borné (voir l'article de F. T. Smith [12] pour une présentation des coordonnées hypersphériques).

Plusieurs définitions de coordonnées hypersphériques existent, elles diffèrent par les coordonnées de Jacobi utilisées et par leurs définitions des variables angulaires (M. Foquet les présente dans son mémoire [14]). Nous utiliserons le jeu de coordonnées de Jacobi défini ci-dessus sans la coordonnée de centre de masse car nous avons vu que les coordonnées de Jacobi permettent de séparer ce mouvement. Nous aurons donc six coordonnées, une radiale et cinq angulaires.

Nous utiliserons dans notre modélisation la définition suivante de l'hyperrayon

$$\begin{aligned}
\rho^2 &= \vec{x}_k^2 + \vec{y}_k^2 \\
&= \frac{1}{M} (m_i m_j (\vec{r}_i - \vec{r}_j)^2 + m_k m_j (\vec{r}_j - \vec{r}_k)^2 + m_i m_k (\vec{r}_k - \vec{r}_i)^2) \\
&= \sum_{i=1}^3 \left(1 - \frac{m_i}{M}\right) \vec{x}_i^2
\end{aligned} \tag{2.17}$$

L'hyperrayon a les unités des coordonnées de Jacobi : des unités de longueur multipliées par la racine carrée d'unités de masses ($[\rho] = [\vec{x}_i] = [\vec{y}_i] = [LM^{1/2}]$). Il représente une grandeur physique importante : il est proportionnel au rayon en moyenne quadratique du système de trois particules élémentaires. Le rayon en moyenne quadratique est défini par la relation (en notant $\langle r_i^2 \rangle$ le rayon de matière en moyenne quadratique de la particule i)

$$\langle r^2 \rangle = \frac{1}{M} \left[\sum_{i=1}^3 m_i \langle \|\vec{r}_i - \vec{R}_{cm}\|^2 \rangle + \sum_{i=1}^3 m_i \langle r_i^2 \rangle \right] \tag{2.18}$$

Calculons le premier terme en utilisant l'expression des \vec{r}_i en fonction des coordonnées de Jacobi. En remplaçant, les termes en $\vec{X} \cdot \vec{Y}$ se simplifient et nous retrouvons l'expression $\vec{x}_i^2 + \vec{y}_i^2$ égale à ρ^2 . Nous obtenons donc

$$\langle r^2 \rangle = \frac{1}{M} \left[\langle \rho^2 \rangle + \sum_{i=1}^3 m_i \langle r_i^2 \rangle \right] \tag{2.19}$$

L'hyperrayon peut aussi être interprété comme le moment d'inertie d'un système à trois particules suivant l'axe perpendiculaire au plan formé par les trois particules.

Il existe beaucoup de définitions pour les cinq angles ; ici encore, il convient d'être très prudent et de vérifier la concordance des définitions.

Nous utiliserons les quatre angles directeurs des vecteurs \vec{x}_i et \vec{y}_i notés indifféremment (\hat{x}_i) et (\hat{y}_i) ou $(\theta_{x_i}, \varphi_{x_i})$ et $(\theta_{y_i}, \varphi_{y_i})$. Comme cinquième angle, nous définissons α de la manière suivante

$$\begin{cases} x_i = \rho \cos \alpha_i \\ y_i = \rho \sin \alpha_i \end{cases} \tag{2.20}$$

L'hyperangle α n'est donc pas un angle physique, sa tangente représente le rapport des normes des deux vecteurs \vec{x}_i et \vec{y}_i . Nous noterons parfois l'ensemble des cinq angles Ω_i .

Les domaines de variation de nos six coordonnées sont

$$\begin{cases} \rho & \Rightarrow [0, \infty] \\ \alpha & \Rightarrow [0, \frac{\pi}{2}] \\ \theta_{x_i} & \Rightarrow [0, \pi] \\ \varphi_{x_i} & \Rightarrow [0, 2\pi] \\ \theta_{y_i} & \Rightarrow [0, \pi] \\ \varphi_{y_i} & \Rightarrow [0, 2\pi] \end{cases} \tag{2.21}$$

au lieu des domaines de variation infinis des six composantes des deux vecteurs \vec{x}_i et \vec{y}_i .

L'élément de volume complet des coordonnées hypersphériques est

$$d\vec{x}d\vec{y} = x^2 y^2 dx dy d\hat{x} d\hat{y} = \rho^5 d\rho \sin^2 \alpha \cos^2 \alpha d\alpha d\hat{x} d\hat{y} = \rho^5 d\rho d\Omega \tag{2.22}$$

2.2.2 L'expression de l'énergie cinétique

Nous utilisons les coordonnées de Jacobi pour séparer le mouvement de centre de masse ; l'opérateur d'énergie cinétique T s'écrit

$$T = \frac{1}{2} (\vec{p}_{x_i}^2 + \vec{p}_{y_i}^2) \quad (2.23)$$

Nous exprimons les impulsions selon $p = -i\hbar\nabla$ et nous utilisons l'expression du laplacien

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{L^2}{r^2} \quad (2.24)$$

où l'opérateur cinétique orbital L intervient. A partir de la définition de l'hyperangle α (2.20), nous effectuons un changement de variables depuis x_i et y_i vers ρ et α_i :

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial x_i} = \cos \alpha_i \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{\sin \alpha_i}{\rho} \frac{\partial}{\partial \alpha_i} \\ \frac{\partial}{\partial y_i} = \sin \alpha_i \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{\cos \alpha_i}{\rho} \frac{\partial}{\partial \alpha_i} \end{cases} \quad (2.25)$$

Nous exprimons les dérivées partielles du second ordre et en remplaçant, nous obtenons la relation

$$\begin{aligned} \Delta_{x_i} + \Delta_{y_i} &= \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \alpha_i^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{2}{\rho \cos \alpha_i} \left(\cos \alpha_i \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{\sin \alpha_i}{\rho} \frac{\partial}{\partial \alpha_i} \right) \\ &+ \frac{2}{\rho \sin \alpha_i} \left(\sin \alpha_i \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{\cos \alpha_i}{\rho} \frac{\partial}{\partial \alpha_i} \right) - \frac{l^2(\hat{x}_i)}{\rho^2 \cos^2 \alpha_i} - \frac{l^2(\hat{y}_i)}{\rho^2 \sin^2 \alpha_i} \end{aligned} \quad (2.26)$$

où apparaissent les deux opérateurs moments cinétiques orbitaux $l^2(\hat{x}_i)$ et $l^2(\hat{y}_i)$. Cette expression se simplifie et nous permet d'exprimer l'énergie cinétique en séparant les parties radiales et angulaires

$$T = -\frac{\hbar^2}{2} (\Delta_{x_i} + \Delta_{y_i}) = -\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{5}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{K^2(\Omega_i)}{\rho^2} \right) \quad (2.27)$$

avec l'opérateur angulaire hypersphérique $K^2(\Omega_i)$ défini de la manière suivante

$$K^2(\Omega_i) = -\frac{\partial^2}{\partial \alpha_i^2} - 4 \cot(2\alpha_i) \frac{\partial}{\partial \alpha_i} + \frac{l^2(\hat{x}_i)}{\cos^2 \alpha_i} + \frac{l^2(\hat{y}_i)}{\sin^2 \alpha_i} \quad (2.28)$$

2.2.3 L'opérateur angulaire $K^2(\Omega_i)$

Nous avons vu que l'opérateur angulaire hypersphérique $K^2(\Omega_i)$ intervient dans l'expression de l'opérateur énergie cinétique. Avant d'aborder l'équation de Schrödinger, nous allons étudier les fonctions propres de l'opérateur $K^2(\Omega_i)$ qui, comme nous le verrons, joueront un rôle important dans la résolution de cette équation.

Nous définissons les harmoniques hypersphériques $Y_K^{l_x l_y m_x m_y}(\Omega)$ comme les fonctions propres communes de l'opérateur $K^2(\Omega)$ (avec la valeur propre $K(K+4)$) et des opérateurs $l^2(\hat{x})$, $l^2(\hat{y})$, $l_z(\hat{x})$ et $l_z(\hat{y})$.

$$K^2(\Omega) Y_K^{l_x l_y m_x m_y} = K(K+4) Y_K^{l_x l_y m_x m_y} \quad (2.29)$$

Nous ne notons plus les indices i pour ne pas alourdir les expressions mais il faut bien lire $x_i, y_i, \alpha_i, \hat{x}_i, \hat{y}_i$ et Ω_i . Nous allons montrer que les harmoniques hypersphériques s'écrivent

$$Y_K^{l_x l_y m_x m_y}(\Omega) = \mathcal{N}_K^{l_x l_y} (\cos \alpha)^{l_x} (\sin \alpha)^{l_y} P_n^{l_y+1/2, l_x+1/2}(\cos 2\alpha) Y_{l_x}^{m_x}(\hat{x}) Y_{l_y}^{m_y}(\hat{y}) \quad (2.30)$$

$$\mathcal{N}_K^{l_x l_y} = \left[\frac{2n!(K+2)(n+l_x+l_y+1)!}{\Gamma(n+l_x+\frac{3}{2})\Gamma(n+l_y+\frac{3}{2})} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (2.31)$$

pour K entier positif ou nul, l_x et l_y entiers tels que $n = (K - l_x - l_y)/2$ soit un entier positif ou nul, m_x compris entre $-l_x$ et l_x et m_y compris entre $-l_y$ et l_y . Dans cette équation, $\mathcal{N}_K^{l_x l_y}$ est un facteur de normalisation, $P_n^{\alpha, \beta}$ le polynôme de Jacobi de degré n de paramètres α et β , Y_l^m l'harmonique sphérique de moment cinétique l et de projection m et Γ la fonction Gamma.

Nous avons par définition des harmoniques sphériques

$$l^2(\hat{x})Y_l^m(\hat{x}) = l(l+1)Y_l^m(\hat{x}) \quad (2.32)$$

avec l entier positif ou nul et m compris entre $-l$ et l .

Pour démontrer l'expression des harmoniques hypersphériques (2.30), nous la remplaçons dans l'équation aux valeurs propres (2.29) en laissant un polynôme indéterminé :

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} - 4 \cot(2\alpha) \frac{\partial}{\partial \alpha} + \frac{l_x(l_x+1)}{\cos^2 \alpha} + \frac{l_y(l_y+1)}{\sin^2 \alpha} - K(K+4) \right] \times (\cos \alpha)^{l_x} (\sin \alpha)^{l_y} P(\cos 2\alpha) = 0 \quad (2.33)$$

Nous développons les dérivées partielles par rapport à α et nous effectuons un changement de variable. Nous posons $x = \cos 2\alpha$ pour obtenir l'équation

$$(1-x^2) \frac{d^2 P(x)}{dx^2} - ((l_x+l_y+3)x + l_y - l_x) \frac{dP(x)}{dx} + n(n+l_x+l_y+2)P(x) = 0 \quad (2.34)$$

Cette équation est équivalente à l'équation suivante dont la solution est le polynôme de Jacobi de degré n et de paramètres α et β (voir C.13)

$$(1-x^2) \frac{d^2 P_n^{\alpha, \beta}(x)}{dx^2} + (\beta - \alpha - (\alpha + \beta + 2)x) \frac{dP_n^{\alpha, \beta}(x)}{dx} + n(n + \alpha + \beta + 1)P_n^{\alpha, \beta}(x) = 0 \quad (2.35)$$

En identifiant les coefficients, on trouve

$$\begin{cases} n &= \frac{K-l_x-l_y}{2} & \text{entier} \geq 0 \\ \alpha &= l_y + \frac{1}{2} & \text{réel} > -1 \\ \beta &= l_x + \frac{1}{2} & \text{réel} > -1 \end{cases} \quad (2.36)$$

En normalisant les expressions avec le facteur $\mathcal{N}_K^{l_x l_y}$ (le calcul est fait en annexe), nous obtenons l'expression des harmoniques hypersphériques 2.30. L'opérateur $K^2(\Omega)$ est hermitique et ses fonctions propres forment une base orthonormée (voir annexe A et A.6).

Cette base n'est toutefois pas optimale car elle ne fait pas apparaître le nombre quantique L mais utilise les deux nombres quantiques l_x et l_y . Nous préférons composer les deux moments cinétiques pour donner le moment cinétique orbital total du système.

Définissons les harmoniques hypersphériques composées

$$Y_{KLM_L}^{l_x l_y} = \sum_{m_x m_y} (l_x l_y m_x m_y | LM_L) Y_K^{l_x l_y m_x m_y} \quad (2.37)$$

où $(l_x l_y m_x m_y | LM_L)$ est un coefficient de Clebsch-Gordan. Elles forment une base, montrons qu'elles sont orthogonales.

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_i} Y_{K'L'M'_L}^{l'_x l'_y *}(\Omega_i) Y_{KLM_L}^{l_x l_y}(\Omega_i) d\Omega_i &= \sum_{m_x m_y m'_x m'_y} (l_x l_y m_x m_y | LM_L) (l'_x l'_y m'_x m'_y | L'M'_L) \\ &\times \int_{\Omega_i} Y_{K'}^{l'_x l'_y m'_x m'_y *}(\Omega_i) Y_K^{l_x l_y m_x m_y}(\Omega_i) d\Omega_i \end{aligned} \quad (2.38)$$

Nous utilisons l'orthogonalité des harmoniques hypersphériques :

$$\int_{\Omega_i} Y_{K'}^{l'_x l'_y m'_x m'_y *}(\Omega_i) Y_K^{l_x l_y m_x m_y}(\Omega_i) d\Omega_i = \delta_{l_x l'_x} \delta_{l_y l'_y} \delta_{m_x m'_x} \delta_{m_y m'_y} \delta_{KK'} \quad (2.39)$$

et l'orthogonalité des coefficients de Clebsch-Gordan :

$$\sum_{m_x m_y} (l_x l_y m_x m_y | LM_L) (l_x l_y m_x m_y | L'M'_L) = \delta_{LL'} \delta_{M_L M'_L} \quad (2.40)$$

Nous obtenons alors la relation d'orthogonalité

$$\int_{\Omega_i} Y_{K'L'M'_L}^{l'_x l'_y *}(\Omega_i) Y_{KLM_L}^{l_x l_y}(\Omega_i) d\Omega_i = \delta_{l_x l'_x} \delta_{l_y l'_y} \delta_{KK'} \delta_{LL'} \delta_{M_L M'_L} \quad (2.41)$$

Les harmoniques hypersphériques composées forment donc une base de fonctions propres de K^2 , de L^2 , de $l^2(\hat{x})$, de $l^2(\hat{y})$ et de L_z ; nous verrons que nous pourrons l'utiliser pour développer notre fonction d'onde inconnue. L'opérateur parité change les orientations des vecteurs \vec{x} et \vec{y} , il laisse l'hyperangle α invariant mais fait varier les quatre angles directeurs des deux vecteurs. La parité des harmoniques hypersphériques est le produit des parités des deux harmoniques sphériques. Les harmoniques sphériques ont comme parité $(-)^l$ (voir [2]), les harmoniques hypersphériques sont donc fonctions propres de l'opérateur parité avec la valeur propre $(-)^{l_x + l_y}$.

2.2.4 Le traitement de l'équation de Schrödinger

Comme nous l'avons vu au premier chapitre, nous nous intéressons au niveau fondamental de ${}^6\text{He}$ en ne tenant compte que de la composante ayant un spin total nul. Nous étudions donc l'état $J = L = 0$ (et $S = 0$ mais nous ne l'écrivons pas) et le noyau ${}^6\text{He}$ est modélisé par un système à trois particules sans spins.

Partons de la définition de l'hamiltonien d'un système isolé à trois particules interagissant deux à deux :

$$H = \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} + \frac{p_3^2}{2m_3} + V^3(\|\vec{r}_1 - \vec{r}_2\|) + V^1(\|\vec{r}_2 - \vec{r}_3\|) + V^2(\|\vec{r}_3 - \vec{r}_1\|) \quad (2.42)$$

Les potentiels ne dépendent ici que de la coordonnée relative entre les deux particules mais nous avons vu au premier chapitre que l'interaction entre le noyau α et les neutrons comprend notamment un terme de potentiel central et un terme de potentiel orbital dépendant du moment cinétique orbital du neutron. Néanmoins, pour des raisons de lisibilité, tout le développement qui va suivre est fait en ne tenant compte que de la composante centrale. La transposition aux autres composantes est immédiate.

Nous utilisons la définition des coordonnées de Jacobi :

$$V^i(\|\vec{r}_j - \vec{r}_k\|) = V^i\left(\sqrt{\frac{m_j + m_k}{m_j m_k}} x_i\right) = \tilde{V}^i(x_i) \quad (2.43)$$

Nous choisissons de ne plus écrire le symbole tilde et de redéfinir ainsi les potentiels. Nous utilisons l'expression de l'énergie cinétique dans des coordonnées hypersphériques (2.27) :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_N} \left[\frac{1}{\rho^5} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho^5 \frac{\partial}{\partial \rho} \right) - \frac{K^2(\Omega_i)}{\rho^2} \right] + V^i(\rho \cos \alpha_i) + V^j(\rho \cos \alpha_j) + V^k(\rho \cos \alpha_k) \quad (2.44)$$

Le facteur $\hbar^2/2$ provient de notre expression de T , le facteur $1/m_N$ provient de l'utilisation de la masse nucléaire m_N (moyenne harmonique des masses du proton et du neutron) comme unité de masse. Nous choisissons comme unités les fm (fermi ou 10^{-15} m) pour unité de distance, les MeV (10^6 eV soit environ $1.602 \cdot 10^{-13}$ J) pour unité d'énergie et les masses nucléaires m_N pour unité de masse (soit environ 938.918 MeV/ c^2). Le facteur $\hbar^2/2m_N$ vaut alors 20.736 MeV fm².

L'équation de Schrödinger s'écrit

$$H \Psi_{LM_L \lambda} = E_\lambda \Psi_{LM_L \lambda} \quad (2.45)$$

avec la fonction d'onde inconnue $\Psi_{LM_L \lambda}$. Les bons nombres quantiques sont : L , le moment cinétique orbital total du système, M_L la projection de ce moment et λ le nombre quantique de l'énergie.

Nous développons la fonction d'onde

$$\Psi_{LM_L \lambda} = \rho^{-5/2} \sum_{K l_x l_y} \chi_{KL\lambda}^{l_x l_y}(\rho) Y_{KLM_L}^{l_x l_y}(\Omega_i) = \sum_K \Psi_{LM_L \lambda}^K \quad (2.46)$$

où nous avons défini les fonctions d'ondes partielles $\Psi_{LM_L \lambda}^K$. Nous utilisons la base des harmoniques hypersphériques composées pour faire apparaître le bon nombre quantique L . Pour alléger les notations, nous ne noterons plus l'indice λ des fonctions χ mais elles dépendent bien sûr de l'énergie de l'état considéré.

Les indices K, l_x, l_y sont limités par la définition des harmoniques hypersphériques. Il faut que $n = (K - l_x - l_y)/2$ soit un entier positif ou nul. Nous ne nous intéresserons qu'au cas $L = 0$, cette valeur impose l'égalité de l_x et l_y . De plus, comme nous l'avons vu au premier chapitre, la parité paire du niveau fondamental de ${}^6\text{He}$ impose cette égalité pour $L = 0$ ou 1. La connaissance du développement de la fonction d'onde et de la parité des harmoniques hypersphériques nous fournit une interprétation différente de la condition : la parité des harmoniques doit être paire ce qui impose directement l'égalité des deux moments cinétiques (voir la fin du chapitre 2.2.3).

Nous avons donc une succession de triplets (K, l_x, l_y) du type $\{(000), (200), (211), (400), (411), (422), \dots\}$. Nous conservons néanmoins notre notation en différenciant l_x et l_y pour rester dans un cadre plus général.

Les variables Ω_i dépendent du repère choisi (l'hyperangle α par exemple n'est pas conservé par les hyperrotations); de la même façon, les nombres quantiques l_x, l_y, m_x et m_y varient avec l'indice i mais K, L et M_L sont conservés car d'une part L et M_L sont de bons nombres quantiques et d'autre part les changements de repère sont des

hyperrotations qui conservent K . Nous ne notons pas ici les indices i pour alléger les expressions.

