

Table des matières

Liste des figures	16
Liste des tableaux	17
Introduction - Mise en contexte	19
1 Description du noyau atomique	25
1.1 Problème à N corps	25
1.2 Seconde quantification	26
1.3 Interaction effective de Gogny	27
1.4 Description de l'état fondamental par des méthodes de champ moyen	29
1.4.1 Méthode Hartree-Fock (HF)	29
1.4.1.1 Hypothèses du modèle	29
1.4.1.2 Approche variationnelle	30
1.4.1.3 Calcul Hartree-Fock	31
1.4.2 Méthode Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB)	35
1.4.2.1 Opérateurs de quasiparticules	36
1.4.2.2 Résolution de l'équation HFB	39
1.4.3 Oscillateur Harmonique (OH)	41
1.4.3.1 OH en coordonnées cylindriques	41
1.4.3.2 OH en coordonnées cartésiennes	43
1.4.3.3 Passage en base finie	44

1.4.4	Expression de HFB dans une base d'OH	45
1.4.5	Déformation, spin et parité	47
1.4.5.1	Déformation statique	47
1.4.5.2	Spin et parité	48
1.5	Excitations nucléaires	49
1.5.1	Description théorique des excitations nucléaires	49
1.5.1.1	Rotation du noyau	49
1.5.1.2	Déformation dynamique (vibration) du noyau	50
1.5.2	Quasiparticle Random Phase Approximation	52
1.5.2.1	Présentation de la QRPA	53
1.5.2.2	Dérivation des équations QRPA	55
1.5.2.3	Expression des produits c^+c^+ , c^+c , cc^+ et cc en fonction des phonons QRPA	58
1.5.2.4	Observables et grandeurs calculées	60
2	Utilisation du code QRPA à symétrie axiale ISAAC	65
2.1	Schéma de calcul global	65
2.2	Étude de noyaux d'étain ($Z = 50$)	67
2.3	Contribution à la conférence P(ND) ² : Perspective on Nuclear Data for the Next Decade	74
2.4	Paramètres de masse vibrationnels pour le 5DCH	92
2.4.1	Présentation du 5DCH	92
2.4.2	Comparaison des masses obtenues par HFB et QRPA	93
2.4.3	Impact de l'espace de valence sur les paramètres de masse . .	95
2.4.4	Impact du terme central de l'interaction sur les paramètres de masse	104
3	Nouvelles implémentations numériques	109
3.1	Opérateurs de transitions multipolaires	109

3.1.1	Calcul analytique des opérateurs	110
3.1.1.1	Action des opérateurs sur les états quantiques . . .	110
3.1.1.2	Récurrance des opérateurs	116
3.1.2	Formulation matricielle	117
3.1.2.1	Expression des matrices associées	118
3.1.2.2	Écriture des nouveaux opérateurs	122
3.1.3	Validation des opérateurs	122
3.1.4	Études des fonctions de force γ pour le processus r	124
3.1.4.1	Étude des transitions électriques $E1$	125
3.1.4.2	Étude des transitions magnétiques $M1$	141
3.2	Modification <i>a posteriori</i> du champ : cas du terme coulombien . . .	151
4	Code QRPA triaxial TAQOS	153
4.1	Développement d'un code de calcul QRPA 3D	153
4.1.1	Formalisme triaxial	154
4.1.1.1	HFB en symétrie triaxiale	154
4.1.1.2	QRPA en symétrie triaxiale	156
4.1.2	Considérations sur l'évolution de la programmation	157
4.1.3	Préparation à l'écriture du code	163
4.1.3.1	Cahier des charges	163
4.1.3.2	Parallélisme (OpenMP+MPI) & vectorisation . . .	165
4.1.4	Programmation du code	168
4.1.4.1	Récupération des données issues de HFB et création des paires	168
4.1.4.2	Calcul du champ central	168
4.1.4.3	Diagonalisation	171
4.1.4.4	Opérateurs de transitions en symétrie triaxiale . . .	172
4.1.5	Validation à l'aide du code axial	172
4.1.6	Premiers résultats	173