En remplaçant le développement dans l'équation de Schrödinger, nous obtenons

$$\begin{aligned} & \sum_{Kl_xl_y} Y_{KLM_L}^{l_xl_y} \left[\frac{d^2 \chi_{KL}^{l_xl_y}}{d\rho^2} + \frac{\chi_{KL}^{l_xl_y}}{\rho^2} \left(K(K+4) + \frac{15}{4} \right) + \frac{2m_N E}{\hbar^2} \chi_{KL}^{l_xl_y} \right] \\ &= \sum_{Kl_xl_y} \frac{2m_N}{\hbar^2} \left(V^i(\rho \cos \alpha_i) + V^j(\rho \cos \alpha_j) + V^k(\rho \cos \alpha_k) \right) \chi_{KL}^{l_xl_y}(\rho) Y_{KLM_L}^{l_xl_y} \end{aligned} \quad (2.47)$$

Nous posons $V = V^i(\rho \cos \alpha_i) + V^j(\rho \cos \alpha_j) + V^k(\rho \cos \alpha_k)$, nous multiplions cette équation par une fonction quelconque de notre base et utilisons la relation d'orthogonalité des harmoniques hypersphériques pour écrire :

$$\begin{aligned} & \frac{d^2 \chi_{KL}^{l_xl_y}}{d\rho^2} + \frac{\chi_{KL}^{l_xl_y}}{\rho^2} \left(K(K+4) + \frac{15}{4} \right) + \frac{2m_N E}{\hbar^2} \chi_{KL}^{l_xl_y} \\ &= \frac{2m_N}{\hbar^2} \sum_{K'l'_x l'_y} \int_{\Omega_i} Y_{KLM_L}^{l_xl_y}(\Omega_i) V Y_{K'L'M'_L}^{l'_x l'_y}(\Omega_i) d\Omega_i \end{aligned} \quad (2.48)$$

Soient $\mathcal{L}_K = K + 3/2$ et les coefficients

$$W_{K'l'_x l'_y, Kl_xl_y}^L(\rho) = \int_{\Omega_i} Y_{KLM_L}^{l_xl_y*}(\Omega_i) V Y_{K'L'M'_L}^{l'_x l'_y}(\Omega_i) d\Omega_i \quad (2.49)$$

En toute généralité, nous devrions écrire $W_{K'L'M'_L}^{l'_x l'_y, Kl_xl_y}(\rho)$. Cependant, pour les potentiels que nous utiliserons, les éléments de matrice W ne sont différents de zéro que si les moments cinétiques L des harmoniques hypersphériques sont identiques (voir 3.7) et ils ne dépendent pas du nombre quantique M_L .

En effet les potentiels envisagés ne dépendent pas des angles \hat{x} et \hat{y} , V est donc conservé par les rotations associées au moment cinétique L . Les coefficients W sont des éléments de matrice entre V , un opérateur tensoriel irréductible de rang zéro associé à L , et les harmoniques hypersphériques, proportionnelles aux fonctions propres de l'opérateur L ; dans ce cas, le théorème de Wigner-Eckart interdit aux coefficients W de dépendre de la projection du moment cinétique M_L (voir [15]). Le système d'équations, les fonctions radiales hypersphériques χ et les coefficients W ne dépendent donc pas de M_L .

Nous obtenons le système d'équations couplées suivant :

$$\begin{aligned} \forall \chi_{KL}^{l_xl_y}(\rho) : & \left[\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{\mathcal{L}_K(\mathcal{L}_K+1)}{\rho^2} + \frac{2m_N}{\hbar^2} \left(E - W_{Kl_xl_y, Kl_xl_y}^L(\rho) \right) \right] \chi_{KL}^{l_xl_y}(\rho) \\ &= \frac{2m_N}{\hbar^2} \sum_{K'l'_x l'_y} W_{K'l'_x l'_y, Kl_xl_y}^L(\rho) \chi_{K'L}^{l'_x l'_y}(\rho) \end{aligned} \quad (2.50)$$

La somme sur $K'l'_x l'_y$ porte sur toutes les valeurs sauf celles du terme Kl_xl_y que nous avons fait passer dans l'autre membre.

Examinons les comportements des solutions quand ρ tend vers zéro et vers l'infini. Les fonctions d'ondes doivent être de carré sommable, leur développement en fonctions χ implique que ces dernières doivent s'annuler à l'origine et tendre vers zéro quand ρ tend vers l'infini.

Nous faisons en plus l'hypothèse que le potentiel est borné ou ne tend pas vers l'infini quand ρ tend vers zéro aussi vite que $1/\rho^2$. Les singularités à l'origine dans notre système d'équations dépendent donc uniquement du terme $\mathcal{L}_K(\mathcal{L}_K + 1)/\rho^2$ et l'origine est un point singulier régulier. Pour déterminer le comportement à l'origine des solutions, nous

développons la solution en série de Frobenius dont le terme de degré minimum est en ρ^s , nous remplaçons dans l'équation et nous annulons le coefficient du terme de degré le plus bas (cette méthode est utilisée dans [2]) :

$$-s(s+1) + \mathcal{L}_K(\mathcal{L}_K + 1) = 0 = -(s + \mathcal{L}_K)(s - \mathcal{L}_K - 1) \quad (2.51)$$

Deux comportements sont possibles. Le premier en $\rho^{-\mathcal{L}_K}$ n'annule pas la fonction à l'origine ; le seul comportement possible est donc $\rho^{\mathcal{L}_K+1}$. Nous avons donc

$$\chi_{KL}^{l_x l_y}(\rho) \underset{\rho \rightarrow 0}{\sim} \rho^{K+\frac{5}{2}} \text{ et } \chi_{KL}^{l_x l_y}(\rho) \underset{\rho \rightarrow \infty}{\rightarrow} 0 \quad (2.52)$$

Le comportement à l'origine de la fonction d'onde partielle $\Psi_{LM_L\lambda}^K(\rho)$ est donc

$$\Psi_{LM_L\lambda}^K(\rho) \underset{\rho \rightarrow 0}{\sim} \rho^K \quad (2.53)$$

Le système d'équations est exactement équivalent à l'équation de Schrödinger. Dans la pratique, nous devons le tronquer, c'est-à-dire limiter le développement de la fonction d'onde en harmoniques hypersphériques. La résolution du problème se fait en deux étapes : le calcul des coefficients W puis la résolution du système d'équations.

Outre la méthode des coordonnées hypersphériques, d'autres modélisations de problèmes à trois corps sont possibles, notamment la méthode de Faddeev ("Coordinate Space Faddeev approach" ou CSF), une extension du modèle en couche ("Cluster - Orbital Shell Model" ou COSM) et une méthode utilisant une fonction de Green ("two particle Green's Function Method" ou GFM). Nous ne les présentons pas ici, une bonne présentation en est faite dans [8].

2.2.5 Les coefficients de Raynal-Revai

Comme nous l'avons vu, la résolution de l'équation de Schrödinger nécessite le calcul d'éléments de matrice : les coefficients W . Ils dépendent des trois composantes du potentiel $V^i(\rho \cos \alpha_i)$, $V^j(\rho \cos \alpha_j)$ et $V^k(\rho \cos \alpha_k)$. Si nous utilisons un repère défini par la particule i , le premier terme se calcule directement ; le calcul des deux autres est par contre plus complexe car la base hypersphérique du développement de la fonction d'onde n'est pas la même que celle du potentiel.

Une première méthode de résolution consiste à développer les potentiels en harmoniques hypersphériques (correspondant au même jeu de coordonnées que celui du développement de la fonction d'onde) puis à calculer les intégrales de produits de trois harmoniques hypersphériques. Cette méthode est limitée au cas où les développements des deux potentiels sont calculables analytiquement (voir l'article de Fabre de la Ripelle [16]).

La seconde méthode part du raisonnement inverse : au lieu de développer les potentiels, nous développons les deux harmoniques hypersphériques. Nous utilisons une transformation unitaire (similaire à l'hyperrotation 2.15) pour développer les harmoniques hypersphériques du développement de la fonction d'onde dans les coordonnées hypersphériques du potentiel, et nous intégrons sur toutes les variables angulaires.

Exprimons le développement des harmoniques hypersphériques d'un jeu de coordonnées en harmoniques d'un autre jeu

$$Y_{KLM_L}^{l_x l_y}(\Omega_i) = \sum_{l_x l_y} \langle l_x l_y | l_x l_y \rangle_{KL} Y_{KLM_L}^{l_x l_y}(\Omega_k) \quad (2.54)$$

où $\langle l_{x_k} l_{y_k} | l_{x_i} l_{y_i} \rangle_{KL}$ sont les coefficients de Raynal-Revai. Remarquons que cette transformation conserve les nombres quantiques L et M_L mais aussi K (la conservation de ces nombres quantiques est bien sûr liée aux propriétés de la rotation d'un jeu de coordonnées de Jacobi à un autre). La somme sur l_{x_k} et l_{y_k} est finie car ces indices sont bornés par $K/2$.

Ces coefficients peuvent être exprimés en utilisant l'orthogonalité de la base :

$$\langle l_{x_k} l_{y_k} | l_{x_i} l_{y_i} \rangle_{KL} = \int Y_{KLM_L}^{l_{x_i} l_{y_i} *}(\Omega_i) Y_{KLM_L}^{l_{x_k} l_{y_k}}(\Omega_k) d\Omega_k \quad (2.55)$$

$$\begin{aligned} &= \sum_{m_{x_i} m_{y_i} m_{x_k} m_{y_k}} (l_{x_i} m_{x_i} l_{y_i} m_{y_i} | LM_L) (l_{x_k} m_{x_k} l_{y_k} m_{y_k} | LM_L) \\ &\times \int Y_K^{l_{x_i} m_{x_i} l_{y_i} m_{y_i} *}(\Omega_i) Y_K^{l_{x_k} m_{x_k} l_{y_k} m_{y_k}}(\Omega_k) d\Omega_k \end{aligned} \quad (2.56)$$

Cette dernière intégrale peut être calculée exactement en utilisant l'hyperrotation 2.15 et des fonctions génératrices des harmoniques hypersphériques (J. Raynal et J. Revai détaillent ces calculs dans leur article [13]). Finalement, l'expression des coefficients est assez lourde, elle fait notamment intervenir un produit d'un coefficient $9j$, de quatre coefficients $3jm$ et d'une somme de sinus et de cosinus de φ_{ki} , l'angle de l'hyperrotation (l'expression exacte est donnée en annexe B).

Cette méthode nous permet de ramener le calcul des éléments de matrice W à la résolution des trois intégrales des composantes du potentiel multipliées par deux harmoniques hypersphériques sur les cinq variables angulaires hypersphériques de la composante du potentiel (il n'y a pas d'intégrale sur l'hyperrayon car les coefficients W en dépendent).

Notons ${}^i W_{K'l'_x l'_y, Kl_{x_i} l_{y_i}}^L(\rho)$ la partie des coefficients W due au potentiel entre les particules j et k :

$${}^i W_{K'l'_x l'_y, Kl_{x_i} l_{y_i}}^L(\rho) = \int_{\Omega_i} Y_{KLM_L}^{l_{x_i} l_{y_i} *}(\Omega_i) V^i(\rho \cos \alpha_i) Y_{K'LM'_L}^{l'_x l'_y}(\Omega_i) d\Omega_i \quad (2.57)$$

nous obtenons l'expression

$$\begin{aligned} &W_{K'l'_x l'_y, Kl_{x_i} l_{y_i}}^L(\rho) = {}^i W_{K'l'_x l'_y, Kl_{x_i} l_{y_i}}^L(\rho) \\ &+ \sum_{l_{x_k} l_{y_k} l'_{x_k} l'_{y_k}} \langle l_{x_k} l_{y_k} | l_{x_i} l_{y_i} \rangle_{KL} \langle l'_{x_k} l'_{y_k} | l'_{x_i} l'_{y_i} \rangle_{K'L} {}^k W_{K'l'_x l'_y, Kl_{x_k} l_{y_k}}^L(\rho) \\ &+ \sum_{l_{x_j} l_{y_j} l'_{x_j} l'_{y_j}} \langle l_{x_j} l_{y_j} | l_{x_i} l_{y_i} \rangle_{KL} \langle l'_{x_j} l'_{y_j} | l'_{x_i} l'_{y_i} \rangle_{K'L} {}^j W_{K'l'_x l'_y, Kl_{x_j} l_{y_j}}^L(\rho) \end{aligned} \quad (2.58)$$

Le nombre de coefficients à calculer dépend du nombre quantique hypersphérique maximum K_M pris en compte (en effet, nous verrons au chapitre suivant que nous devons tronquer le système d'équations et limiter K). Pour chaque K , nous devons calculer $(K/2 + 1)^2$ coefficients; en sommant ces carrés, nous obtenons la relation donnant le nombre total de coefficients à calculer N_T

$$N_T = \frac{K_M^3}{24} + \frac{3K_M^2}{8} + \frac{13K_M}{12} + 1 \quad (2.59)$$

Chapitre 3

La Résolution des Equations Hypersphériques

3.1 Le calcul des éléments de matrice W

Nous utilisons les coefficients de Raynal-Revai pour exprimer les éléments de matrice W sous la forme d'intégrales du type (voir 2.58 et soit I cette intégrale) :

$$I = \int_{\Omega} Y_{KLM_L}^{l_x l_y *}(\Omega) V(\rho \cos \alpha) Y_{K'L'M'_L}^{l'_x l'_y}(\Omega) d\Omega \quad (3.1)$$

avec la base fondée sur les harmoniques hypersphériques (2.30)

$$\begin{aligned} Y_{KLM_L}^{l_x l_y}(\Omega) &= \sum_{m_x m_y} (l_x l_y m_x m_y | LM_L) Y_K^{l_x l_y m_x m_y}(\Omega) \\ Y_K^{l_x l_y m_x m_y}(\Omega) &= \mathcal{N}_K^{l_x l_y}(\cos \alpha)^{l_x} (\sin \alpha)^{l_y} P_n^{l_y+1/2, l_x+1/2}(\cos 2\alpha) Y_{l_x}^{m_x}(\hat{x}) Y_{l_y}^{m_y}(\hat{y}) \\ \mathcal{N}_K^{l_x l_y} &= \left[\frac{2n!(K+2)(n+l_x+l_y+1)!}{\Gamma(n+l_x+\frac{3}{2})\Gamma(n+l_y+\frac{3}{2})} \right]^{\frac{1}{2}} \\ n &= \frac{K-l_x-l_y}{2} \end{aligned} \quad (3.2)$$

Les différents potentiels que nous envisagerons ne dépendent que de la norme de la coordonnée de Jacobi \vec{x} (ils peuvent dépendre d'un nombre quantique de moment cinétique mais cela ne change rien ici), c'est-à-dire en coordonnées hypersphériques de l'hypercône ρ multiplié par le cosinus de l'hyperangle α mais pas des variables angulaires hypersphériques (θ_x, φ_x) et (θ_y, φ_y) . Ceci nous permet d'effectuer analytiquement l'intégrale sur ces quatre variables angulaires.

Nous développons les fonctions de la base

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} Y_{KLM_L}^{l_x l_y *}(\Omega) V(\rho \cos \alpha) Y_{K'L'M'_L}^{l'_x l'_y}(\Omega) d\Omega &= \sum_{m_x m_y m'_x m'_y} (l_x l_y m_x m_y | LM_L) (l'_x l'_y m'_x m'_y | L' M'_L) \\ &\times \int_{\Omega} Y_K^{l_x l_y m_x m_y *}(\Omega) V(\rho \cos \alpha) Y_{K'}^{l'_x l'_y m'_x m'_y}(\Omega) d\Omega \end{aligned} \quad (3.3)$$

Nous remplaçons les harmoniques hypersphériques et l'élément de volume $d\Omega$ par leurs expressions (2.30 et 2.22) et nous utilisons l'orthogonalité des harmoniques sphériques

$$\int Y_{m_1}^{l_1 *}(\hat{x}) Y_{m_2}^{l_2}(\hat{x}) d\hat{x} = \delta_{l_1 l_2} \delta_{m_1 m_2} \quad (3.4)$$

Ceci nous permet d'écrire

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} Y_{KLM_L}^{l_x l_y *}(\Omega) V(\rho \cos \alpha) Y_{K'L'M'_L}^{l'_x l'_y}(\Omega) d\Omega = \sum_{m_x m_y} (l_x l_y m_x m_y | LM_L) (l_x l_y m_x m_y | L' M'_L) \\ \times \delta_{l_x l'_x} \delta_{l_y l'_y} \int_0^{\frac{\pi}{2}} F_K^{l_x l_y}(\alpha) V(\rho \cos \alpha) F_{K'}^{l'_x l'_y}(\alpha) \sin^2 \alpha \cos^2 \alpha d\alpha \end{aligned} \quad (3.5)$$

où $F_K^{l_x l_y}(\alpha)$ est une fonction de l'angle α définie par la dépendance en α des harmoniques hypersphériques (soit les harmoniques sans le produit des deux harmoniques sphériques) :

$$F_K^{l_x l_y}(\alpha) = \mathcal{N}_K^{l_x l_y} (\cos \alpha)^{l_x} (\sin \alpha)^{l_y} P_n^{l_y+1/2, l_x+1/2}(\cos 2\alpha) \quad (3.6)$$

Nous utilisons l'orthogonalité des coefficients de Clebsch-Gordan (2.40) et nous obtenons l'expression suivante à calculer

$$\begin{aligned} I = \delta_{l_x l'_x} \delta_{l_y l'_y} \delta_{LL'} \delta_{M_L M'_L} \mathcal{N}_K^{l_x l_y} \mathcal{N}_{K'}^{l'_x l'_y} \int_0^{\frac{\pi}{2}} (\cos \alpha)^{2(l_x+1)} (\sin \alpha)^{2(l_y+1)} P_n^{l_y+1/2, l_x+1/2}(\cos 2\alpha) \\ \times V(\rho \cos \alpha) P_{n'}^{l'_y+1/2, l'_x+1/2}(\cos 2\alpha) d\alpha \end{aligned} \quad (3.7)$$

Cette intégrale sur α peut être calculée analytiquement pour certains potentiels (notamment pour le potentiel harmonique comme nous le verrons au chapitre suivant) mais se calcule généralement numériquement. Pour cette intégration numérique, nous utiliserons une forme de quadrature de Gauss impliquant des polynômes de Legendre (une description des différentes quadratures de Gauss peut être trouvée dans [17]).

$$\int_{-1}^{+1} f(x) dx = \sum_{i=1}^n w_i f(x_i) + R_n \quad (3.8)$$

où l'abscisse x_i est le $i^{\text{ième}}$ zéro du polynôme de Legendre de degré n , $P_n(x)$ (voir l'Annexe C sur les polynômes de Legendre) et avec

$$w_i = \frac{2}{(1-x_i^2)(P'_n(x_i))^2} \quad (3.9)$$

$$R_n = \frac{2^{2n+1}(n!)^4}{(2n+1)((2n)!)^3} f^{(2n)}(\xi) \text{ avec } -1 \leq \xi \leq 1 \quad (3.10)$$

Pour obtenir une intégrale de cette forme, nous effectuons un changement de variable et posons $v = \tan(\alpha/2)$, nous obtenons l'intégrale à effectuer

$$\begin{aligned} \int_0^1 \left(\frac{1-v^2}{1+v^2} \right)^{2(l_x+1)} \left(\frac{2v}{1+v^2} \right)^{2(2l_y+1)} P_n^{l_y+\frac{1}{2}, l_x+\frac{1}{2}} \left(2 \left(\frac{1-v^2}{1+v^2} \right)^2 - 1 \right) V \left(\rho \frac{1-v^2}{1+v^2} \right) \\ \times P_{n'}^{l'_y+\frac{1}{2}, l'_x+\frac{1}{2}} \left(2 \left(\frac{1-v^2}{1+v^2} \right)^2 - 1 \right) \frac{2}{1+v^2} dv \end{aligned} \quad (3.11)$$

L'intégrante ne comporte que des puissances paires de v , nous pouvons donc prendre un domaine d'intégration symétrique par rapport à l'origine $[-1, +1]$ et ne tenir compte que des abscisses positives.

Pour résoudre le problème, nous devons calculer un ensemble d'éléments de matrice W ; chacun de ces éléments se compose de trois intégrales. La première est directe à calculer et les deux autres se ramènent à une combinaison linéaire d'intégrales directes. Chaque intégrale directe doit être effectuée numériquement avec la quadrature de Gauss décrite ci-dessus. Pour cette méthode, un relativement grand nombre de points doit être utilisé pour obtenir une bonne convergence, entre 48 et 128 points selon le type de potentiel.

3.2 La résolution du système et le réseau de Lagrange

Nous devons résoudre un système infini d'équations différentielles ordinaires du second ordre couplées (2.50). Une troncature du système est inévitable, nous réduisons donc le problème à la résolution d'un système de N équations différentielles couplées.

$$\begin{aligned} \forall K \leq K_M : \quad & \left[\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{\mathcal{L}_K(\mathcal{L}_{K+1})}{\rho^2} + \frac{2m_N}{\hbar^2} \left(E - W_{Kl_x l_y, K l_x l_y}^L(\rho) \right) \right] \chi_{KL}^{l_x l_y}(\rho) \\ & = \frac{2m_N}{\hbar^2} \sum_{K' l'_x l'_y} W_{K' l'_x l'_y, K l_x l_y}^L(\rho) \chi_{K'L}^{l'_x l'_y}(\rho) \end{aligned} \quad (3.12)$$

Si nous nous imposons une limite supérieure pour K , nous limitons le système car l_x et l_y doivent être tels que $n = (K - l_x - l_y)/2$ soit un entier positif ou nul. Par contre, ce système doit être résolu entièrement pour chaque valeur de L ($0, 1, \dots$). Nous ne nous intéresserons qu'au cas $L = 0$; nous avons vu au premier chapitre que cette valeur nulle et la parité paire impliquent l'égalité de l_x et l_y . Nous devons donc considérer les triplets de valeurs $\{(000), (200), (211), (400), (411), (422), \dots, (K_M \frac{K_M}{2} \frac{K_M}{2})\}$. Nous remarquons que la limite K_M doit être paire. Nous avons au total

$$1 + 2 + \dots + \left(\frac{K_M}{2} + 1\right) = \frac{1}{2} \left(\frac{K_M}{2} + 1\right) \left(\frac{K_M}{2} + 2\right) = \frac{K_M^2}{8} + \frac{3K_M}{4} + 1 \quad (3.13)$$

Nous étudierons la convergence de cette troncature et nous verrons que les résultats dépendent très fortement du type de potentiel.

Plusieurs méthodes sont envisageables pour résoudre ce système, nous utiliserons la méthode des réseaux de Lagrange.

3.2.1 Le principe de la méthode des réseaux de Lagrange

La méthode des réseaux de Lagrange consiste à développer la fonction sur une base particulière et à résoudre ensuite une forme de problème aux valeurs propres. Le type de base choisie étant crucial, je vais commencer par décrire ses propriétés.

Soient un ensemble de points $x_i : i = 1, \dots, N$ et un ensemble de fonctions $f_i(x) : i = 1, \dots, N$ possédant la "propriété de Lagrange" (pour une description de la méthode voir l'article de M. Vincke, L. Malegat and D. Baye [19]) :

$$f_i(x_j) = \lambda_i^{-1/2} \delta_{ij} \quad (3.14)$$

avec les constantes λ_i intervenant dans la règle de Gauss (voir [17] pour une description) :

$$\int_0^\infty g(x) dx \approx \sum_{k=1}^N \lambda_k g(x_k) \quad (3.15)$$

Nous prenons l'intervalle $[0, \infty]$ car nous utiliserons cette méthode pour résoudre un système d'équations en ρ qui varie sur cet intervalle, mais il existe des réseaux de Lagrange développés pour d'autres intervalles.

On impose l'exactitude de la quadrature si $g(x)$ est un produit d'une exponentielle ($\exp(-x)$) avec un polynôme de degré $2N - 1$. Cette condition et la propriété de Lagrange définissent les paramètres λ_i , le réseau de points à utiliser et les fonctions $f_i(x)$.

Sur l'intervalle $[0, \infty]$, un réseau pratique est défini par les zéros du polynôme de Laguerre de degré N (voir l'Annexe C sur les polynômes de Laguerre). Les fonctions sont proportionnelles à un produit d'une exponentielle et d'un polynôme de degré $N - 1$:

$$f_i(x) \propto \frac{L_N(x)}{x - x_i} e^{-\frac{x}{2}} \quad (3.16)$$

et les constantes λ_i sont données par

$$\lambda_i = \frac{(n!)^2 x_i e^{x_i}}{(n+1)^2 [L_{n+1}(x_i)]^2} \quad (3.17)$$

Montrons que ces fonctions sont orthogonales. Nous utilisons la propriété de Lagrange et la quadrature de Gauss qui est exacte car le produit $f_i f_j$ est un produit d'une exponentielle et d'un polynôme de degré $2N - 2$ (soit inférieur à la limite $2N - 1$).

$$\begin{aligned} \int_0^\infty f_i(x) f_j(x) dx &= \sum_k \lambda_k f_i(x_k) f_j(x_k) \\ &= \sum_k \lambda_k \lambda_k^{-1/2} \delta_{ik} \lambda_k^{-1/2} \delta_{jk} \\ &= \delta_{ij} \end{aligned} \quad (3.18)$$

Calculons les éléments de matrice d'un opérateur $V(x)$

$$\begin{aligned} \int_0^\infty f_i(x) V(x) f_j(x) dx &\approx \sum_k \lambda_k f_i(x_k) V(x_k) f_j(x_k) \\ &\approx V(x_i) \delta_{ij} \end{aligned} \quad (3.19)$$

et ceux d'un opérateur dérivée seconde $-\frac{d^2}{dx^2}$

$$\begin{aligned} \int_0^\infty f_i(x) \left(-\frac{d^2}{dx^2}\right) f_j(x) dx &= -\sum_k \lambda_k f_i(x_k) f_j''(x_k) \\ &= -\lambda_i^{1/2} f_j''(x_i) \end{aligned} \quad (3.20)$$

Pour cette relation, la quadrature de Gauss est exacte car la dérivée seconde d'une fonction f_i est proportionnelle au produit d'un polynôme de degré $N - 1$ et d'une exponentielle.

3.2.2 L'utilisation de la méthode du réseau de Lagrange

Les fonctions décrites ci-dessus ont des propriétés intéressantes mais ne peuvent pas former une base de développement pour les fonctions radiales hypersphériques car elle ne s'annulent pas à l'origine. Nous ne les utiliserons donc pas directement mais multipliées par une puissance de x . Cette opération est appelée "régularisation" (voir les articles [19] et [18]).

Nous avons vu que les fonctions solutions de notre système ont un comportement à l'origine du type $\rho^{K+5/2}$ qui n'est pas représentable en un nombre fini de puissances entières (voir 2.52). Pour reproduire le comportement à l'origine, nous aurions intérêt à

choisir un facteur multiplicatif s'approchant de $(\frac{x}{x_i})^{5/2}$ (le dénominateur en x_i permet de conserver la propriété de Lagrange).

Notre système contient des éléments de matrice de $\frac{1}{\rho^2}$. Ces intégrales devant converger pour toute fonction f_i , la puissance de x de notre facteur multiplicatif doit être de degré supérieur ou égal à un.

Par contre, en changeant la définition des fonctions f_i , nous augmentons le degré des polynômes et perdons l'exactitude des approximations de Gauss. Soient les fonctions de Lagrange régularisées $\hat{f}_i(x)$. Nous voulons conserver les trois relations suivantes (les deux premières à l'approximation de Gauss et la troisième exactement)

$$\begin{cases} \int_0^\infty \hat{f}_i(x) \hat{f}_j(x) dx \approx \delta_{ij} \\ \int_0^\infty \hat{f}_i(x) \left(-\frac{d^2}{dx^2}\right) \hat{f}_j(x) dx \approx -\lambda_i^{1/2} \hat{f}_j''(x_i) \\ \int_0^\infty \hat{f}_i(x) \left(\frac{1}{x^2}\right) \hat{f}_j(x) dx = \frac{1}{x_i^2} \delta_{ij} \end{cases} \quad (3.21)$$

Pour que les deux premières relations restent approchées (mais plus rigoureusement exactes), nous devons limiter le degré en x du coefficient car l'approximation de Gauss est d'autant meilleure que le degré du polynôme est proche de $2N - 1$.

Le premier membre de la deuxième équation est hermitique; une bonne approximation impose donc la symétrie du deuxième membre. Cette condition et l'exactitude de la troisième équation ne sont vérifiées que si la puissance de x du facteur multiplicatif est inférieure ou égale à $3/2$. Dans ce cas, le polynôme intervenant dans la troisième équation est d'ordre $2N - 1$ soit la limite d'exactitude de l'approximation de Gauss.

Les conditions sur la puissance de x (puissance supérieure à un, inférieure à trois-demi et demi-entière) nous imposent le facteur $(\frac{x}{x_i})^{3/2}$.

Nous utiliserons donc la base de N fonctions $f_i(x)$, $i = 1, \dots, N$ (nous ne notons plus les symboles “ $\hat{}$ ”):

$$f_i(x) = (-)^i \frac{x^{3/2}}{x_i} \frac{L_N(x)}{x - x_i} \exp\left(-\frac{x}{2}\right) \quad (3.22)$$

où $L_N(x)$ est le polynôme de Laguerre de degré N et x_i sont ses zéros ($L_n(x_i) = 0$, $i = 1, \dots, N$). Nous considérons le développement de $\chi_{KL}^{l_x l_y}$

$$\chi_{KL}^{l_x l_y} = \frac{1}{\sqrt{h}} \sum_{j=1}^N C_j^{KL l_x l_y} f_j\left(\frac{\rho}{h}\right) \quad (3.23)$$

où h est un paramètre apportant un degré de liberté permettant de déplacer les zéros des fonctions de Lagrange (égaux aux x_i les zéros du polynôme de Laguerre) sur le domaine intéressant où les fonctions χ ne sont pas négligeables. Ce paramètre a les unités de ρ , soit des unités de longueur multipliées par la racine carrée d'unités de masses ($[h] = [\rho] = [LM^{1/2}] = [\text{fm } m_N^{1/2}]$).

Nous remplaçons notre développement dans notre système d'équations :

$$\begin{aligned} \sum_j C_j^{K' L' l_x' l_y'} \left\{ \left[\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{(K+\frac{3}{2})(K+\frac{5}{2})}{\rho^2} \right] \delta_{KK'} \delta_{l_x l_x'} \delta_{l_y l_y'} - \frac{2m_N}{\hbar^2} W_{K l_x l_y, K' l_x' l_y'}^L(\rho) \right\} C_j^{K' L' l_x' l_y'} f_j\left(\frac{\rho}{h}\right) \\ = -\frac{2m_N}{\hbar^2} E \sum_i C_i^{KL l_x l_y} f_i\left(\frac{\rho}{h}\right) \end{aligned} \quad (3.24)$$

Nous multiplions par une fonction quelconque de la base et utilisons les propriétés de notre base pour écrire l'opérateur cinétique

$$T_{ij} = - \left\langle f_i \left| \frac{d^2}{dx^2} \right| f_j \right\rangle \approx -\lambda_i^{1/2} f_j''(x_i) = \begin{cases} (-)^{i+j} \frac{2}{(x_i - x_j)^2} & \text{si } i \neq j \\ \frac{2(2N+1)x_i - x_i^2 + 1}{12x_i^2} & \text{si } i = j \end{cases} \quad (3.25)$$

et les différentes termes multiplicatifs

$$\langle f_i | V | f_j \rangle = V(hx_j) \delta_{ij} \quad (3.26)$$

Ces deux relations sont approchées, nous devons vérifier la convergence de la méthode en fonction du nombre de fonctions dans la base de développement.

Définissons un indice compact k pour le triplet $(Kl_x l_y)$ (et l pour $(K'l'_x l'_y)$), cet indice va de 1 à $\frac{K_M^2}{8} + \frac{3K_M}{4} + 1$. Nous obtenons le système suivant (les coefficients C_{ik}^L dépendent de L mais nous ne notons plus l'indice L pour alléger les expressions) :

$$\sum_{jl} Z_{(ik),(jl)} C_{jl} = -\frac{2m_N}{\hbar^2} E C_{ik} \quad (3.27)$$

où nous avons utilisé la matrice Z définie par la relation :

$$Z_{(ik),(jl)} = \left[\frac{T_{ij}}{h^2} - \frac{(K + \frac{3}{2})(K + \frac{5}{2})}{h^2 x_i^2} \delta_{ij} \right] \delta_{kl} - \frac{2m_N}{\hbar^2} W_{kl}(hx_i) \delta_{ij} \quad (3.28)$$

Cette expression est une équation aux valeurs propres : l'énergie E est une valeur propre et les coefficients C_{jl} rangés en colonne sont les composantes d'un vecteur propre de la matrice Z . Pour résoudre le problème et exprimer les énergies et fonctions d'ondes, il faut résoudre l'équation caractéristique.

Le paramètre h se comporte approximativement comme le paramètre d'une méthode variationnelle. Dans la région de validité de l'approximation de Gauss, nous pouvons utiliser un théorème variationnel (voir le Théorème de Hylleraas-Undheim ou de Mac Donald dans [2]) sur le ket d'essai formé par les combinaisons linéaires des fonctions de la base de Lagrange et montrer que l'énergie solution du problème réalise un minimum des énergies lorsque le paramètre h varie. Dans ce domaine, l'énergie est peu sensible aux variations de h . En pratique, nous étudions la variation des valeurs propres du système avec le paramètre h , la méthode n'est valable que dans le domaine approximativement constant et les niveaux sont les minima des valeurs propres dans ce domaine.

Le nombre quantique hypersphérique maximum K_M apporte une contrainte sur le nombre minimum de vecteurs dans la base de Lagrange. Les fonctions χ ont un comportement à l'origine en $\rho^{K+5/2}$; pour le reproduire, notre base de développement devra contenir des polynômes jusqu'à l'ordre $K + 5/2$. L'ordre le plus élevé des polynômes de notre base est $N + 1/2$, la condition sur N est donc $N \geq K_M + 2$.

La norme de la fonction d'onde totale étant conservée par l'équation de Schrödinger, elle le reste ici. Le développement de la fonction d'onde (2.46), la normalisation des harmoniques hypersphériques (voir Annexe A et 2.41) et la définition de l'élément de volume hypersphérique (2.22) conduisent à

$$\sum_k \langle \chi_k | \chi_k \rangle = 1 \quad (3.29)$$

En développant nos fonctions et en utilisant l'orthogonalité des fonctions de Lagrange (3.21 avec un facteur h dû à l'argument ρ/h des fonctions de Lagrange dans le développement), nous écrivons

$$\sum_{ki} |C_i^k|^2 = 1 = \sum_k |C_k|^2 \quad (3.30)$$

où nous avons défini les sommes quadratiques C_k des coefficients C_i^k : $|C_k|^2 = \sum_i |C_i^k|^2$. Ces coefficients représentent les contributions des différentes fonctions radiales hypersphériques χ à la fonction d'onde totale.

Nous avons vu que le rayon en moyenne quadratique était proportionnel à l'hyper-rayon (2.19). Calculons la moyenne de l'observable hyperrayon au carré. L'élément de matrice se sépare en parties radiales et angulaires, cette dernière est trivialement résolue avec l'orthogonalité des harmoniques hypersphériques. En suivant la même démarche que précédemment, nous obtenons

$$\langle \rho^2 \rangle = \sum_k \langle \chi_k | \rho^2 | \chi_k \rangle = \sum_{ki} |C_i^k|^2 (hx_i)^2 \quad (3.31)$$

Ces deux relations nous permettront de contrôler la précision moyenne des coefficients C_i^k et de calculer immédiatement le rayon en moyenne quadratique du niveau considéré.

La méthode converge avec un petit nombre de fonctions dans la base (nous en utilisons une vingtaine) mais nécessite un calcul de vecteurs propres et valeurs propres d'une matrice carrée assez grande : la matrice Z . Sa taille est égale au nombre d'équations (de l'ordre de K_M^2) multiplié par le nombre de fonctions dans la base. Cette méthode nécessite donc beaucoup d'espace mémoire mais converge relativement vite.

Ces caractéristiques ne sont évidemment pas générales, d'autres méthodes de résolution du système se fondent par exemple sur la méthode des différences finies. Le principe est de discrétiser le domaine, de transformer les opérateurs de dérivées en opérateurs de différences finies et d'utiliser les conditions initiales et les comportements asymptotiques pour résoudre le système. Un inconvénient est la nécessité d'un maillage très fin (donc d'un grand nombre de pas) pour obtenir une bonne précision. Un avantage de la méthode est le faible espace mémoire de travail nécessaire (de l'ordre du nombre d'équations multiplié par le nombre de valeurs précédentes utilisées à chaque étape).

Chapitre 4

L'interaction harmonique

L'oscillateur harmonique est particulier car ce potentiel diagonalise la matrice des coefficients W et découple le système d'équations. Chaque équation est équivalente à celle d'un oscillateur harmonique à trois dimensions de moment cinétique demi-entier. Les interactions entre les nucléons ne sont pas harmoniques mais ce cas nous permettra d'évaluer la précision de la méthode.

4.1 Symétries des coefficients W

Le potentiel harmonique est la somme de trois termes proportionnels à $x_i^2 = \rho^2 \cos^2 \alpha_i$. Aucun autre terme n'est pris en compte (composante orbitale, condition sur les moments cinétiques des neutrons ou interaction non locale)

Les coefficients W sont obtenus avec une combinaison linéaire des coefficients de Raynal-Revai et d'intégrales du type

$$\int_{\Omega} Y_{KLM_L}^{l_x l_y}(\Omega) (\rho \cos \alpha)^2 Y_{K'LM'_L}^{l'_x l'_y}(\Omega) d\Omega \quad (4.1)$$

La dépendance en ρ des coefficients sera donc très simple, ils se mettront sous la forme d'un produit d'une constante avec ρ^2 . Pour pouvoir calculer aisément leur valeur, nous utilisons une forme particulière du potentiel harmonique :

$$V = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 \frac{m_j + m_k}{M} x_i^2 \quad (4.2)$$

Nous prenons comme unités $\hbar = \omega = 1$.

Nous montrons que ce potentiel est égal dans ces unités à $\rho^2/2$ en utilisant la définition de x_i et en identifiant l'expression avec la forme suivante de ρ^2 (2.17)

$$\rho^2 = \sum_{i=1}^3 \frac{m_i m_j}{M} \|\vec{r}_i - \vec{r}_j\|^2 \quad (4.3)$$

Nous avons donc à calculer les éléments de matrice de ρ^2 dans la base des harmoniques hypersphériques composées qui n'en dépendent pas. L'orthogonalité de la base nous permet d'écrire immédiatement

$$W_{K'l'_x l'_y, Kl_x l_y}^L(\rho) = \frac{\rho^2}{2} \delta_{l'_x l'_y} \delta_{l_x l_y} \delta_{KK'} \quad (4.4)$$

Notre méthode de calcul générale donne le même résultat mais évalue pour ce faire toutes les intégrales et les combine avec les coefficients de Raynal-Revai. Tous les termes non diagonaux se simplifient et les termes diagonaux prennent cette forme simple. Le nombre de points utilisés dans le calcul des intégrales ne fait pas varier les résultats, nous l'avons fixé à 48 et la précision est d'environ 10^{-12} (nous l'évaluons avec les valeurs numériques différentes de zéro et théoriquement nulles).

4.2 Résolution exacte et approchée du système d'équations

4.2.1 La résolution analytique

Nous avons à résoudre le système d'équations découplées

$$\forall K : \left[\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{(K + \frac{3}{2})(K + \frac{5}{2})}{\rho^2} + 2 \left(E - \frac{\rho^2}{2} \right) \right] \chi_{KL}^{l_x l_y}(\rho) = 0 \quad (4.5)$$

avec $L = 0$, $l_x = l_y$ compris entre 0 et $K/2$.

Nous utilisons le système d'unités décrit ci-dessus, les énergies sont en $\hbar\omega$ et les longueurs en $\sqrt{\hbar/m_N\omega}$.

Cette équation est équivalente à celle d'un oscillateur harmonique à trois dimensions (décrite dans [2]) si on identifie le moment cinétique de l'oscillateur avec l'expression $K + \frac{3}{2}$:

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + 2 \left(E - \frac{\rho^2}{2} \right) \right] u_l(\rho) = 0 \quad (4.6)$$

Bien qu'un moment cinétique d'un oscillateur soit toujours entier et que notre équation ne soit pas strictement celle d'un oscillateur à trois dimensions, nous pouvons appliquer le même schéma de résolution de l'équation radiale de l'oscillateur (changement de fonction inconnue et résolution par séries).

Nous obtenons la solution :

$$\chi_{n_r KL=0}^{l_x l_y}(\rho) = \frac{1}{\Gamma(K+3)} \left[\frac{2\Gamma(n_r + K + 3)}{n_r!} \right]^{\frac{1}{2}} \rho^{K+\frac{5}{2}} {}_1F_1(-n_r, K+3, \rho^2) e^{-\frac{\rho^2}{2}} \quad (4.7)$$

pour $K = 0, 2, \dots$ et $n_r = 0, 1, \dots$. Dans cette équation, Γ est la fonction Gamma et ${}_1F_1(a, c, z)$ la fonction hypergéométrique confluente définie par

$${}_1F_1(a, c, z) = 1 + \frac{a}{c} \frac{z}{1!} + \frac{a(a+1)}{c(c+1)} \frac{z^2}{2!} + \dots \quad (4.8)$$

Cette fonction se réduit lorsque a est un entier négatif $-n_r$ à un polynôme de degré n_r (proportionnel au polynôme de Laguerre associé $L_{n_r}^{c-1}(z)$).

Le nombre quantique n_r est le nombre de noeuds radiaux et est lié au nombre quantique de l'énergie n

$$E_n = n + 3 = 2n_r + K + 3 \quad (4.9)$$

Le niveau fondamental est $K = n_r = l_x = l_y = 0$, $E_0 = 3$. Le nombre quantique n ne prend que des valeurs paires, les niveaux sont donc 3, 5, 7, ...

Ce résultat n'a pas exactement la forme du spectre de l'oscillateur harmonique classique ($E = n + \frac{3}{2} = 2n_r + l + \frac{3}{2}$, n entier positif ou nul). Le potentiel est harmonique mais ce problème comporte trois particules contrairement au cas classique à deux particules.

Les niveaux sont dégénérés : chaque niveau comprend des états de chaque valeur de K inférieure ou égale à n . Chacun de ces niveaux est dégénéré en l_x et l_y , il comprend $\frac{K}{2} + 1$ niveaux. La dégénérescence totale g_n du niveau d'énergie $E = n + 3$ est

$$g_n = \frac{1}{2} \left(\frac{n}{2} + 1 \right) \left(\frac{n}{2} + 2 \right) \quad (4.10)$$

Nous retrouvons une dégénérescence semblable à celle de l'oscillateur harmonique à deux particules ($g_n = \frac{1}{2}(n+1)(n+2)$). La différence principale est la parité du nombre quantique n .

Les fonctions d'ondes partielles $\Psi_{LM_L n}^{K, n_r}$ s'écrivent avec le développement 2.46 :

$$\Psi_{L=0 M_L=0 n} = \sum_{K=0}^{\infty} \Psi_{L=0 M_L=0 n}^{K, (n-K)/2} = \sum_{K=0}^{\infty} \sum_{l=0}^{K/2} C_{Kl} \rho^{-5/2} \chi_{n_r, KL=0}^l(\rho) Y_{KL=0 M_L=0}^l(\Omega) \quad (4.11)$$

où nous avons introduit des coefficients arbitraires C_{Kl} . En effet, le système étant complètement découplé, la fonction d'onde totale est une combinaison linéaire quelconque des fonctions d'onde partielles.