A Propriétés des opérateurs de création et d'annihilation	179
A.1 Commutation des opérateurs bosoniques	179
A.2 Commutation des opérateurs fermioniques	180
B Approche variationnelle	183
C Formulaire des opérateurs de transitions multipolaires	187
C.1 Harmoniques sphériques	187
C.2 Opérateurs en coordonnées cylindriques	189
C.3 Opérateurs en coordonnées triaxiales	194



Table des figures

1-1	La machine Hartree-Fock, dessin de J. DECHARGÉ [Ber91].	33
1-2	Effet de l'appariement dans la chaîne isotopique de l'étain [Ben12]. .	35
1-3	Représentation des différents types de coordonnées dans l'espace. . .	42
1-4	Évolution de (a) l'énergie HFB, (b) l'énergie d'appariement, (c) du potentiel chimique protons et (d) du potentiel chimique neutrons selon la taille de la base pour le ^{104}Sn	46
1-5	Représentation de noyaux (a) prolate et (b) oblate.	48
1-6	Projection de J dans le repère du noyau.	49
1-7	Evolution schématique de bandes d'énergies de vibration et de ro- tation [Cas90].	50
1-8	Représentation de la β -vibration et de la γ -vibration dans un noyau symétrique autour de l'axe 3 par des coupes dans le plan 2-3 (en haut) et 1-2 (en bas) [RS80].	51
1-9	Premiers ordres de vibrations multipolaires (Illustrations reproduites avec l'aimable autorisation de J.P.EBRAN).	52
1-10	Schémas de niveaux expérimental, à gauche [NND] et théorique, à droite.	62
2-1	Schéma de calcul du code ISAAC.	66
2-2	Énergies des premiers états 2^+ et 3^- dans la chaîne isotopique des étaïns.	74

2-3	(a) Évolution selon le nombre de masse A du paramètre B_{00} calculé avec HFB (triangles verts), avec la QRPA complète (losanges bleus) et avec la QRPA sous l'approximation Tamm-Dancoff (carrés rouges). (b) Rapports des différents paramètres de masse le long de la chaîne isotopique $Z=50$	94
2-4	(a) Troncature sur l'énergie de paires de quasiparticules : cela revient à choisir une fenêtre de taille E_{cutoff} que l'on fait glisser sur le spectre des particules/trous. On autorise uniquement les couples de quasiparticules dont l'énergie d'excitation est inférieure à cette troncature, c'est à dire les couples particules/trous à l'intérieur de cette fenêtre à participer aux excitations. (b) Insertion d'un cœur inerte : on gèle les états de quasiparticules correspondant aux états de trous les plus profonds.	95
2-5	Paramètre de masse B_{00} au point sphérique dans les étains pairs-pairs entre ^{100}Sn et ^{144}Sn en fonction de la troncature en énergie des paires de quasiparticules et de la taille du cœur inerte.	103
2-6	Paramètre de masse B_{00} au point sphérique dans le ^{104}Sn en fonction de la troncature en énergie des paires de quasiparticules et de la taille du cœur inerte.	104
2-7	Impact de la troncature en énergie des paires de quasiparticules et de la taille du cœur inerte dans le ^{104}Sn . À gauche : évolution de l'énergie du premier état excité 2^+ . À droite : probabilité de transition fondamentale $\rightarrow 2_1^+$	104
2-8	Première valeurs propres obtenues par la QRPA avec l'interaction complète (barres bleues), et le terme central uniquement (losanges rouges).	105