4.2.2 La résolution numérique

La méthode employée pour la résolution numérique n'utilise pas les symétries de l'interaction harmonique de manière à être plus générale. Trois constantes doivent être précisées pour pouvoir mener le calcul : h le paramètre de la méthode du réseau de Lagrange, K_M le nombre quantique hypersphérique maximum et N le nombre de vecteurs dans la base de Lagrange.

Nous commençons par analyser l'évolution du spectre en fonction du paramètre h (figure 4.1). Nous devons identifier la zone de validité de l'approximation de Gauss et le paramètre h minimisant les différentes énergies. Pour ce premier calcul, nous fixons K_M et N à des valeurs moyennes : respectivement 12 et 20. Sur le graphe de l'évolution du niveau fondamental en fonction du paramètre h , nous isolons très bien la région stable. Par contre, le minimum n'est pas clairement identifiable car dans une large zone, les précisions des différents calculs sont trop élevées pour pouvoir différencier leurs résultats.

Un meilleur critère consiste à examiner le comportement du spectre entier ou au moins celui des premiers niveaux (voir la figure 4.2). Plus les niveaux sont élevés, plus ils sont sensibles au paramètre h et plus la zone de validité de l'approximation de Gauss est étroite. Nous prendrons pour les calculs $h = 0, 16$.

La dégénérescence des niveaux est bien représentée si le calcul comprend plusieurs harmoniques mais cette propriété disparaît si une seule harmonique hypersphérique est prise en compte (en fixant $K_M = 0$). Dans ce cas, aucun niveau n'est dégénéré et nous observons des niveaux plus élevés (figure 4.3). Nous pouvons remarquer que dans la zone non physique, des inversions de niveaux ont lieu.

Les figures représentent les premières valeurs propres du problème, c'est-à-dire les niveaux d'énergie les plus bas. Ils sont notés $E0$ (le niveau fondamental), $E1$ (le premier niveau excité), $E2$ (le deuxième niveau excité), ... $E7$ (le septième niveau excité).

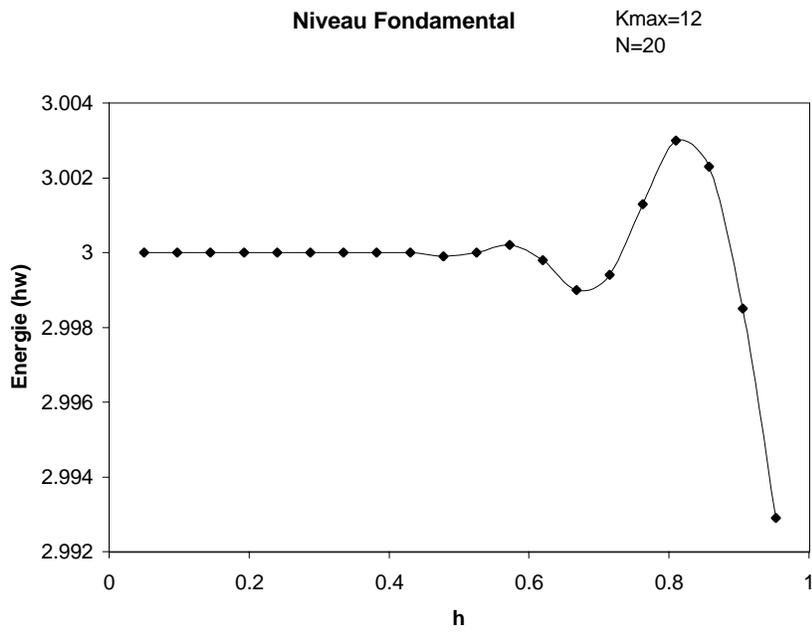


FIG. 4.1 – Evolution du niveau fondamental en fonction du paramètre h pour le potentiel harmonique

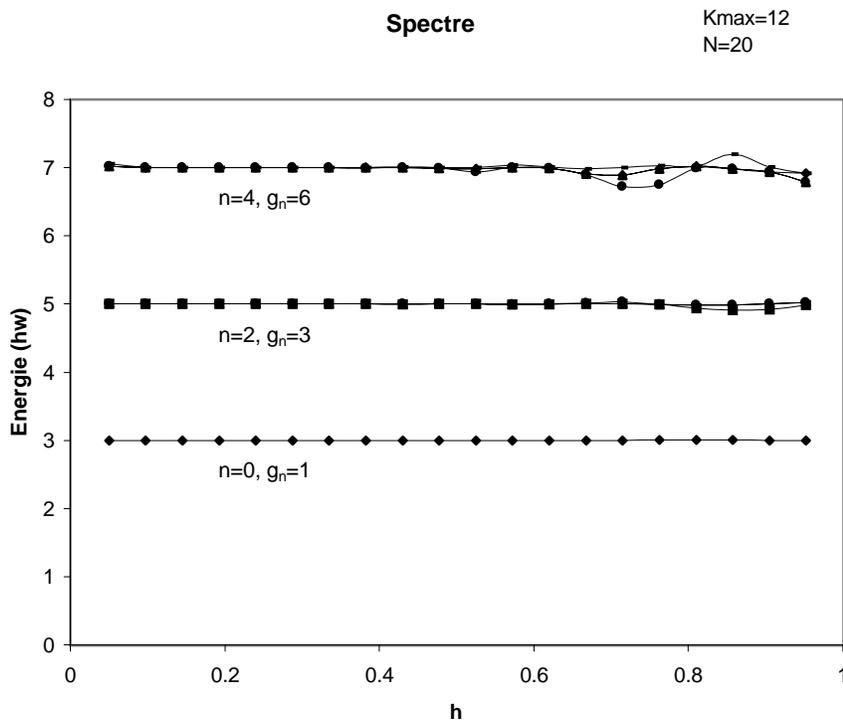


FIG. 4.2 – Evolution du spectre en fonction du paramètre h pour le potentiel harmonique (les niveaux sont représentés par le nombre quantique d'énergie n)

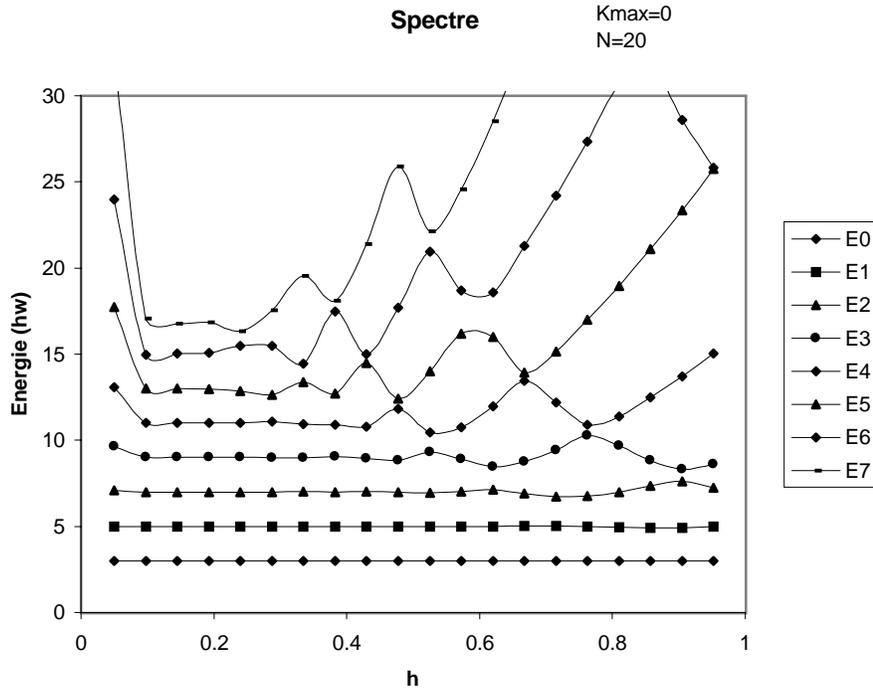


FIG. 4.3 – Evolution du spectre en fonction du paramètre h pour le potentiel harmonique avec une seule harmonique prise en compte (les niveaux sont représentés par E_i avec i le numéro du niveau)

Le paramètre K_M n'a aucune influence sur les niveaux. Le système étant découplé, ajouter des harmoniques revient à ajouter des équations et donc des valeurs propres sans perturber les autres. Les nombre de niveaux calculés est par contre toujours inférieur au nombre d'harmoniques multiplié par le nombre de fonctions de Lagrange. La seule influence du paramètre K_M est donc de limiter le nombre de niveaux calculés sans faire varier les valeurs exactes calculées. En pratique la limite supérieure des niveaux calculés est rapidement très élevée (elle est déjà supérieure à cinq cents pour $K_M = 12$ et $N = 20$), ces derniers niveaux étant très imprécis. Comme les précisions des niveaux effectivement calculés ne dépendent pas de K_M , nous pouvons nous limiter à $K_M \geq 12$. Nous donnons ci-dessous les précisions des résultats obtenus (pour $N = 20$). Ces précisions sont très bonnes pour les premiers niveaux, elles décroissent néanmoins pour les niveaux excités. Plus précisément, les précisions sont d'autant plus mauvaises que les nombres quantiques n_r et K associés au niveau sont grands. En effet, plus le comportement de la fonction radiale est complexe, moins le développement dans la base de Lagrange est précis. Deux facteurs doivent être pris en compte : d'une part le nombre de noeuds déterminé par n_r et d'autre part le comportement à l'origine de la fonction déterminé par K . La meilleure précision sera obtenue pour n_r et K faibles, donc pour les premiers niveaux. Quand n augmente, les deux facteurs augmentent et la précision décroît. Néanmoins le nombre de noeuds est prédominant et la meilleure précision pour n constant est obtenue pour $n_r = 0$. Le tableau présente les précisions maximales et minimales obtenues pour chaque niveau, les nombres quantiques associés aux valeurs de précisions extrémales et le numéro d'ordre des valeurs propres calculées.

Num. E	Niv. exact	Erreur min.	n_r, K du min.	Erreur max.	n_r, K du max.
1	3	10^{-10}	0,0	10^{-10}	0,0
2 - 4	5	10^{-8}	0,2	$5 \cdot 10^{-8}$	1,0
5 - 10	7	10^{-7}	0,4	$2 \cdot 10^{-6}$	2,0
11 - 20	9	$2 \cdot 10^{-7}$	0,6	$2 \cdot 10^{-5}$	3,0
21 - 35	11	$5 \cdot 10^{-7}$	0,8	$7 \cdot 10^{-4}$	4,0
36 - 56	13	10^{-5}	0,10	$6 \cdot 10^{-3}$	5,0
57 - 84	15	10^{-4}	0,12	$2 \cdot 10^{-2}$	6,0

Il faut un nombre minimum de fonctions dans la base de Lagrange pour obtenir une bonne précision ($N \geq 12$) mais les valeurs convergent très rapidement (voir la figure 4.4). Nous verrons que cette convergence sera moins rapide pour des potentiels plus complexes mais restera excellente et légitimera le choix de la méthode du réseau de Lagrange.

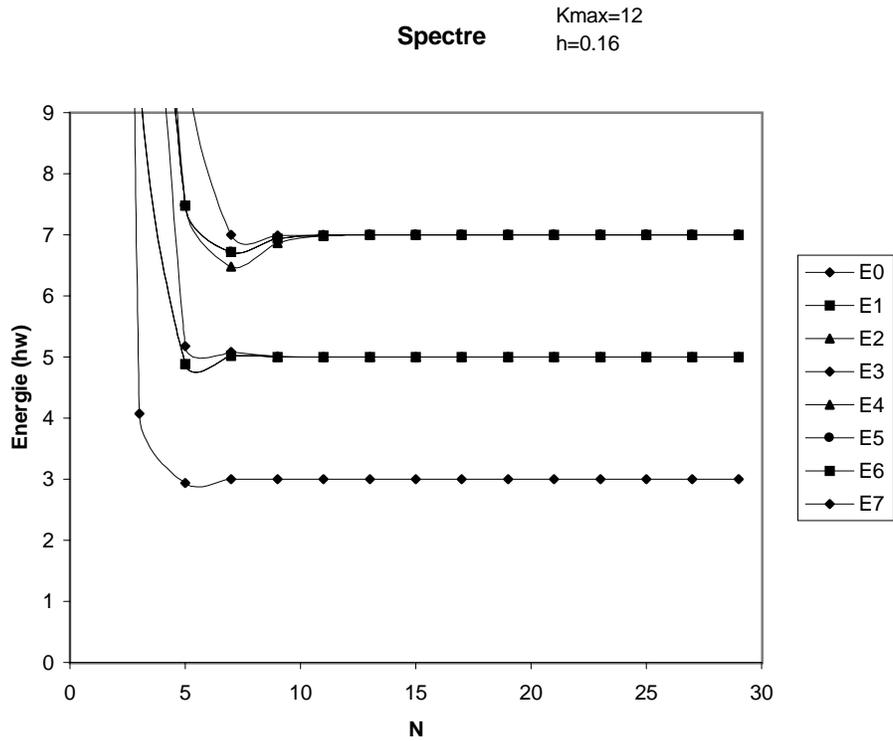


FIG. 4.4 – Evolution du spectre en fonction du nombre de fonctions dans la base de Lagrange pour le potentiel harmonique (les niveaux sont représentés par E_i avec i le numéro du niveau)

La précision des valeurs de niveaux obtenues numériquement par rapport aux valeurs exactes constitue une première validation du code de calcul et de la méthode.

Chapitre 5

L'Etude de ${}^6\text{He}$

5.1 Potentiels de référence

Notre potentiel s'écrit

$$V = V_{nn}(\|\vec{r}_j - \vec{r}_k\|) + V_{\alpha n}(\|\vec{r}_i - \vec{r}_j\|) + V_{\alpha n}(\|\vec{r}_i - \vec{r}_k\|) \quad (5.1)$$

Nous devons donc définir deux potentiels d'interaction $\alpha - n$ et $n - n$. Nous utiliserons le "potentiel du Minnesota" (défini par Y. C. Tang, M. LeMere et D. R. Thompson, voir [20]) pour l'interaction neutron - neutron et un potentiel défini par H. Kanada, T. Kaneko, S. Nagata et M. Nomoto pour l'interaction particule alpha - neutron (voir [21]).

Le potentiel alpha - neutron est déterminé à partir de l'étude des déphasages des systèmes non liés composés de ${}^4\text{He}$, de ${}^3\text{He}$, de neutrons et de protons par l'intermédiaire des réactions de diffusion nucléon - noyau d'hélium. Il comprend une partie centrale dépendant de la distance entre les deux particules et du moment cinétique orbital et une partie spin - orbite dépendant en outre du spin des deux particules. Pour cette première modélisation, nous négligerons le terme spin - orbite. La dépendance en le moment cinétique orbital l est modélisée par une dépendance en la parité du mouvement orbital $\pi = (-)^l$. De même, le potentiel neutron - neutron ne comprend qu'une partie centrale car nous négligeons tous les termes de spins.

Le potentiel de Y. C. Tang et al. s'écrit

$$V_{nn}(r) = 200 \exp(-1.487r^2) - 91.85 \exp(-0.465r^2) \quad (5.2)$$

Le potentiel de H. Kanada et al. s'écrit

$$\begin{aligned} V_{\alpha n}(r) &= z_1(r) + (-)^l z_2(r) \\ z_1(r) &= -96.3 \exp(-0.36r^2) + 77.0 \exp(-0.90r^2) \\ z_2(r) &= 34 \exp(-0.20r^2) - 85 \exp(-0.53r^2) + 51 \exp(-2.5r^2) \end{aligned} \quad (5.3)$$

La figure 5.1 représente les potentiels $n - n$ (noté V_{nn}), $\alpha - n$ pour l pair (noté $V_{\alpha n+}$) et $\alpha - n$ pour l impair (noté $V_{\alpha n-}$).

5.2 Potentiel central et radial

Pour ce premier calcul, nous ne voulons pas reproduire le spectre réel mais valider notre méthode. Le premier type de potentiel que nous utiliserons est central et radial : il ne

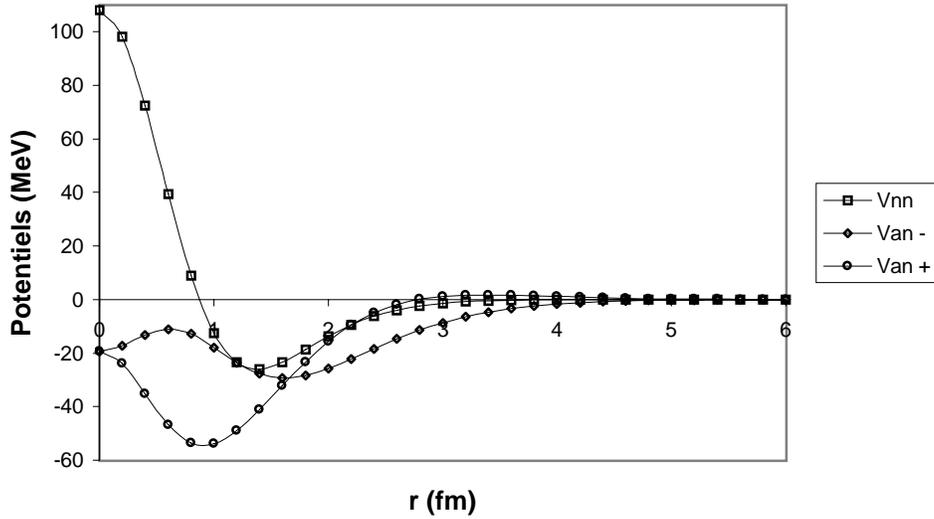


FIG. 5.1 – Potentiels $n - n$ (noté V_{nn}), $\alpha - n$ pour l pair (noté V_{an+}) et $\alpha - n$ pour l impair (noté V_{an-}) en fonction de la distance entre les particules r

dépend que de la distance entre les deux particules. Nous négligerons donc la dépendance en l du potentiel particule alpha - neutron (5.3).

Les calculs effectués avec ces potentiels ne reproduisent pas les résultats expérimentaux (le noyau n'est pas assez lié). En fait, on constate que les potentiels déduits des réactions particule alpha - neutron ne reproduisent pas les niveaux d'un noyau à la structure interne aussi particulière que celle de ${}^6\text{He}$ (et ce indépendamment de la méthode utilisée, voir [8] et [19]). Il faut introduire une constante de normalisation (c'est-à-dire de multiplication du potentiel) pour adapter le premier niveau calculé à la valeur expérimentale du fondamental de ${}^6\text{He}$; soit λ cette constante de normalisation. Une autre possibilité consiste à modifier les portées des potentiels plutôt que leur amplitude (Zhukov et al. par exemple les modifient d'environ 3 %, voir [8]) mais ces potentiels modifiés ne reproduisent plus les déphasages expérimentaux. Nous préférons donc normaliser nos potentiels :

$$V_{\alpha n}(r) = \lambda(z_1(r) + z_2(r)) \quad (5.4)$$

Comme nous l'avons vu au premier chapitre, le postulat d'antisymétrisation et le principe d'exclusion de Pauli appliqués aux neutrons du système conduisent à deux conditions sur les moments cinétiques orbitaux des mouvements relatifs des deux neutrons par rapport à la particule alpha : ces nombres quantiques doivent être pairs et différents de zéro. Nous tiendrons seulement compte ici de la première condition. Rappelons que les moments cinétiques orbitaux des mouvements relatifs doivent être égaux pour satisfaire la condition de parité paire de l'état.

Nous utiliserons comme repère principal celui centré sur la particule alpha. Nous ramenons le calcul des éléments de matrice W des deux potentiels $\alpha - n$ dépendant des coordonnées x_j et x_k à un calcul faisant intervenir x_i par l'intermédiaire des coefficients de Raynal-Revai. Les masses utilisées sont exprimées en unités de masses nucléaires : $m_i = 4$ et $m_j = m_k = 1$.

Pour ce premier calcul, nous ne voulons pas reproduire le spectre réel mais valider notre méthode, nous n'ajusterons donc pas ici la constante λ . Nous verrons que la convergence

en nombre d'harmoniques (la convergence de K_M) est d'autant meilleure que le niveau est profondément lié. Pour ce test, nous choisissons donc une valeur élevée de la constante de normalisation de manière à augmenter le potentiel, à abaisser les niveaux et donc à favoriser la convergence ; nous utiliserons $\lambda = 1.50$ (dans le chapitre suivant, nous ferons l'étude de cette constante).

Étudions l'évolution du spectre en fonction du paramètre h (figures 5.2 et 5.3). Nous

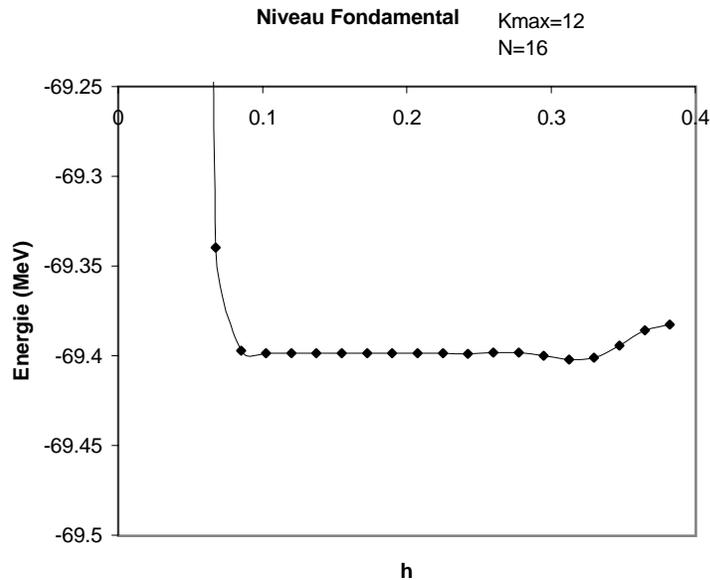


FIG. 5.2 – Evolution du niveau fondamental en fonction du paramètre h pour le potentiel central

pouvons identifier une importante région de stabilité du niveau fondamental ($0.1 \leq h \leq 0.27$) mais nous avons, comme dans le cas du potentiel harmonique, des conditions plus restrictives sur les niveaux excités. Les valeurs minimales du paramètre h pour obtenir une stabilité des niveaux sont d'autant plus élevées que les niveaux sont excités. En apparence, il n'y a pas de valeur de h permettant d'étudier tous les niveaux mais cette limitation est due aux valeurs relativement basses des deux autres paramètres K_m et N fixées pour cette étude. Nous prendrons une valeur élevée de h restant dans les limites de stabilité du fondamental : $h = 0.24$.

Intéressons nous aux variations du spectre en fonction des deux autres paramètres : K_M (figure 5.4) et N (figure 5.5). Nous observons que le fondamental converge très rapidement ($K_M \geq 8$ et $N \geq 10$) mais que les convergences sont d'autant plus lentes que les niveaux sont moins liés. Ce phénomène est général pour tous les types de potentiel : la convergence varie suivant les niveaux et diminue pour les niveaux excités. Néanmoins cette convergence restant très rapide, notre base pourra toujours être limitée à une vingtaine de fonctions.

Remarquons que les niveaux excités ne sont pas dégénérés mais se regroupent. Les premiers niveaux sont dominés par les fonctions radiales de nombres quantiques hypersphériques K les plus bas. Les groupes de niveaux sont dominés par des fonctions radiales de même K mais de moments cinétiques orbitaux l_x et l_y différents. L'influence de ces deux nombres quantiques sur l'énergie est faible mais n'est pas négligeable. Ces niveaux excités n'ont aucun sens physique car la constante de normalisation n'a pas sa valeur

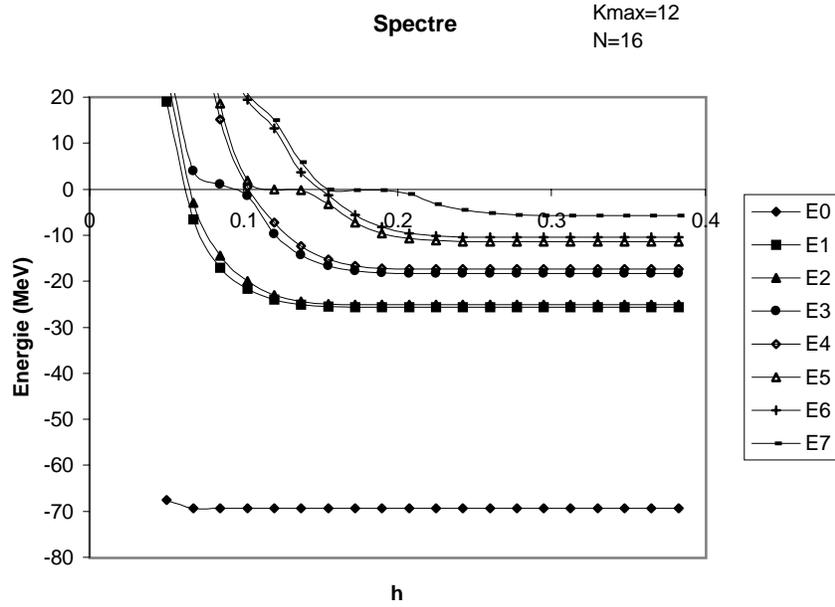


FIG. 5.3 – Evolution du spectre en fonction du paramètre h pour le potentiel central (les niveaux sont représentés par Ei avec i le numéro du niveau)

optimale. Nous verrons au chapitre suivant que nos résultats ne comprendront qu'un seul état lié.

Un calcul précis ($h = 0.24$, $K_M = 18$ et $N = 20$) nous donne la valeur de l'énergie de liaison : 69.375 MeV. Ce résultat est en accord avec un calcul réalisé par Daniel Baye ([18]). Il constitue une deuxième validation de notre méthode et du code.

5.3 Potentiel central à composante orbitale

Dans cette section, nous étudierons le niveau fondamental de ${}^6\text{He}$ en utilisant des potentiels incluant une composante orbitale. Nous nous intéresserons successivement aux convergences en les différents paramètres (K_M et N), aux fonctions radiales hypersphériques χ et à leurs comportements à l'origine, aux coefficients W et à leur comportement aux hyperrayons ρ élevés, à la structure de la fonction d'onde et enfin à l'extension spatiale du noyau.

5.3.1 Définition du potentiel

Cette modélisation plus réaliste se fonde sur les potentiels binaires dépendant de la distance entre les particules et du moment cinétique de leur mouvement relatif (5.2 et 5.3). Nous devons normaliser les potentiels en les multipliant par une constante λ . Nous déterminerons sa valeur permettant d'accorder le premier niveau calculé sur les mesures du fondamental de ${}^6\text{He}$.

$$\begin{aligned}
 V_{\alpha n}(r) &= \lambda(z_1(r) + (-)^l z_2(r)) & \text{si } l \neq 0 \\
 V_{\alpha n}(r) &= 0 & \text{si } l = 0
 \end{aligned}
 \tag{5.5}$$

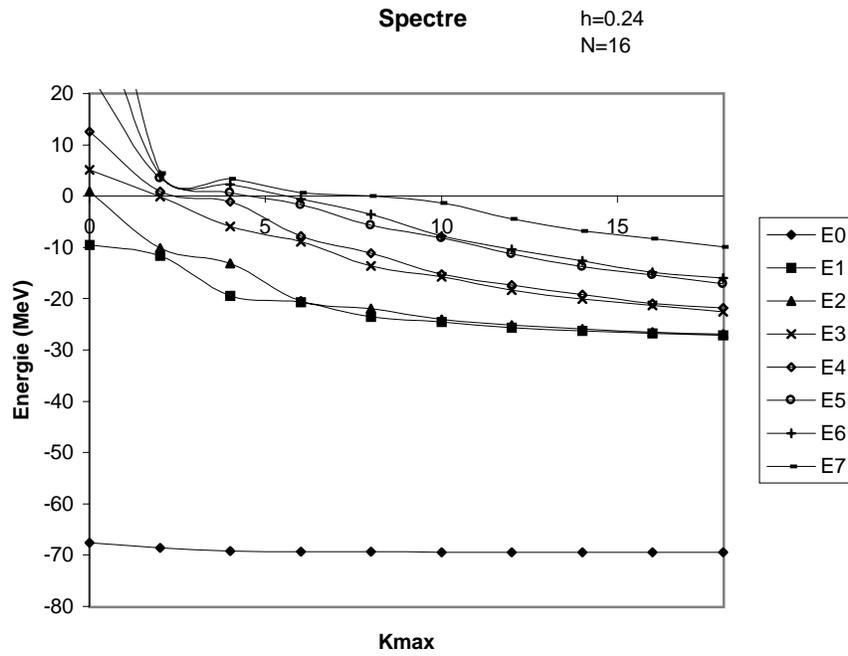


FIG. 5.4 – Evolution du spectre en fonction du nombre quantique K maximum pour le potentiel central (les niveaux sont représentés par E_i avec i le numéro du niveau)

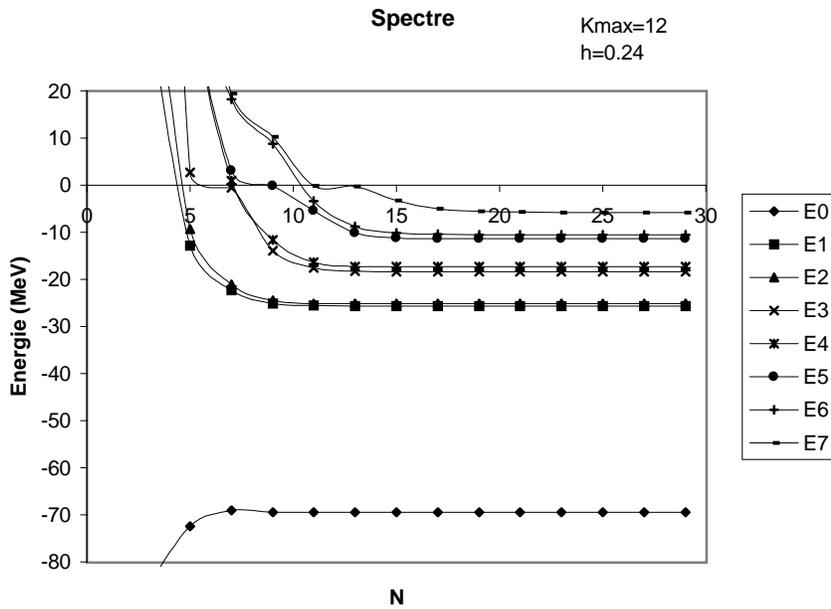


FIG. 5.5 – Evolution du spectre en fonction du nombre de fonction dans la base de Lagrange pour le potentiel central (les niveaux sont représentés par E_i avec i le numéro du niveau)

Dans notre modélisation, les nombres quantiques l intervenant dans le potentiel $\alpha - n$ sont les nombres quantiques l_{x_j} et l_{x_k} (les coordonnées de Jacobi \vec{x}_j et \vec{x}_k sont proportionnelles aux coordonnées relatives entre les deux neutrons (k et j) et la particule alpha

(i)). Comme pour le précédent calcul, nous tenons compte des deux conditions sur l_{x_i} et l_{y_i} (égalité et parité paire) mais contrairement au premier potentiel $\alpha - n$, celui-ci utilise une approximation pour interdire l'état $l = 0$.

Comme nous l'avons vu au premier chapitre, pour exclure les ondes s du potentiel $\alpha - n$, nous devons le modifier par une transformation globale conservant les résultats expérimentaux (transformation supersymétrique). Le potentiel de l'onde s résulte de cette transformation comprend une partie répulsive à courte portée et tend vers zéro rapidement. Nous l'approchons ici par la valeur constante nulle et nous utilisons donc $V_{\alpha n}(r) = 0 \forall r$ si $l = 0$.

La valeur expérimentale du niveau fondamental est -0.973 ± 0.04 MeV. Pour que notre calcul la reproduise, la constante de normalisation doit valoir environ 1.13. Nous la précisons lorsque nous aurons déterminé les différentes valeurs optimales des autres paramètres.

5.3.2 Etude des variations des paramètres

Etudions la variation du niveau fondamental en fonction du paramètre h (figure 5.6). Une zone de validité de l'approximation de Gauss et un minimum peuvent être identifiés ($0.3 \leq h \leq 0.44$ et $h = 0.38$). Nous utiliserons cette valeur dans la suite des calculs.

Comme les résultats obtenus avec un potentiel purement central nous l'avaient laissé

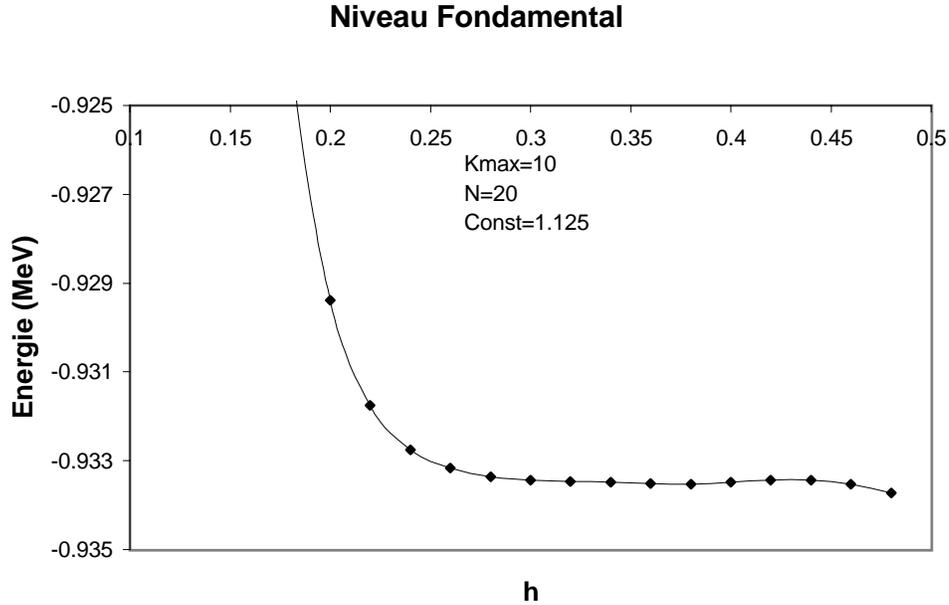


FIG. 5.6 – Evolution du niveau fondamental en fonction du paramètre h pour le potentiel à composante orbitale

présager, la convergence en N est très bonne (voir la figure 5.7). Le niveau fondamental est stable pour $N \geq 16$ (nous utiliserons $N = 20$ de manière à bien modéliser les comportements des fonctions χ à l'origine).

Au contraire, comme nous l'avons déjà remarqué au chapitre précédent, la convergence en K_M est moins bonne car notre niveau est beaucoup moins lié (voir la figure 5.9).

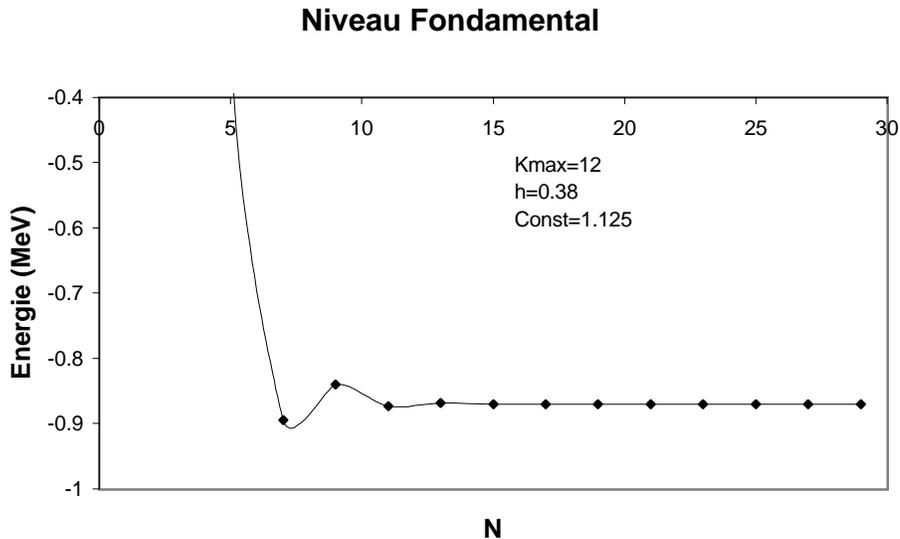


FIG. 5.7 – Evolution du niveau fondamental en fonction du nombre de fonctions dans la base de Lagrange pour le potentiel à composante orbitale

Pour obtenir une bonne précision, nous devrions prendre K_M supérieur à 22. Notre méthode est très sensible à ce paramètre ; nous avons vu que le nombre de fonctions radiales hypersphériques χ augmente en K_M^2 (voir 3.13), le nombre de coefficients de Raynal-Revai utilisés évolue en K_M^3 (voir 2.59 ; le temps de calcul est proportionnel à leur nombre) et la taille de la matrice à diagonaliser en $K_M^2 N \times K_M^2 N$ (l’algorithme de diagonalisation utilisé nécessite un temps de calcul proportionnel à sa taille au carré). Les deux opérations les plus longues sont le calcul des coefficients de Raynal-Revai et la diagonalisation, nous sommes donc rapidement limités par le temps de calcul. Nous ferons nos calculs avec $K_M = 18$.

En examinant la convergence plus précisément, nous pourrions déterminer la limite de l’énergie quand K_M tend vers l’infini mais nous avons très peu de points pour déterminer le comportement asymptotique. Néanmoins, il est possible d’exprimer les comportements asymptotiques théoriques de l’énergie de liaison pour les potentiels les plus simples (voir [23]).

$$\begin{aligned}
 E_B(K_M) &= E_B(\infty) - aK_M^{-\frac{7}{2}} && \text{potentiel "puits carré"} \\
 E_B(K_M) &= E_B(\infty) - a \exp(-bK_M) && \text{potentiel gaussien}
 \end{aligned}
 \tag{5.6}$$

Nos potentiels sont des sommes de gaussiennes, nous appliquerons donc le comportement asymptotique en exponentielle décroissante à nos résultats pour déterminer la valeur asymptotique de l’énergie de liaison. La figure 5.8 représente le logarithme de la différence $E_B(K_M) - E_B(\infty)$ en fonction du paramètre K_M . Le caractère clairement linéaire de la relation valide notre détermination de $E_B(\infty)$. Nous pouvons déterminer la valeur de la constante de normalisation du potentiel $\alpha - n$ pour que $E_B(\infty)$ soit le plus proche possible de la valeur expérimentale (-0.974 ± 0.04 MeV). Nous prendrons $\lambda = 1.125$ (pour lequel $E_B(\infty) = -0.979$ MeV). Remarquons que les résultats sont très sensibles aux paramètres, une petite modification de $E_B(\infty)$ suffit à modifier complètement le graphe 5.8, tandis qu’une petite modification de λ écarte $E_B(\infty)$ de sa valeur expérimentale.

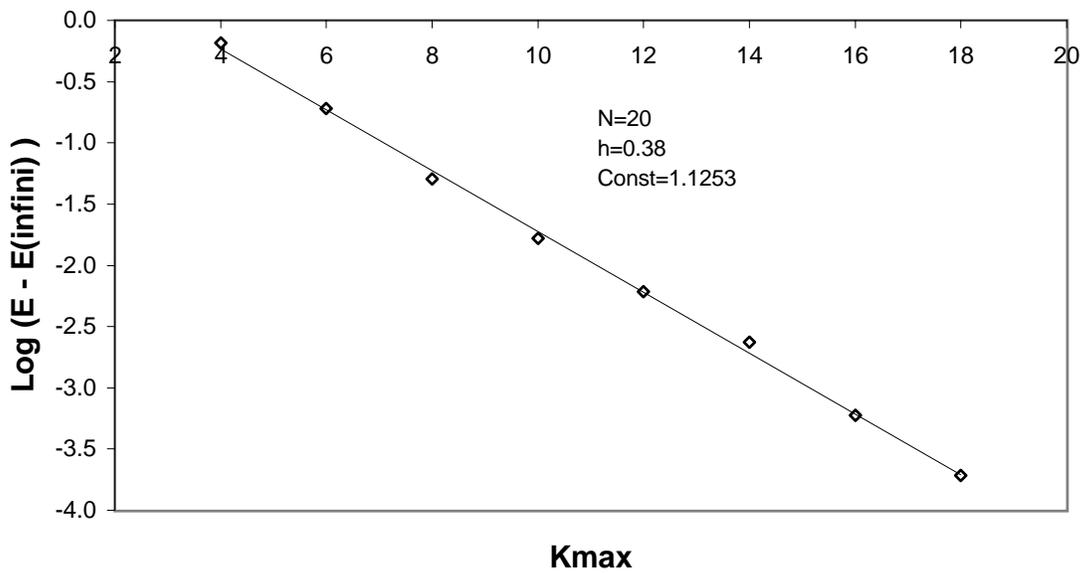


FIG. 5.8 – Logarithme de la différence entre l'énergie de liaison asymptotique et l'énergie de liaison calculée effectivement en fonction du nombre quantique K maximum pour le potentiel à composante orbitale

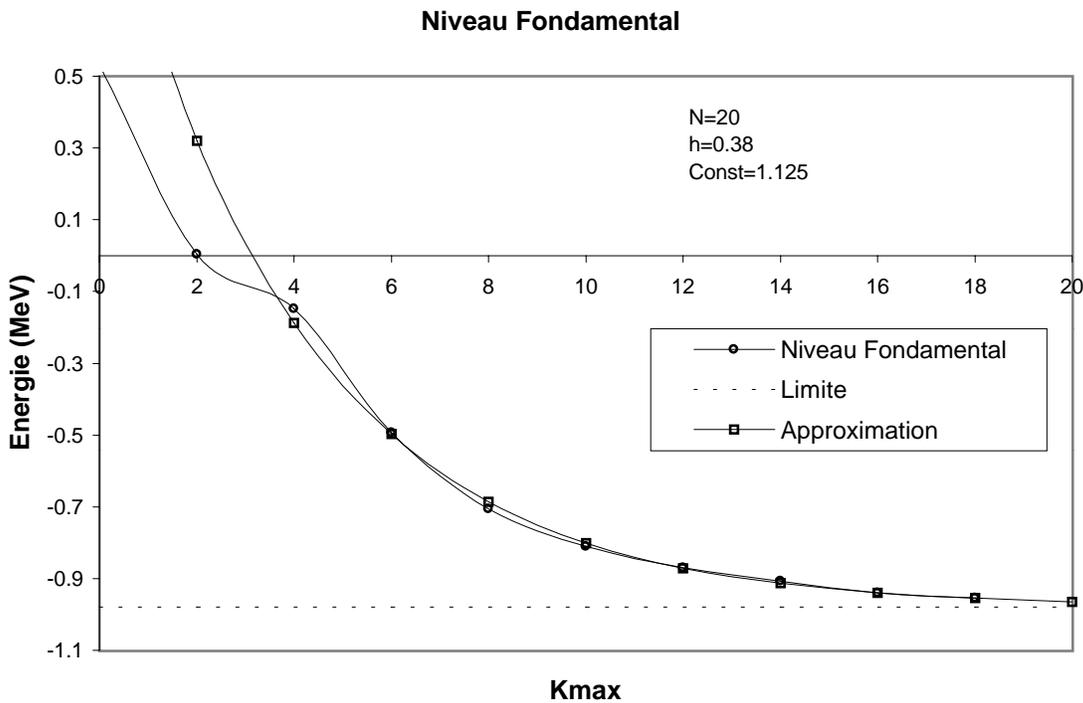


FIG. 5.9 – Evolution du niveau fondamental en fonction du nombre quantique K maximum, approximation asymptotique de l'évolution et limite asymptotique de l'évolution pour le potentiel à composante orbitale

Nous utilisons donc pour nos calculs les valeurs $h = 0.38$, $K_M = 18$, $N = 20$ et $\lambda = 1.125$. Le spectre obtenu correspond au spectre expérimental : il ne comporte qu'un

seul état lié dont l'énergie de liaison vaut 0.973 ± 0.04 MeV.