2-9	Paramètre de masse vibrationnel B_{00} pour le ^{32}Mg et le ^{44}S . Les valeurs ont été calculées par HFB (losanges rouges) et par la QRPA, avec l'interaction complète (triangles verts) ou uniquement le terme central (points bleus).	106
2-10	Rapports des différents paramètres de masse présentés dans la figure 2-9.	107
3-1	Représentation schématique de la dispersion due à l'action d'un opérateur $\hat{Q}_{\lambda\mu}$ sur un état quantique donné.	122
3-2	Dégénérescence des états dans le ^{100}Sn	123
4-1	Illustration schématique de noyaux dans une forme sphérique, axiale (prolate), et triaxiale.	156
4-2	Matrices A et B issues d'un calcul triaxial. (a) A et (b) B en échelle linéaire, (c) A et (d) B en échelle logarithmique. Il est très difficile de distinguer la couleur d'un élément de matrice en particulier, puisque les matrices ont quelques milliers de lignes/colonnes, ce qui impliquerait pour tous les voir d'avoir une résolution d'image à l'impression beaucoup plus fine.	158
4-3	Illustration de l'organisation structurelle d'un supercalculateur actuel.	160
4-4	Illustration montrant le fonctionnement d'un processeur de type Single Instruction Single Data (SISD) et celui d'un processeur Single Instruction Multiple Data (SIMD).	167
4-5	Représentation schématique des différents niveaux de parallélisation dans l'algorithme du remplissage de la matrice QRPA.	170
4-6	Comparaison entre les valeurs propres QRPA obtenues par le code axial ISAAC (à gauche, en rouge) et celles obtenues par le code triaxial (à droite, en bleu).	173

4-7	Cartes triaxiales du paramètre de masse vibrationnel B_{00} pour le ^{32}Mg à $\beta = 0$, $\beta = 0.1$ et $\gamma = 0^\circ$, $\gamma = 15^\circ$, $\gamma = 30^\circ$, $\gamma = 45^\circ$ et $\gamma = 60^\circ$ obtenus par (a) HFB (b) QRPA.	174
-----	---	-----

Liste des tableaux

1.1	Valeurs des paramètres pour les forces de Gogny D1S et D1M. . . .	29
1.2	États quantiques accessibles selon la taille de la base en symétrie axiale.	45
3.1	Bas du spectre de ^{100}Sn pour différentes valeurs de K	124
4.1	Comparaison des caractéristiques de processeurs Skylake de dernière génération et d'un processeur KNL [ark].	162

Introduction - Mise en contexte

Dans le monde moderne, les phénomènes nucléaires ont pris une importance substantielle, que l'on soit conscient ou non de leur présence. À l'évocation du terme "nucléaire" on pensera immédiatement aux réacteurs qui fournissent la majeure partie de l'électricité en France, mais on oublie (ou méconnaît) l'utilisation de la physique nucléaire dans la domaine de l'art (restauration et analyse), dans la description de phénomènes astrophysiques (nucléosynthèse, étoiles à neutrons) mais aussi dans le domaine médical. Plusieurs types d'examens médicaux, à la fois d'analyse et de traitement, et devenus très courants pour certains, recourent en effet à des phénomènes nucléaires (scintigraphie, PET-scan, radiothérapie).

Aujourd'hui, la recherche dans ce domaine est en partie orientée vers l'amélioration pure et sans application immédiate de nos connaissances. Ces travaux profitent également à des domaines connexes, qui dépendent de la physique nucléaire (analyse du processus r en astrophysique par exemple). L'autre partie de la recherche est tournée de façon plus pragmatique vers la production de données nucléaires utiles au fonctionnement des systèmes précités. Bien entendu, la démarcation entre les deux n'est pas aussi franche et de nombreux échanges s'opèrent entre les différents thèmes de recherche. Si l'on considère les travaux destinés à des applications, on peut chercher, par exemple, à obtenir une meilleure connaissance d'une section efficace, qui traduit la probabilité qu'une réaction donnée se produise. En cas de réussite, cela permet une amélioration de la précision des calculs de neutronique, et à terme, une utilisation plus optimisée du combustible des

réacteurs électrogènes. La conséquence immédiate est l'amélioration du *burn-up* (grandeur mesurant le taux d'utilisation du combustible), et finalement, une diminution de la quantité de combustible nécessaire, ce qui réduit les coûts mais aussi la quantité de déchets radioactifs produits. Si l'on se tourne vers l'exemple médical, une amélioration des données conduit, dans l'imagerie, à une plus grande finesse dans la résolution des clichés, et donc un diagnostic plus précis. Dans le cas d'un traitement par irradiation, cela améliore la connaissance de la zone à irradier. On peut alors utiliser des rayonnements plus finement focalisés sur la zone à traiter. La conséquence heureuse est que cela permet de réduire l'impact sur les zones saines et aussi de diminuer les doses transmises au patient.