5.3.3 Etude des fonctions radiales hypersphériques

Nous pouvons nous représenter les contributions des différentes fonctions radiales à la fonction d'onde totale avec les valeurs $|C_k|^2$ (3.31). Les triplets de nombres quantiques (000) et (200) (en suivant la notation introduite en 3.2 : (K l l)) représentent plus de 97 % de la fonction d'onde, ce dernier triplet représentant à lui seul 81 %. Nous contrôlons la précision moyenne des coefficients avec la relation tirée de la normalisation de la fonction d'onde (3.30) : la somme des coefficients $|C_k|^2$ ne s'écarte de l'unité que par moins de 10^{-14} .

Deux phénomènes se conjuguent pour expliquer cette répartition. Le potentiel total comprend une barrière centrifuge en $(K+3/2)(K+5/2)/\rho^2$ qui tend à augmenter l'énergie des niveaux lorsque K augmente. Les composantes du niveau fondamental auront donc des nombres quantiques K minimum. Par ailleurs, pour la composante $K = 0$, tous les moments cinétiques sont nuls or notre potentiel $\alpha - n$ favorise les ondes p en ce sens qu'une onde s ne sera pas liée ($V_{\alpha n}(r) = 0$ si $l = 0$). Nous avons vu que cette absence des ondes s pour les couples $\alpha - n$ est une conséquence du principe d'exclusion de Pauli. Le modèle en couche nucléaire complète cette interprétation (voir [9]). Pour ce modèle, les nucléons remplissent des couches en respectant le principe d'exclusion de Pauli. La première couche étant remplie par les deux neutrons de ${}^4\text{He}$, les deux neutrons du halo occupent la deuxième couche de moment cinétique orbital $l = 1$.

Le niveau fondamental aura donc tendance à comporter des ondes p pour les couples alpha - neutron ; le premier nombre quantique hypersphérique K incluant des ondes p est $K = 2$. Le principe de Pauli et la barrière centrifuge expliquent l'importance pour le niveau fondamental des faibles nombres quantiques hypersphériques et la prédominance de la composante $K = 2$. Certains auteurs résument cette prédominance en affirmant que $K = 2$ est presque un bon nombre quantique (voir [8]).

Si nous avons tenu compte des composantes de spin total non nul, les trois composantes principales seraient ($K = 2, L = S = 0$), ($K = 2, L = S = 1$) et ($K = 0, L = S = 0$) (voir [22]). Un raisonnement similaire permet d'expliquer l'importance de ($K = 2, L = S = 1$), l'absence de ($K = 0, L = S = 1$) provient de la condition apportée par le postulat d'antisymétrisation : les nombres quantiques l_{x_i} et l_{y_i} doivent être impairs si $S = 1$, ce qui n'est pas possible si $K = 0$.

Remarquons que la méthode exacte d'exclusion des états interdits par le principe de Pauli n'influe pas beaucoup sur les résultats car l'onde s est de toute façon peu importante (une discussion des différentes méthodes est faite dans [8]).

Nous pouvons évaluer les fonctions radiales en certains points (voir la figure 5.10). La somme des intégrales des carrés de ces fonctions doit donner un, le résultat du calcul s'écarte de l'unité par moins de 10^{-6} . Nous reprenons la notation (Kll) pour les fonctions radiales hypersphériques $\chi_{KL=0}^l$. Nous retrouvons les triplets dominants (200) et (000). Ces deux fonctions sont maximales pour la même valeur de ρ (environ 4 fm). Toutes les fonctions s'annulent en zéro et décroissent exponentiellement quand ρ tend vers l'infini. Sur la figure 5.11, nous retrouvons les comportements à l'origine décrits en 2.52 sous la forme d'une suite ordonnée des accroissements des fonctions radiales. Plus le nombre quantique hypersphérique K est élevé, plus le "décollement" de la fonction sera lent.

Les fonctions radiales décroissent beaucoup moins vite que les potentiels $n - n$ et

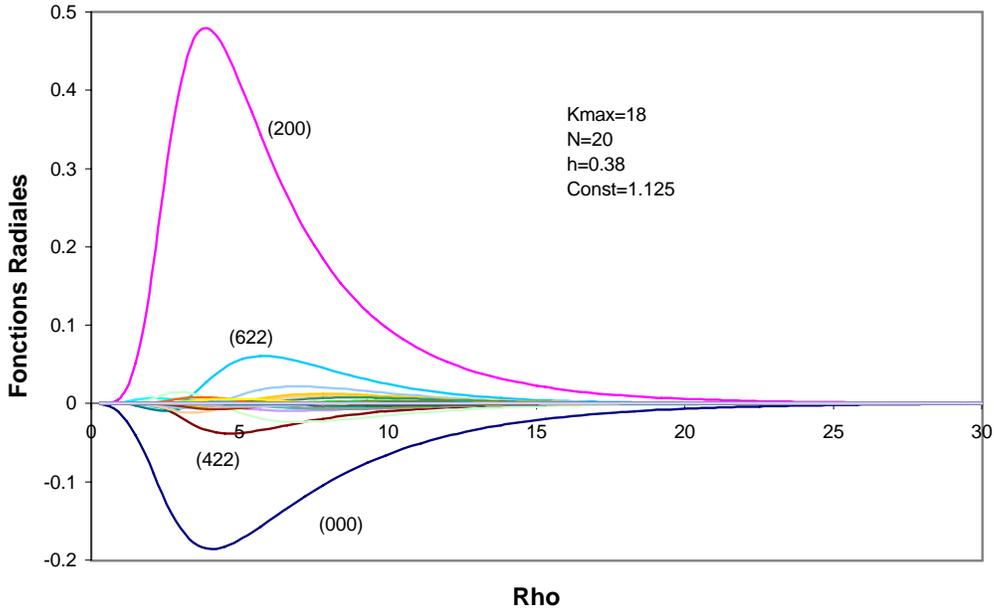


FIG. 5.10 – Fonctions radiales hypersphériques $\chi_{KL=0}^{ll}$ (repérées par le triplet (Kll)) pour le potentiel à composante orbitale

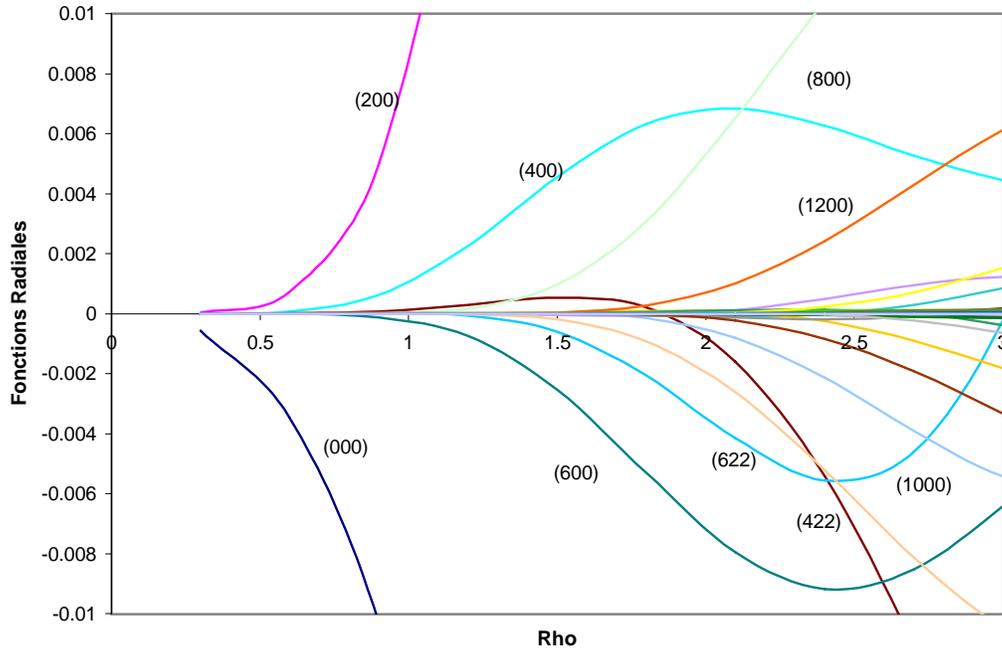


FIG. 5.11 – Comportement à l'origine des fonctions radiales hypersphériques $\chi_{KL=0}^{ll}$ (repérées par le triplet (Kll)) pour le potentiel à composante orbitale

$\alpha - n$: ceux-ci sont inférieurs à 10^{-6} MeV si $r \geq 9$ fm (voir figure 5.1). L'étendue des fonctions radiales trouve son origine dans le comportement des coefficients W . Ceux-ci ne décroissent pas exponentiellement mais en ρ^{-n} avec $n \approx 3 + l_x + l'_x$ (voir [8] et la figure

5.12). L'ordre de la décroissance géométrique ne suit pas exactement cette relation mais c'est une bonne approximation : pour les six coefficients représentés, le calcul donne les puissances $3 + l_x + l'_x$ à 10 % près.

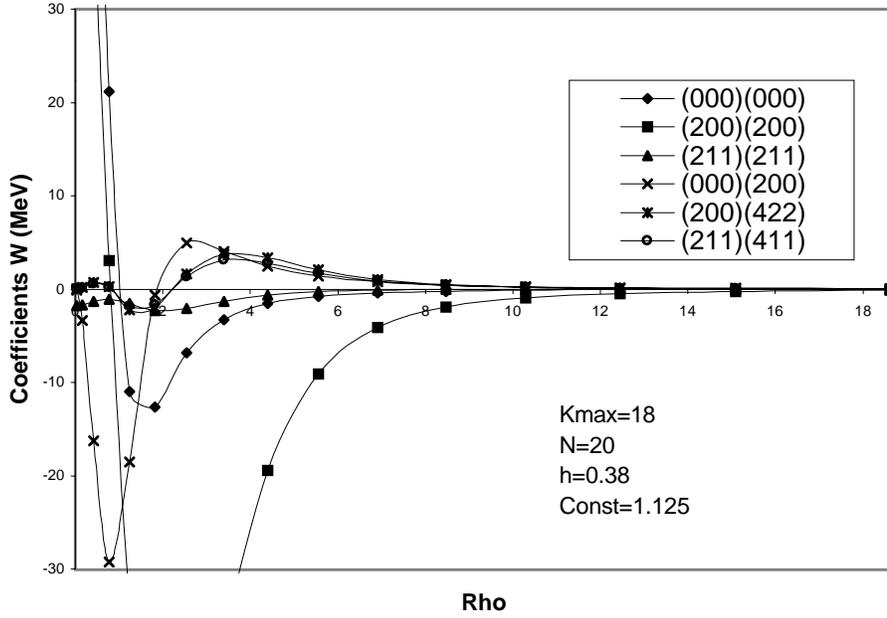


FIG. 5.12 – Coefficients W en fonction de l'hyperrayon ρ pour le potentiel à composante orbitale

5.3.4 Etude de la fonction d'onde

La décomposition de la fonction d'onde nous permet de retrouver les densités de probabilité des couples x et y définis par la relation

$$P(x, y) = \int_{\hat{x}\hat{y}} |\Psi(x, y, \hat{x}, \hat{y})|^2 d\hat{x}d\hat{y} \quad (5.7)$$

Nous utilisons le développement de Ψ (qui conduit au facteur $1/\rho^5$, voir 2.46), la définition de l'élément de volume hypersphérique (qui apporte les facteurs x^2 et y^2 , voir 2.22) et l'orthogonalité des harmoniques sphériques (les doubles sommes sur l_x , l'_x , l_y et l'_y se réduisent à une double somme sur l_x et l_y) pour écrire

$$P(x, y) = \frac{x^2 y^2}{\rho^5} \sum_{l_x l_y} \left| \sum_K \chi_{KL}^{l_x l_y}(\rho) F_K^{l_x l_y}(\alpha) \right|^2 \quad (5.8)$$

où $F_K^{l_x l_y}(\alpha)$ est la partie des harmoniques hypersphériques dépendant de l'hyperangle α (voir 3.6), $\rho = \sqrt{x^2 + y^2}$ et $\tan \alpha = y/x$. Comme nous l'avons vu, nous utilisons le repère centré sur la particule alpha : x est donc proportionnel à la distance relative entre les deux neutrons (nous la notons dorénavant r_{NN}) et y à la distance de la particule alpha au centre de gravité des deux neutrons (notée $r_{\alpha(NN)}$).

L'intégrale de $P(x, y)$ vaut un par conservation de la norme de la fonction d'onde. Notre calcul ne s'écarte de l'unité que par moins de 10^{-6} . La représentation de $P(x, y)$ (figures 5.13 et 5.14) montre clairement deux pics très prononcés centrés sur les points $(x = 1.25, y = 3)$ et $(x = 3, y = 1.25)$. Ces points correspondent aux valeurs $(r_{NN} = 1.8, r_{\alpha(NN)} = 2.6)$ et $(r_{NN} = 4.2, r_{\alpha(NN)} = 1.1)$. Les rapports y/x valent respectivement 2.4 et 0.4, ils correspondent à $\alpha = \frac{3\pi}{8}$ et $\alpha = \frac{\pi}{8}$ (ces résultats sont en accord avec [22]).

Ces deux configurations portent les noms de "configuration Cigare" ($y < x$ et $r_{\alpha(NN)} < r_{NN}$) et "configuration Dineutron" ($x < y$ et $r_{NN} < r_{\alpha(NN)}$). La première se caractérise par une anticorrélation des neutrons disposés en moyenne symétriquement par rapport à la particule alpha, la seconde par une corrélation entre les deux neutrons proches l'un de l'autre et situés en moyenne du même côté de la particule alpha.

Si nous avons tenu compte des composantes de spin total non nul, nous aurions une troisième configuration (les probabilités de présence dépendent des spins : $P^S(x, y)$) avec un rapport y/x égal à l'unité et un angle alpha de $\frac{\pi}{4}$. Cette troisième configuration est appelée "configuration Hélicoptère" ; dans cet état, les neutrons ne sont pas corrélés.

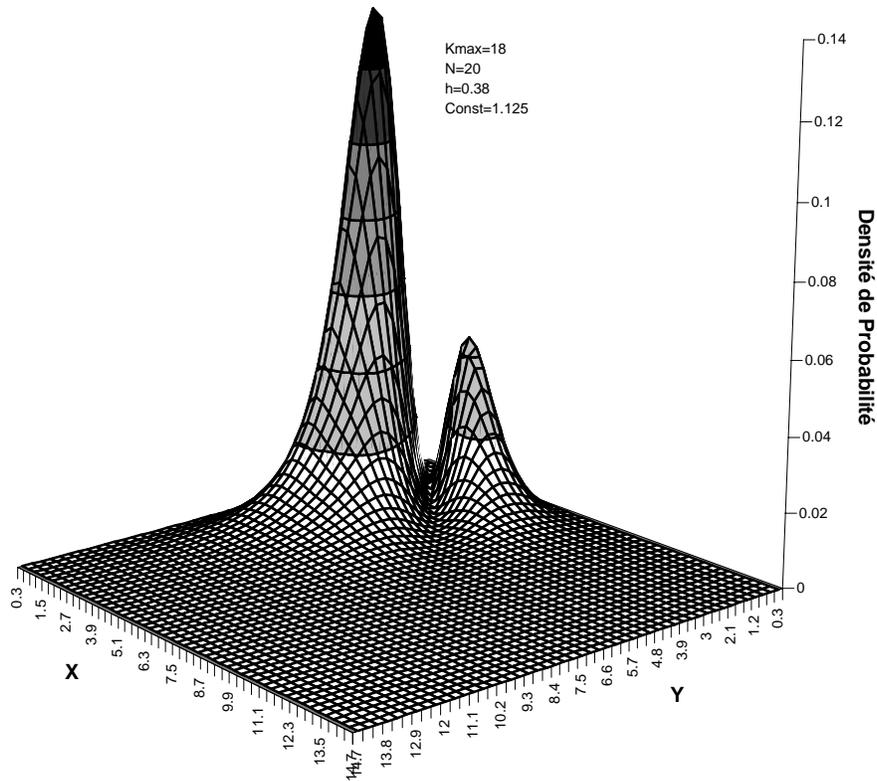


FIG. 5.13 – Représentation tridimensionnelle de la densité de probabilité des couples x et y pour le potentiel à composante orbitale

Ces trois configurations ne sont pas liées au type d'interaction neutron - neutron, elles proviennent de l'application du principe d'exclusion de Pauli au système et de l'importance de la composante $K = 2$. Pour le montrer, approchons la fonction d'onde par la seule composante $K = 2$ et déterminons $P(x, y)$ (voir l'article de B. V. Danilin et al. ([22])

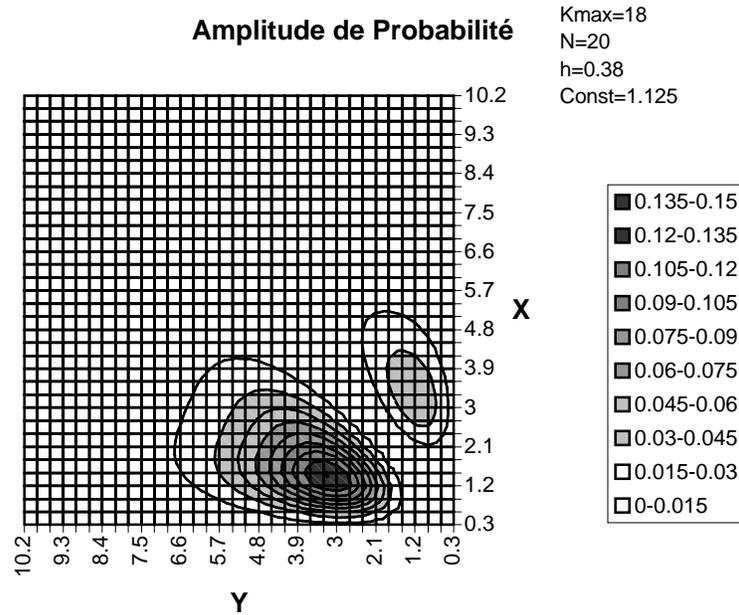


FIG. 5.14 – Représentation plane de la densité de probabilité des couples x et y pour le potentiel à composante orbitale

pour une discussion générale sur les trois configurations)

$$P(x, y) = \frac{\sin^2 \alpha \cos^2 \alpha}{\rho} |\chi_2^{00}(\rho) F_2^{00}(\alpha)|^2 \quad (5.9)$$

avec $\rho = \sqrt{x^2 + y^2}$ et $\tan \alpha = y/x$. Nous utilisons l'expression de la partie dépendant de α des harmoniques hypersphériques (le polynôme de Jacobi de degré 1 et de paramètres $1/2, 1/2$ vaut $P_1^{1/2, 1/2}(x) = \frac{3x}{2}$) pour obtenir

$$P(x, y) = \frac{4}{\pi \rho} \sin^2(4\alpha) (\chi_2^{00}(\rho))^2 \quad (5.10)$$

Pour ρ constant, cette fonction est extrémale en cinq valeurs de α . Elle est maximale en $\alpha = \frac{\pi}{8}$ et $\alpha = \frac{3\pi}{8}$ et nulle en $\alpha = 0$, $\alpha = \frac{\pi}{4}$ et $\alpha = \frac{\pi}{2}$. Cette hypothèse suffit donc à expliquer la position en α des maximums et la séparation des deux pics. Nous avons vu que le principe d'exclusion de Pauli est à l'origine de l'importance de la composante $K = 2$, une autre de ses conséquences est l'existence de ces configurations.