La production de ces données nucléaires repose sur l'étude de la structure nucléaire et des mécanismes de réaction. Ces domaines sont profondément interconnectés et communiquent entre eux, avec pour objectif commun l'amélioration de notre connaissance de la matière au niveau du noyau et de son comportement. Comme son nom l'indique, la structure nucléaire vise à modéliser l'organisation interne du noyau, à la fois dans son état fondamental, mais aussi en décrivant différents états et types d'excitations. De son côté, l'étude des réactions vise à reproduire, par le biais de différents modèles, les phénomènes ayant lieu lors de l'interaction entre un projectile et une cible, que ceux-ci soient des photons, des électrons, des nucléons, des neutrinos ou des entités nucléaires plus complexes. Il faut cependant noter que dans certains cas, cette séparation devient quelque peu floue, tant l'interconnexion entre les deux est forte. Les domaines de la structure et des réactions comportent chacun deux pendants qui se complètent mutuellement : la partie expérimentale qui, notamment grâce aux accélérateurs de particules (neutrons, protons, électrons, ions lourds), permet de mesurer des observables (masse, profil de densité, rayon, probabilités de transitions, ...) et la partie théorique, qui vise à modéliser le noyau afin de recueillir des observables calculées. Il est ainsi possible d'affiner le modèle théorique afin de mieux reproduire les données expérimentales, tout comme il est possible de mener le calcul en amont pour tenter de

prédire les résultats expérimentaux.

Ce travail de thèse traite en grande majorité de l'étude théorique de la structure des noyaux. Pour autant, les données de structure sont fortement couplées à celles de réactions. Malgré l'interdépendance entre les deux domaines, les mécanismes de réactions ne seront pas discutés ici.

Pour comprendre la façon dont le noyau se comporte et la modéliser, on étudie les différentes caractéristiques dues à l'organisation des nucléons qui le composent. Il existe trois grandes familles de modèles :

- les modèles macroscopiques, dans lesquels la phénoménologie est prépondérante,
- les modèles microscopiques où l'interaction entre les nucléons peut être établie de façon phénoménologique mais fixée pour tous les noyaux (champ moyen) ou adaptée au cas par cas selon l'espace de valence (modèle en couches),
- les modèles *ab-initio*, qui partent de l'interaction nue entre nucléons et pour qui la phénoménologie est absente, par définition.

À mesure que les modèles deviennent de plus en plus élaborés, ils gagnent (du moins, ils sont sensés gagner) en pouvoir prédictif. Les modèles visant à reproduire un jeu de données étant en règle générale bons dans l'environnement immédiat des données, la qualité des prédictions, là où les données manquent, se fait au prix d'un accroissement de la complexité du formalisme, et de la durée de calcul.

Aujourd'hui, une partie importante des efforts de la communauté se concentre sur le traitement des noyaux exotiques, noyaux qui possèdent par exemple un nombre de neutrons plus important que leurs isotopes stables. Comprendre leur nature est d'une grande importance : ils mettent à jour une physique constituée des mêmes phénomènes que ceux étudiés dans les noyaux stables mais qui se manifestent dans des proportions très inhabituelles. On peut ainsi révéler de nouveaux phénomènes négligés jusqu'alors ce qui conduit à un enrichissement de nos modèles. Cependant, certains noyaux sont si exotiques qu'ils n'est pas possible de

les atteindre par l'expérience. Dans ce cas, les modèles à faible pouvoir prédictif s'effondrent et perdent en crédibilité. Par ailleurs, malgré l'essor remarquable des calculs *ab-initio* ces dernières années, le coût de calcul associé reste prohibitif pour envisager d'atteindre des noyaux moyennement lourds. Pour toutes ces raisons, cette thèse sera consacrée au traitement théorique de la structure nucléaire par le biais de méthodes microscopiques centrées autour de la QRPA (Quasiparticle Random Phase Approximation).