Les deux pics n'ont pas la même amplitude, la configuration "Dineutron" domine (l'intégrale du pic "Dineutron" vaut 0.81 et celle du pic "Cigare" 0.19). Cette différence d'amplitude ne peut être expliquée par la composante $K = 2$ seule mais provient des interférences entre toutes les fonctions radiales hypersphériques. Nous pouvons expliquer physiquement l'importance de la configuration "Dineutron" avec l'interaction neutron - neutron qui comprend une partie attractive (voir la figure 5.1).

Ces configurations ne se manifestent pas directement physiquement, la fonction d'onde totale est une superposition linéaire des configurations et les expériences ne mettront en évidence que des moyennes des positions des neutrons. Néanmoins, des calculs théoriques

de fragmentation pourraient montrer que la distribution en moments de la particule alpha issue du noyau est caractéristique de l'existence des configurations (voir [8]). Des expériences ont été menées mais l'accord avec ces calculs n'est toujours pas démontré.

5.3.5 Etude des rayons en moyenne quadratique

Nous notons $\langle R_\alpha^2 \rangle$ la moyenne du carré de l'observable position de la particule alpha dans le centre de masse au carré, $\langle R_1^2 \rangle$ et $\langle R_2^2 \rangle$ les moyennes des carrés des observables positions des deux neutrons dans le centre de masse et $\langle R_n^2 \rangle$ la moyenne de $\langle R_1^2 \rangle$ et de $\langle R_2^2 \rangle$

$$\begin{aligned}\langle R_\alpha^2 \rangle &= \langle \|\vec{r}_i - \vec{R}_{cm}\|^2 \rangle \\ \langle R_n^2 \rangle &= \frac{1}{2}(\langle R_1^2 \rangle + \langle R_2^2 \rangle) = \frac{1}{2}(\langle \|\vec{r}_j - \vec{R}_{cm}\|^2 \rangle + \langle \|\vec{r}_k - \vec{R}_{cm}\|^2 \rangle)\end{aligned}\quad (5.11)$$

Exprimons le rayon en moyenne quadratique du système $\alpha+n+n$ en utilisant sa définition générale (2.18)

$$\begin{aligned}\langle r^2 \rangle &= \frac{1}{6} (4 \langle R_\alpha^2 \rangle + \langle R_1^2 \rangle + \langle R_2^2 \rangle + 4 \langle r_\alpha^2 \rangle) \\ &= \frac{1}{6} (\langle \rho^2 \rangle + 4 \langle r_\alpha^2 \rangle)\end{aligned}\quad (5.12)$$

où $\langle r_\alpha^2 \rangle$ est le rayon de matière en moyenne quadratique de la particule alpha (nous prenons $\langle r_\alpha^2 \rangle^{1/2} = 1.46$ fm en suivant [22]).

Exprimons les deux grandeurs $\langle R_\alpha^2 \rangle$ et $\langle R_n^2 \rangle$ en utilisant l'expression des coordonnées des particules en fonction des coordonnées de Jacobi et de la coordonnée de centre de masse (le fait de prendre la moyenne de $\langle R_1^2 \rangle$ et de $\langle R_2^2 \rangle$ permet d'éliminer les termes en $\vec{x}_i \cdot \vec{y}_i$ et donc la dépendance en les angles directeurs des vecteurs \vec{x}_i et \vec{y}_i) :

$$\begin{aligned}\langle R_\alpha^2 \rangle &= \langle \frac{1}{12} y_i^2 \rangle = \langle \frac{1}{12} \rho^2 \sin^2 \alpha \rangle \\ \langle R_n^2 \rangle &= \langle \frac{1}{2} (x_i^2 + \frac{2}{3} y_i^2) \rangle = \langle \frac{\rho^2}{2} (1 - \frac{1}{3} \sin^2 \alpha) \rangle\end{aligned}\quad (5.13)$$

Pour le calcul de ces grandeurs, nous utilisons le développement de la fonction d'onde (2.46), la définition de l'élément de volume (2.22) et l'orthogonalité de harmoniques sphériques pour obtenir les expressions de $\langle R_\alpha^2 \rangle$, $\langle R_n^2 \rangle$, $\langle \rho^2 \rangle$ et de la norme de la fonction d'onde :

$$\begin{aligned}\langle R_n^2 \rangle &= \int_0^\infty \int_0^{\pi/2} \frac{\rho^2}{2} \sin^2 \alpha \cos^2 \alpha (1 - \frac{1}{3} \sin^2 \alpha) \sum_{l_x l_y} \left| \sum_K \chi_{KLM_L}^{l_x l_y}(\rho) F_K^{l_x l_y}(\alpha) \right|^2 d\alpha d\rho \\ \langle R_\alpha^2 \rangle &= \int_0^\infty \int_0^{\pi/2} \frac{\rho^2}{12} \sin^4 \alpha \cos^2 \alpha \sum_{l_x l_y} \left| \sum_K \chi_{KLM_L}^{l_x l_y}(\rho) F_K^{l_x l_y}(\alpha) \right|^2 d\alpha d\rho \\ \langle \rho^2 \rangle &= \int_0^\infty \int_0^{\pi/2} \rho^2 \sin^2 \alpha \cos^2 \alpha \sum_{l_x l_y} \left| \sum_K \chi_{KLM_L}^{l_x l_y}(\rho) F_K^{l_x l_y}(\alpha) \right|^2 d\alpha d\rho \\ 1 &= \int_0^\infty \int_0^{\pi/2} \sin^2 \alpha \cos^2 \alpha \sum_{l_x l_y} \left| \sum_K \chi_{KLM_L}^{l_x l_y}(\rho) F_K^{l_x l_y}(\alpha) \right|^2 d\alpha d\rho\end{aligned}\quad (5.14)$$

Les deux dernières équations nous permettent d'évaluer la précision moyenne et de comparer le résultat de ce calcul avec l'expression directe du rayon de matière en moyenne quadratique en fonction des noeuds du réseau de Lagrange (3.31). Nous obtenons par ce calcul $\langle R_\alpha^2 \rangle^{1/2} = 1.30$ fm, $\langle R_n^2 \rangle^{1/2} = 3.35$ fm, $\langle \rho^2 \rangle^{1/2} = 5.40$ fm, $\langle r^2 \rangle^{1/2} = 2.51$ fm et la norme de la fonction d'onde ne s'écarte de l'unité que par moins de 10^{-5} .

Nous pouvons calculer $\langle \rho^2 \rangle$ de deux manières différentes : soit par une somme sur les fonctions radiales hypersphériques (5.14), soit directement par une somme sur les coefficients des fonctions de Lagrange (3.31). Les expressions directes de $\langle \rho^2 \rangle$ à partir du réseau nous donne $\langle \rho^2 \rangle^{1/2} = 5.40015$ fm et l'erreur sur la norme de la fonction d'onde est inférieure à 10^{-6} . Les expressions de $\langle \rho^2 \rangle$ à partir des fonctions radiales nous donne $\langle \rho^2 \rangle^{1/2} = 5.40019$ fm et l'erreur sur la norme de la fonction d'onde est inférieure à 10^{-5} . Les deux méthodes sont bien sûr cohérentes mais le réseau de Lagrange permet d'éviter de calculer des intégrales en réduisant donc à la fois l'imprécision et le temps de calcul. Les résultats obtenus sont légèrement supérieurs à ceux de B. V. Danilin et al. ([22]) mais nous n'utilisons pas les même potentiels.

Il faut noter que les précisions atteintes (au delà de 10^{-3}) n'ont pas de sens physique car notre modélisation n'est pas aussi réaliste. De plus, contrairement à ce que nous avons pour l'énergie de liaison, nous ne disposons pas d'une approximation nous permettant de déterminer le rayon à la limite $K_M \rightarrow \infty$ (le tableau suivant présente les valeurs de rayon de matière en moyenne quadratique calculées pour différents paramètres K_M). Néanmoins, les rayons obtenus avec les valeurs élevées de K_M sont cohérentes avec les expériences : nous obtenons 2.51 fm pour une valeur mesurée de 2.57 ± 0.1 fm.

Paramètre K_M	Rayon de matière calculé (fm)
0	7.999
2	2.789
4	2.644
6	2.506
8	2.499
10	2.500
12	2.503
14	2.501
16	2.507
18	2.506

Nous observons très clairement une structure en halo avec une particule alpha à très courte distance du centre de masse (voir la faible valeur de $\langle R_\alpha^2 \rangle^{1/2}$) et deux neutrons évoluant à plus grande distance (voir la valeur élevée de $\langle R_n^2 \rangle^{1/2}$).

Définissons les rayons de protons et de neutrons en moyenne quadratique pour le système $\alpha + n + n$ (notés $\langle r^2 \rangle_p$ et $\langle r^2 \rangle_n$)

$$\begin{aligned}
A \langle r^2 \rangle &= Z \langle r^2 \rangle_p + N \langle r^2 \rangle_n \\
\langle r^2 \rangle_p &= \langle R_\alpha^2 \rangle + \langle r_\alpha^2 \rangle \\
\langle r^2 \rangle_n &= \frac{\langle R_\alpha^2 \rangle + \langle r_\alpha^2 \rangle}{2} + \frac{\langle R_1^2 \rangle + \langle R_2^2 \rangle}{4}
\end{aligned} \tag{5.15}$$

Nous obtenons $\langle r^2 \rangle_p^{1/2} = 1.95$ fm et $\langle r^2 \rangle_n^{1/2} = 2.74$ fm. Cette différence entre les

rayons des protons et des neutrons est due à la répartition étendue des deux neutrons périphériques représentée par la valeur élevée de $\langle R_n^2 \rangle$.

Le rayon de charge de ${}^6\text{He}$ est un peu plus élevé que celui de ${}^4\text{He}$ (1.95 pour 1.46 fm) car il comporte deux parties : d'une part le rayon intrinsèque de la particule alpha (égal au rayon de charge de ${}^4\text{He}$) et d'autre part la moyenne du carré des positions de la particule alpha par rapport au centre de masse. Le deuxième terme est évidemment nul pour ${}^4\text{He}$ mais ne peut être négligé pour ${}^6\text{He}$.

Le rayon de matière de ${}^6\text{He}$ est bien plus élevé que celui de ${}^4\text{He}$ (2.51 pour 1.46 fm), la différence étant due principalement à la moyenne du carré des positions des neutrons du halo. Comparons les valeurs avec l'approximation habituelle (voir [9]) $\langle r^2 \rangle_{ch}^{1/2} \approx 0.96A^{1/3}$. Le noyau ${}^4\text{He}$ vérifie approximativement la loi (1.46 fm pour 1.52 fm) mais ${}^6\text{He}$ est beaucoup plus étendu (la loi donne 1.74 fm). Cette étendue physique des noyaux à halo a été le premier élément mis en évidence historiquement.

Chapitre 6

Conclusion

Du point de vue physique, notre modélisation a mis en évidence les principales caractéristiques des noyaux à halo et de ${}^6\text{He}$ en particulier : une faible énergie de liaison ($E = -0.973 \pm 0.04$ MeV), une grande étendue physique du noyau ($\langle r^2 \rangle^{1/2} = 2.51$ fm) due à celle du halo de deux neutrons ($\langle R_n^2 \rangle^{1/2} = 3.35$ fm), l'existence d'un seul état lié et celle de différentes configurations correspondant aux positions moyennes des deux neutrons par rapport à la particule alpha (configurations "Dineutron" et "Cigare"). Nous avons montré l'importance fondamentale du principe d'exclusion de Pauli dans ce système à trois corps.

Du point de vue numérique, les résultats obtenus sont très proches de ceux d'autres calculs n'utilisant pas l'approximation du spin total nul ([8], [19], [22] et [23]), sauf bien sûr pour les amplitudes des différentes configurations (nous ne pouvons pas reproduire la composante de spin total un). Malgré cela, les autres grandeurs sont très bonnes. L'approximation consistant à négliger les composantes de spin total non nul était donc justifiée.

Les interactions conduisent aux bons résultats et notamment à interdire les ondes s pour les deux neutrons du halo ; elles sont validées par l'exactitude des configurations et des rayons nucléaires obtenus.

Nous avons étudié l'influence des approximations utilisées pour la résolution des équations hypersphériques. La convergence en K peut être lente pour certains potentiels mais des valeurs relativement basses de K suffisent pour donner de bons résultats (nous avons utilisé $K = 18$). La méthode des Réseaux de Lagrange est très efficace, pour un relativement petit nombre N de noeuds du réseau ($N = 20$) les résultats sont précis et stables. Ils ne sont pratiquement pas sensibles au paramètre h dans le large interval où l'approximation de Gauss est vérifiée ce qui montre sa validité. En outre, certains éléments de matrice sont diagonaux (notamment $\langle \rho^2 \rangle$), ce qui permet d'éviter d'effectuer certaines sommations et intégrales, donc d'augmenter la précision et de diminuer le temps de calcul.

La méthode des coordonnées hypersphériques modélise les problèmes à trois corps de manière efficace et simple. Nous avons montré pour la première fois que la méthode des Réseaux de Lagrange s'y adapte parfaitement et permet encore d'améliorer les calculs.

Ces conclusions sont très encourageantes et un approfondissement de la modélisation semble très prometteur. Parmi les améliorations possibles, la prise en compte de la composante $L = S = 1$ et celle des termes non centraux des interactions nous paraissent cruciales. Du point de vue numérique, des potentiels plus complexes nécessiteraient des calculs plus précis (le comportement asymptotique ne serait plus connu théoriquement)

sans pour autant impliquer des modifications profondes de notre modélisation.

Nous avons vu que ${}^6\text{He}$ est un très bon test des méthodes de résolution de problèmes nucléaires à trois corps. D'autres noyaux à halo de deux neutrons existent (notamment ${}^{11}\text{Li}$), leur étude est plus complexe car les interactions cœur - halo sont moins bien connues mais serait une extension très intéressante.

La modélisation que nous avons utilisée ne permet de traiter que les états liés, le traitement des états libres permettrait de modéliser les résonances de réactions nucléaires. La mise en évidence des propriétés du noyau à halo ${}^6\text{He}$ est un problème complexe, cette modélisation de réactions permettrait de préciser les phénomènes observables.

Le noyau ${}^6\text{He}$ forme un triplet d'isospin et partage des propriétés avec les noyaux isobares ${}^6\text{Li}$ (stable) et ${}^6\text{Be}$ (instable en particule). Si ${}^6\text{Li}$ n'a pas de structure en halo, son étude avec le modèle à trois corps permettrait de le comparer avec ${}^6\text{He}$ (l'interaction coulombienne devra être prise en compte ce qui risque de ralentir les convergences).

Annexe A

Normalisation des harmoniques hypersphériques

Nous voulons montrer l'orthonormalité des harmoniques hypersphériques :

$$\int_{\Omega} Y_K^{l_x l_y m_x m_y *}(\Omega) Y_{K'}^{l'_x l'_y m'_x m'_y}(\Omega) d\Omega = \delta_{l_x l'_x} \delta_{l_y l'_y} \delta_{m_x m'_x} \delta_{m_y m'_y} \delta_{KK'} \quad (\text{A.1})$$

avec l'expression des harmoniques hypersphériques :

$$\begin{aligned} Y_K^{l_x l_y m_x m_y}(\Omega) &= \mathcal{N}_K^{l_x l_y} (\cos \alpha)^{l_x} (\sin \alpha)^{l_y} P_n^{l_y+1/2, l_x+1/2}(\cos 2\alpha) Y_{l_x}^{m_x}(\hat{x}) Y_{l_y}^{m_y}(\hat{y}) \\ \mathcal{N}_K^{l_x l_y} &= \left[\frac{2n!(K+2)(n+l_x+l_y+1)!}{\Gamma(n+l_x+\frac{3}{2})\Gamma(n+l_y+\frac{3}{2})} \right]^{\frac{1}{2}} \\ n &= \frac{K-l_x-l_y}{2} \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

L'intégrale peut se séparer en une intégrale sur α et deux autres sur \hat{x} et \hat{y} . Nous effectuons ces deux dernières en exploitant l'orthogonalité des harmoniques sphériques

$$\int Y_{m_1}^{l_1}(\hat{x}) Y_{m_2}^{l_2}(\hat{x}) d\hat{x} = \delta_{l_1 l_2} \delta_{m_1 m_2} \quad (\text{A.3})$$

Nous obtenons

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} Y_K^{l_x l_y m_x m_y *}(\Omega) Y_{K'}^{l'_x l'_y m'_x m'_y}(\Omega) d\Omega &= \mathcal{N}_K^{l_x l_y} \mathcal{N}_{K'}^{l'_x l'_y} \int_0^{\frac{\pi}{2}} (\cos \alpha)^{2(l_x+1)} (\sin \alpha)^{2(l_y+1)} \\ &\quad \times P_n^{l_y+1/2, l_x+1/2}(\cos 2\alpha) P_{n'}^{l'_y+1/2, l'_x+1/2}(\cos 2\alpha) d\alpha \delta_{l_x l'_x} \delta_{l_y l'_y} \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Les polynômes de Jacobi vérifient une relation d'orthogonalité

$$\int_{-1}^{+1} (1+x)^{\beta} (1-x)^{\alpha} P_n^{\alpha, \beta}(x) P_{n'}^{\alpha, \beta}(x) dx = \frac{2^{\alpha+\beta+1}}{2n+\alpha+\beta+1} \frac{\Gamma(n+\alpha+1)\Gamma(n+\beta+1)}{n!\Gamma(n+\alpha+\beta+1)} \delta_{nn'} \quad (\text{A.5})$$

Faisons un changement de variables de α vers $x = \cos 2\alpha$ et notons $\alpha = l_y + 1/2$ et $\beta = l_x + 1/2$

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} Y_K^{l_x l_y m_x m_y *}(\Omega) Y_{K'}^{l'_x l'_y m'_x m'_y}(\Omega) d\Omega &= \mathcal{N}_K^{l_x l_y} \mathcal{N}_{K'}^{l'_x l'_y} \int_{-1}^{+1} \left(\frac{1+x}{2}\right)^{\beta+1/2} \left(\frac{1-x}{2}\right)^{\alpha+1/2} \\ &\quad \times P_n^{\alpha, \beta}(x) P_{n'}^{\alpha, \beta}(x) \frac{dx}{2\sqrt{1-x^2}} \\ &= \frac{\mathcal{N}_K^{l_x l_y} \mathcal{N}_{K'}^{l'_x l'_y}}{2^{\alpha+\beta+2}} \frac{2^{\alpha+\beta+1}}{2n+\alpha+\beta+1} \frac{\Gamma(n+\alpha+1)\Gamma(n+\beta+1)}{n!\Gamma(n+\alpha+\beta+1)} \delta_{nn'} \\ &= \delta_{nn'} = \delta_{KK'} \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

En simplifiant les fractions, nous retrouvons l'expression de la constante de normalisation

$$[\mathcal{N}_K^{l_x l_y}]^2 = \frac{2n!(2n + \alpha + \beta + 1)\Gamma(n + \alpha + \beta + 1)}{\Gamma(n + \alpha + 1)\Gamma(n + \beta + 1)} \quad (\text{A.7})$$

Annexe B

Coefficients de Raynal-Revai

L'expression exacte des coefficients de Raynal-Revai est tirée de [13] :

$$\begin{aligned}
 & \langle l_{x_i} l_{y_i} | l_{x_k} l_{y_k} \rangle_{KL} = \frac{\pi}{4} \left[C_{l_{x_i} l_{y_i}}^{n_i} C_{l_{x_k} l_{y_k}}^{n_k} \right]^{-1/2} \\
 & \times \sum_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3 \lambda_4} (i)^{\lambda_3 + \lambda_4 + l_{y_i} - l_{y_k}} (-)^{\lambda_1 + \lambda_2} f(\lambda_1, \lambda_3; l_{x_k}) f(\lambda_4, \lambda_2; l_{y_k}) f(\lambda_1, \lambda_4; l_{x_i}) f(\lambda_3, \lambda_2; l_{y_i}) \\
 & \times \left\{ \begin{array}{ccc} \lambda_1 & \lambda_3 & l_{x_k} \\ \lambda_4 & \lambda_2 & l_{y_k} \\ l_{x_i} & l_{y_i} & L \end{array} \right\} \cdot \sum_{\mu\nu} (-)^{\mu} C_{\lambda_3 \lambda_4}^{\mu} C_{\lambda_1 \lambda_2}^{\nu} (\cos \varphi_{ki})^{2\nu + \lambda_1 + \lambda_2} (\sin \varphi_{ki})^{2\mu + \lambda_3 + \lambda_4} \quad (B.1)
 \end{aligned}$$

pour

$$\begin{aligned}
 K = 2n_i + l_{x_i} + l_{y_i} &= 2n_k + l_{x_k} + l_{y_k} ; n_i \text{ et } n_k \text{ entiers positifs ou nuls} \\
 |l_{x_i} - l_{y_i}| &\leq L \leq (l_{x_i} + l_{y_i}) \\
 |l_{x_k} - l_{y_k}| &\leq L \leq (l_{x_k} + l_{y_k}) \quad (B.2)
 \end{aligned}$$

et avec les notations suivantes :

$$\begin{aligned}
 C_{\beta\gamma}^{\alpha} &= \frac{\Gamma(2\alpha + \beta + \gamma + 2)}{\Gamma(\alpha + \beta + \frac{3}{2})\Gamma(\alpha + \gamma + \frac{3}{2})\Gamma(\alpha + 1)\Gamma(\alpha + \beta + \gamma + 2)} \\
 f(a, b; c) &= \sqrt{(2a+1)(2b+1)(a0b0|c0)} = \sqrt{(2a+1)(2b+1)(2c+1)} (-)^{a+b} \begin{pmatrix} a & b & c \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
 \left\{ \begin{array}{ccc} J_1 & J_2 & J_{12} \\ J_3 & J_4 & J_{34} \\ J_{13} & J_{24} & J \end{array} \right\} &\text{ un coefficient } 9j \\
 \left(\begin{array}{ccc} J_1 & J_2 & J_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{array} \right) &\text{ un coefficient } 3jm \quad (B.3)
 \end{aligned}$$

Apparaissent dans l'expression un coefficient $9j$ et un produit de coefficients $3jm$ de

projections nulles ; les sommations sont limitées par les conditions suivantes :

$$\begin{aligned}
K &= 2\nu + 2\mu + \lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3 + \lambda_4 \\
|\lambda_1 - \lambda_3| &\leq l_{x_k} \leq (\lambda_1 + \lambda_3) \\
|\lambda_4 - \lambda_2| &\leq l_{y_k} \leq (\lambda_4 + \lambda_2) \\
|\lambda_1 - \lambda_4| &\leq l_{x_i} \leq (\lambda_1 + \lambda_4) \\
|\lambda_3 - \lambda_2| &\leq l_{y_i} \leq (\lambda_3 + \lambda_2) \\
\lambda_1 + \lambda_3 + l_{x_k} &\text{ pair} \\
\lambda_4 + \lambda_2 + l_{y_k} &\text{ pair} \\
\lambda_1 + \lambda_4 + l_{x_i} &\text{ pair} \\
\lambda_3 + \lambda_2 + l_{y_i} &\text{ pair}
\end{aligned} \tag{B.4}$$

Nous donnons ci-dessous les ensembles de coefficients de Raynal-Revai correspondant aux transformations conservant les premiers nombres quantiques hypersphériques $K = 0$, $K = 2$ et $K = 4$ pour les trois masses égales à un. Nous les donnons ensuite pour les masses de ${}^6\text{He}$. Dans ce cas, il existe deux transformations : de i vers j et de i vers k . Les deux matrices sont les transposées l'une de l'autre. Nous donnons les coefficients de la deuxième transformation.