La QRPA est un des modèles microscopiques phares servant à décrire, dans l'approximation du champ-moyen, les excitations nucléaires de type phonon (vibrations autour de l'état fondamental). Il est possible de traiter des excitations de type électromagnétiques multipolaires. Celles-ci permettent, en travaillant ensuite avec un code de réactions, de remonter aux sections efficaces du noyau, telles que celle de capture neutronique (n, γ) . Avec le formalisme de la QRPA, il est également possible de décrire les transitions avec échange de charge, et donc de modéliser la décroissance β [MPG14], mais ce sujet n'a pas été abordé durant cette thèse. Notons au passage qu'il existe d'autres modèles dérivés de la RPA, tels que la QRPA avec couplage de phonons [CB01], la Seconde RPA [GG16] ou la RPA Relativiste [LRV07]. Aucune de ces méthodes ne sera exposée dans ce manuscrit ³.

Dans ce manuscrit, nous analyserons trois aspects différents du travail de thèse.

Le premier consiste en l'utilisation d'un code de calcul QRPA à symétrie axiale. Il permet de produire des spectres d'excitation, des schémas de niveaux avec les probabilités de transitions associées. Ces données de structure permettent de remonter, en passant par un code de réactions, jusqu'aux sections efficaces. Les niveaux d'énergie et les sections efficaces associées peuvent ensuite être comparées aux observables mesurées lors d'expériences. L'intérêt est double : il est possible d'interpréter les résultats expérimentaux afin d'appuyer une analyse de structure. Il est également possible de mettre à l'épreuve le modèle utilisé en le mettant en défaut, ou en validant la pertinence de notre approche. Cette étape est l'occasion

3. La liste est bien entendu non exhaustive . . .

d'analyser la spectroscopie du noyau à basse énergie (quelques dizaines de MeV), et plus spécifiquement la chaîne isotopique de l'étain ($Z=50$), notamment par le biais d'une collaboration avec une équipe d'expérimentateurs. Une autre étude a été menée sur ces mêmes noyaux, celle-ci traite des paramètres de masse vibrationnels qui revêtent une très grande importance pour le calcul de systématiques de spectroscopie quadripolaire par le Hamiltonien Collectif à 5 Dimensions ou 5DCH (présenté dans la partie 2.4). Une autre étude, en collaboration avec un théoricien spécialisé dans les mécanismes de réactions, a permis l'obtention de sections efficaces de réactions (n, xn) pour l' ^{238}U .

La seconde facette de cette thèse repose sur l'amélioration d'un formalisme de calcul des opérateurs de transitions électromagnétiques multipolaires, ainsi qu'une méthode de généralisation du calcul de ces opérateurs. Cela permet de faciliter la programmation en uniformisant le code pour les différentes multipolarités. Les opérateurs ainsi programmés sont mis à profit dans plusieurs études qui seront présentées.

Finalement, afin de dépasser la contrainte de la symétrie axiale imposée par le code ISAAC, j'ai développé le code de calcul en symétrie triaxiale TAQOS (TriAxial QRPA On Supercomputers). Sa raison d'être est double :

- pouvoir traiter par la méthode QRPA des noyaux dont l'état fondamental est déformé de façon triaxiale,
- permettre de calculer, par le biais de la QRPA, les grandeurs nommées *paramètres de masses vibrationnels* qui sont des paramètres d'entrée du modèle du 5DCH.

Ces deux points seront détaillés plus en profondeur dans ce manuscrit. Les caractéristiques et le développement du code seront présentés dans la suite, suivis des premiers résultats dus à son exploitation.

Chapitre 1

Description du noyau atomique

1.1 Problème à N corps

L'étude du noyau est un problème difficile :

- à N corps, N étant trop grand pour être traité de façon individuelle, trop petit pour être traité de façon statistique,
- quantique,
- fondé sur l'interaction nucléaire forte non connue analytiquement¹.