Les coefficients sont représentés en tableaux, le numéro de ligne représente les indices $l_{x_i} l_{y_i}$ prenant les valeurs successives $(0, 0)$, $(1, 1)$ et $(2, 2)$, le numéro de colonnes les indices $l_{x_k} l_{y_k}$.

$$m_i = m_j = m_k = 1 \left\{ \begin{array}{l} K = 0 \quad [1] \\ K = 2 \quad \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ +\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix} \\ K = 4 \quad \begin{bmatrix} 0 & +\frac{\sqrt{2}}{2} & +\frac{\sqrt{2}}{2} \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} & -\frac{1}{2} & +\frac{1}{2} \\ +\frac{\sqrt{2}}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix} \end{array} \right. \tag{B.5}$$

$$m_i = 4, m_j = m_k = 1 \left\{ \begin{array}{l} K = 0 \quad [1] \\ K = 2 \quad \begin{bmatrix} -\frac{1}{5} & -\frac{2\sqrt{6}}{5} \\ +\frac{2\sqrt{6}}{5} & -\frac{1}{5} \end{bmatrix} \\ K = 4 \quad \begin{bmatrix} -\frac{7}{25} & +\frac{8}{25} & +\frac{16\sqrt{2}}{25} \\ -\frac{8}{25} & -\frac{23}{25} & +\frac{4\sqrt{2}}{25} \\ +\frac{16\sqrt{2}}{25} & -\frac{4\sqrt{2}}{25} & +\frac{9}{25} \end{bmatrix} \end{array} \right. \tag{B.6}$$

Ce sont toutes des matrices de déterminant égal à plus un, analogues à des matrices de rotation.

Annexe C

Polynômes orthogonaux de Jacobi, de Laguerre et de Legendre

Les polynômes orthogonaux sont présentés dans [17], toutes les formules suivantes sont tirées de cette référence. Les familles de polynômes orthogonaux $f_n(x)$ sont définies sur un intervalle $[a, b]$ et vérifient une relation d'orthogonalité du type

$$\int_a^b w(x)f_n(x)f_m(x)dx = h_n\delta_{nm} \quad (\text{C.1})$$

où $w(x)$ est une fonction poids et h_n une constante de normalisation.

Ces fonctions satisfont un ensemble d'équations différentielles du type

$$g_2(x)f_n'' + g_1(x)f_n' + a_n f_n = 0 \quad (\text{C.2})$$

où $g_1(x)$ et $g_2(x)$ sont des fonctions de x indépendantes de n et a_n est une constante dépendant uniquement de n . Elles vérifient des relations de récurrences du type

$$f_{n+1} = (a_n + xb_n)f_n - c_n f_{n-1} \quad (\text{C.3})$$

où a_n , b_n et c_n sont trois constantes dépendant uniquement de n . Enfin, certaines familles vérifient une formule de Rodrigues du type

$$f_n = \frac{1}{e_n w(x)} \frac{d^n}{dx^n} (w(x)[g(x)]^n) \quad (\text{C.4})$$

où e_n est une constante dépendant uniquement de n et $g(x)$ un polynôme en x indépendant de n .

Polynômes de Laguerre : $L_n(x)$ $n \geq 0$

Ils vérifient la relation d'orthogonalité

$$\int_0^\infty e^{-x} L_n(x)L_m(x)dx = \delta_{nm} \quad (\text{C.5})$$

ainsi que les équation différentielles

$$\begin{aligned} xy'' + (1-x)y' + ny &= 0 && \text{avec } y = L_n(x) \\ xy'' + (1+x)y' + (n+1)y &= 0 && \text{avec } y = e^{-x}L_n(x) \end{aligned} \quad (\text{C.6})$$

et la relation de récurrence

$$(n+1)L_{n+1}(x) = (2n+1-x)L_n(x) - nL_{n-1}(x) \quad (\text{C.7})$$

La relation de Rodrigues est

$$L_n(x) = \frac{1}{n!e^{-x}} \frac{d^n}{dx^n} [e^{-x}x^n] \quad (\text{C.8})$$

Une relation permettant de calculer la valeur du polynôme de Laguerre de degré n au point x est

$$L_n(x) = a_0(x) \text{ avec } \begin{cases} a_{m-1}(x) = 1 - \frac{n-m+1}{m^2} x a_m(x) \\ a_n(x) = 1 \end{cases} \quad (\text{C.9})$$

Les premiers polynômes sont

$$\begin{aligned} L_0(x) &= 1 \\ L_1(x) &= 1 - x \end{aligned} \quad (\text{C.10})$$

$$L_2(x) = 1 - 2x + \frac{x^2}{2} \quad (\text{C.11})$$

Polynômes de Jacobi : $P_n^{\alpha\beta}(x)$ $n \geq 0$, $\alpha > -1$, $\beta > -1$

Ils vérifient la relation d'orthogonalité

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 (1-x)^\alpha (1+x)^\beta P_n^{\alpha\beta}(x) P_m^{\alpha\beta}(x) dx &= \delta_{nm} \mathcal{H}_n^{\alpha\beta} \\ \mathcal{H}_n^{\alpha\beta} &= \frac{\Gamma(n+\alpha+1)\Gamma(n+\beta+1)2^{\alpha+\beta+1}}{n!(2n+\alpha+\beta+1)\Gamma(n+\alpha+\beta+1)} \end{aligned} \quad (\text{C.12})$$

ainsi que les équation différentielles

$$\begin{aligned} (1-x^2)y'' + (\beta - \alpha - (\alpha + \beta + 2)x)y' + n(n + \alpha + \beta + 1)y &= 0 \\ \text{avec } y &= P_n^{\alpha\beta}(x) \\ (1-x^2)y'' + (\alpha - \beta + (\alpha + \beta - 2)x)y' + (n+1)(n + \alpha + \beta)y &= 0 \\ \text{avec } y &= (1-x)^\alpha (1+x)^\beta P_n^{\alpha\beta}(x) \end{aligned} \quad (\text{C.13})$$

et la relation de récurrence

$$\begin{aligned} &2(n+1)(n+\alpha+\beta+1)(2n+\alpha+\beta)P_{n+1}^{\alpha\beta}(x) \\ &= [(2n+\alpha+\beta+1)(\alpha^2-\beta^2) + (2n+\alpha+\beta)x] P_n^{\alpha\beta}(x) \\ &- 2(n+\alpha)(n+\beta)(2n+\alpha+\beta+2)P_{n-1}^{\alpha\beta}(x) \end{aligned} \quad (\text{C.14})$$

La relation de Rodrigues est

$$P_n^{\alpha\beta}(x) = \frac{1}{(-)^n 2^n n! (1-x)^\alpha (1+x)^\beta} \frac{d^n}{dx^n} [(1-x)^\alpha (1+x)^\beta (1-x^2)^n] \quad (\text{C.15})$$

Il existe encore de multiples relations de récurrences permettant d'exprimer un polynôme de Jacobi en fonction de polynômes de degrés ou de paramètres différents. Notons que $P_n^{00}(x) = P_n(x)$ avec $P_n(x)$ un polynôme de Legendre.

Une relation permettant de calculer la valeur du polynôme de Jacobi de degré n et de paramètres α et β au point x est

$$P_n^{\alpha\beta}(x) = \frac{(n+\alpha)!}{n!\alpha!} a_0(x) \text{ avec } \begin{cases} a_{m-1}(x) = 1 - \frac{(n-m+1)(\alpha+\beta+n+m)}{2m(\alpha+m)}(1-x)a_m(x) \\ a_n(x) = 1 \end{cases} \quad (\text{C.16})$$

Les premiers polynômes sont

$$\begin{aligned} P_0^{\alpha\beta}(x) &= 1 \\ P_1^{\alpha\beta}(x) &= \frac{1}{2}[2(\alpha+1) + (\alpha+\beta+2)(x-1)] \end{aligned} \quad (\text{C.17})$$

Polynômes de Legendre : $P_n(x)$ $n \geq 0$

Ils vérifient la relation d'orthogonalité

$$\int_{-1}^1 P_n(x)P_m(x)dx = \delta_{nm} \frac{2}{2n+1} \quad (\text{C.18})$$

ainsi que les équation différentielles

$$\begin{aligned} (1-x^2)y'' - 2xy' + n(n+1)y &= 0 \quad \text{avec } y = P_n(x) \\ y'' + \left(\frac{n(n+1)}{1-x^2} + \frac{1}{(1-x^2)^2} \right) y &= 0 \quad \text{avec } y = \sqrt{1-x^2}P_n(x) \end{aligned} \quad (\text{C.19})$$

et la relation de récurrence

$$(n+1)P_{n+1}(x) = (2n+1)xP_n(x) - nP_{n-1}(x) \quad (\text{C.20})$$

La relation de Rodrigues est

$$P_n(x) = \frac{1}{(-)^n 2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} [(1-x^2)^n] \quad (\text{C.21})$$

Une relation permettant de calculer la valeur du polynôme de Laguerre de degré n au point x est

$$\begin{aligned} P_{2n}(x) &= \frac{(-)^n (2n)!}{4^n (n!)^2} a_0(x) \quad \text{avec } \begin{cases} a_{m-1}(x) = 1 - \frac{(n-m+1)(2n+2m-1)}{m(2m-1)} x^2 a_m(x) \\ a_n(x) = 1 \end{cases} \\ P_{2n+1}(x) &= \frac{(-)^n (2n+1)!}{4^n n! (n+1)!} (n+1) x a_0(x) \quad \text{avec } \begin{cases} a_{m-1}(x) = 1 - \frac{(n-m+1)(2n+2m+1)}{m(2m+1)} x^2 a_m(x) \\ a_n(x) = 1 \end{cases} \end{aligned}$$

Les premiers polynômes sont

$$\begin{aligned} P_0(x) &= 1 \\ P_1(x) &= x \end{aligned} \quad (\text{C.22})$$

$$P_2(x) = -\frac{1}{2} + \frac{3x^2}{2} \quad (\text{C.23})$$

Bibliographie

- [1] I. Tanihata, H. Hamagaki, O. Hashimoto, S. Nagamiya, Y. Shida, N. Yoshikawa, O. Yamakawa, K. Sugimoto, T. Kobayashi, D. E. Greiner, N. Takahashi et Y. Nojiri : *Measurement of interaction cross-section and radii of He isotopes*, Phys. Lett. B 160, 380, 1985
- [2] Daniel Baye : *Mécanique Quantique, Première partie : Notions de base*, Notes de cours, Presses Universitaires de Bruxelles, 1998
- [3] I. Tanihata, T. Kobayashi, O. Yamakawa, T. Shimoura, K. Ekuni, K. Sugimoto, N. Takahashi, T. Shimoda et H. Sato : *Measurement of interaction cross-section using isotope beams of Be and B and isospin dependence of the nuclear radii*, Phys. Lett. B 206, 592, 1988
- [4] J. Sida, N. Alamanos, C. Daniel, V. Lapoux, M. Trotta, A. Andreyev, F. Auger et al. : *Sub-barrier fusion with ^6He halo*, Nucl. Phys A 685, 51c-59c, 2001
- [5] I. Tanihata : *Neutron halo nuclei*, J. Phys. G : Nucl. Part. Phys. 22, 157-198, 1996
- [6] P. G. Hansen et A. S. Jensen : *Nuclear Halos*, Annu. Rev. Nucl. Part. Sci. 45, 591-634, 1995
- [7] T. Kobayashi : *Projectile fragmentation of exotic nuclear beam*, Nucl. Phys. A 538, 343c, 1992
- [8] M. V. Zhukov, B. V. Danilin, D. V. Fedorov, J. M. Bang, I. J. Thompson et J. S. Vaagen : *Bound state properties of Borromean halo nuclei : ^6He and ^6Li* , Physics Reports (Review Section of Physics Letters) 231, No. 4, 151-199, 1993
- [9] Daniel Baye : *Eléments de Physique Nucléaire*, Notes de cours, Presses Universitaires de Bruxelles, 1999
- [10] V. M. Krasnopol'skii et V. I. Kukulín, Sov. J. Nucl. Phys. 20, 470, 1975
- [11] M. Hesse, D. Baye, J.-M. Sparenberg : *Supersymmetry in a three-body model of halo nuclei*, Phys. Lett. B 455, 1-6, 1999
- [12] F. T. Smith : *A symmetric representation for three body problems I. Motion in a Plane*, J. of Mathematical Physics 3, No. 4, 735-748, 1962
- [13] J. Raynal et J. Revai : *Transformation Coefficients in the Hyperspherical Approach to the Three-Body Problem*, Il Nuovo Cimento, Vol LXVIII A. N. 4, August 1970
- [14] Mathieu Foquet : *Etude de systèmes quantiques à trois corps par la méthodes des réseaux de Lagrange*, Travail de Fin d'Etudes, ULB, Faculté des Sciences Appliquées, 1995-96
- [15] Daniel Baye : *Mécanique Quantique, Deuxième partie : Symétries et Invariances*, Notes de cours, Presses Universitaires de Bruxelles, 1999

- [16] Fabre de la Ripelle : *The Potential Harmonic Expansion Method*, Annals of Physics 147, 281-320, 1983
- [17] Abramovitch et Stegun : *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*, Dover Publication Inc., New-York, 1964
- [18] Daniel Baye : *Lagrange-mesh calculations of halo nuclei*, Nuclear Physics A 627, 305-323, 1997
- [19] M. Vincke, L. Malegat and D. Baye : *Regularization of singularities in Lagrange-mesh calculations*, J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys. 26, 811-826, 1993
- [20] Y. C. Tang, M. LeMere et D. R. Thompson : *Resonating - group method for nuclear many - body problems*, Phys. Rep. C 47, 167, 1978
- [21] H. Kanada, T. Kaneko, S. Nagata et M. Nomoto : *Microscopic Study of Nucleon-⁴He Scattering and Effective Nuclear Potentials*, Progress of Theoretical Physics, Vol. 61, No. 5, 1979
- [22] B. V. Danilin, M. V. Zhukov, A. A. Korshennikov, L. V. Chulkov et V. D. Efros : *Study of the Structure of states of the isobaric triplet of A=6 nuclei with $J^\pi = 0^+$* , Sov. J. Nucl. Phys. 49 (2), February 1989
- [23] B. V. Danilin, M. V. Zhukov, A. A. Korshennikov, L. V. Chulkov et V. D. Efros : *Calculation of the $0^+ T = 1$ states of the nuclei ⁶He, ⁶Li and ⁶Be in the three-particle $\alpha + 2N$ model with local potentials*, Sov. J. Nucl. Phys. 49 (2), February 1989

Table des figures

4.1	Evolution du niveau fondamental en fonction du paramètre h pour le potentiel harmonique	28
4.2	Evolution du spectre en fonction du paramètre h pour le potentiel harmonique (les niveaux sont représentés par le nombre quantique d'énergie n)	28
4.3	Evolution du spectre en fonction du paramètre h pour le potentiel harmonique avec une seule harmonique prise en compte (les niveaux sont représentés par Ei avec i le numéro du niveau)	29
4.4	Evolution du spectre en fonction du nombre de fonctions dans la base de Lagrange pour le potentiel harmonique (les niveaux sont représentés par Ei avec i le numéro du niveau)	30
5.1	Potentils $n - n$ (noté Vnn), $\alpha - n$ pour l pair (noté $Van+$) et $\alpha - n$ pour l impair (noté $Van-$) en fonction de la distance entre les particules r . . .	32
5.2	Evolution du niveau fondamental en fonction du paramètre h pour le potentiel central	33
5.3	Evolution du spectre en fonction du paramètre h pour le potentiel central (les niveaux sont représentés par Ei avec i le numéro du niveau)	34
5.4	Evolution du spectre en fonction du nombre quantique K maximum pour le potentiel central (les niveaux sont représentés par Ei avec i le numéro du niveau)	35
5.5	Evolution du spectre en fonction du nombre de fonction dans la base de Lagrange pour le potentiel central (les niveaux sont représentés par Ei avec i le numéro du niveau)	35
5.6	Evolution du niveau fondamental en fonction du paramètre h pour le potentiel à composante orbitale	36
5.7	Evolution du niveau fondamental en fonction du nombre de fonctions dans la base de Lagrange pour le potentiel à composante orbitale	37
5.8	Logarithme de la différence entre l'énergie de liaison asymptotique et l'énergie de liaison calculée effectivement en fonction du nombre quantique K maximum pour le potentiel à composante orbitale	38
5.9	Evolution du niveau fondamental en fonction du nombre quantique K maximum, approximation asymptotique de l'évolution et limite asymptotique de l'évolution pour le potentiel à composante orbitale	38
5.10	Fonctions radiales hypersphériques $\chi_{KL=0}^l$ (repérées par le triplet (Kl)) pour le potentiel à composante orbitale	40
5.11	Comportement à l'origine des fonctions radiales hypersphériques $\chi_{KL=0}^l$ (repérées par le triplet (Kl)) pour le potentiel à composante orbitale . . .	40

5.12	Coefficients W en fonction de l'hyperrayon ρ pour le potentiel à composante orbitale	41
5.13	Représentation tridimensionnelle de la densité de probabilité des couples x et y pour le potentiel à composante orbitale	42
5.14	Représentation plane de la densité de probabilité des couples x et y pour le potentiel à composante orbitale	43

Table des matières

1	Un Noyau à Halo : ${}^6\text{He}$	2
1.1	Une description physique des noyaux à halos	2
1.2	Représentation utilisée	3
2	La Méthode des Coordonnées Hypersphériques	6
2.1	Les coordonnées de Jacobi	6
2.1.1	Les différents systèmes de coordonnées de Jacobi	6
2.1.2	La séparation du centre de masse	8
2.1.3	La permutation des coordonnées par rotation	8
2.2	Les coordonnées hypersphériques	9
2.2.1	La définition de l'hyperrayon et des cinq hyperangles	9
2.2.2	L'expression de l'énergie cinétique	11
2.2.3	L'opérateur angulaire $K^2(\Omega_i)$	11
2.2.4	Le traitement de l'équation de Schrödinger	13
2.2.5	Les coefficients de Raynal-Revai	16
3	La Résolution des Equations Hypersphériques	18
3.1	Le calcul des éléments de matrice W	18
3.2	La résolution du système et le réseau de Lagrange	20
3.2.1	Le principe de la méthode des réseaux de Lagrange	20
3.2.2	L'utilisation de la méthode du réseau de Lagrange	21
4	L'interaction harmonique	25
4.1	Symétries des coefficients W	25
4.2	Résolution exacte et approchée du système d'équations	26
4.2.1	La résolution analytique	26
4.2.2	La résolution numérique	27
5	L'Etude de ${}^6\text{He}$	31
5.1	Potentiels de référence	31
5.2	Potentiel central et radial	31
5.3	Potentiel central à composante orbitale	34
5.3.1	Définition du potentiel	34
5.3.2	Etude des variations des paramètres	36
5.3.3	Etude des fonctions radiales hypersphériques	39
5.3.4	Etude de la fonction d'onde	41
5.3.5	Etude des rayons en moyenne quadratique	44

6 Conclusion	47
A Normalisation des harmoniques hypersphériques	49
B Coefficients de Raynal-Revai	51
C Polynômes orthogonaux de Jacobi, de Laguerre et de Legendre	53