On cherche malgré tout, en structure nucléaire théorique, à calculer l'une des observables les plus utiles pour les études physiques : l'énergie de liaison E du noyau, obtenue par l'action du hamiltonien du système $\hat{H}$ sur une fonction d'onde Ψ décrivant le noyau. Pour un système donné, l'énergie est fournie par le hamiltonien suivant (avec $\hat{T}$ et $\hat{V}$ les opérateurs d'énergie cinétique et potentielle respective-

1. Malgré les développements récents issus de l'*ab-initio* (Effective Field Theory, Leading Order, Next Leading Order, ...)

ment) :

$$\begin{aligned}
\hat{H} &= \hat{T} + \hat{V} \\
\hat{H} &= -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \hat{V} \\
\hat{H}\Psi &= -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + \hat{V}\Psi = E\Psi.
\end{aligned} \tag{1.1}$$

Dans le cas d'un noyau composé de A nucléons, on écrit

$$\hat{H}_{nucl}\Psi(x_1, \dots, x_A) = \left\{ \sum_{i=1}^A -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{x_i} + \hat{V} \right\} \Psi(x_1, \dots, x_A) = E\Psi(x_1, \dots, x_A). \tag{1.2}$$

x_i est un ensemble de coordonnées décrivant une particule i , par exemple $x_i = (\mathbf{r}_i, s_i, t_i)$, $\mathbf{r}_i$ représentant la position de la particule, s_i son spin, t_i son isospin (proton ou neutron) et $\hat{V}$ est l'opérateur d'énergie potentielle

$$\hat{V} = \underbrace{\sum_{i < j}^A v_{ij}}_{\text{int. à 2 corps}} + \underbrace{\sum_{i < j < k}^A w_{ijk}}_{\text{int. à 3 corps}} + \dots \tag{1.3}$$

Ce dernier sera traité de façon simplifiée, comme expliqué au 1.4.1.1.

1.2 Seconde quantification

Toutes les particules (élémentaires ou non) de notre univers peuvent être classées dans l'une des deux grandes catégories suivantes :

- les bosons, de spin entier,
- les fermions, de spin demi-entier.

Chacune de ces catégories regroupe les particules selon des propriétés bien spécifiques (comme l'impossibilité que deux fermions soient dans un état quantique strictement identique nommée *Principe de Pauli*).

Dans ce paragraphe, on utilise le formalisme de Dirac (notation ‘bra’ $\langle$ | et ‘ket’ $|$ $\rangle$) et on se place dans le cadre de la seconde quantification qui fait intervenir des opérateurs nommés *opérateurs d’échelle*, ou opérateurs de *création* et d’*annihilation*, qui agissent de façon à créer (ou détruire) des particules dans des états donnés. Pour retranscrire les différences de comportement des deux types de particules précédemment mentionnées, on utilisera deux couples d’opérateurs, à savoir b^+ et b respectivement pour les créations et annihilations de bosons, et c^+ et c pour les créations et annihilations de fermions. La valeur n_i étant l’occupation de l’état i par n particules, ces opérateurs agissent comme suit²(n_i ne peut valoir que 0 ou 1 dans le cas des fermions, en vertu du principe de Pauli) :

$$\text{Pour les bosons} \begin{cases} b_i^+ |n_i\rangle = \sqrt{n_i + 1} |n_i + 1\rangle \\ b_i |n_i\rangle = \sqrt{n_i} |n_i - 1\rangle \\ b_i |0_i\rangle = 0 \end{cases} \quad (1.4)$$

$$\text{Pour les fermions} \begin{cases} c_i^+ |0_i\rangle = |1_i\rangle \\ c_i |0_i\rangle = 0 \\ c_i^+ |1_i\rangle = 0 \\ c_i |1_i\rangle = |0_i\rangle \end{cases} \quad (1.5)$$

Ces opérateurs vérifient de plus des relations de commutation remarquables, comme démontré dans l’annexe A.

1.3 Interaction effective de Gogny

L’interaction de Gogny a été développée dans le laboratoire, à Bruyères-le-Châtel, par Jacques Dechargé et Daniel Gogny sous sa forme D1 en 1980 [DG80].

2. Pour les opérateurs associés aux bosons, le coefficient sous forme de racine est une conséquence du fait que l’opérateur $b_i^+ b_i$ soit l’opérateur donnant le nombre de particules dans l’état i noté $\hat{n}_i$: $\langle \dots, n_i, \dots | \hat{n}_i | \dots, n_i, \dots \rangle = \langle \dots, n_i, \dots | b_i^+ b_i | \dots, n_i, \dots \rangle = \langle \dots, n_i - 1, \dots | (\sqrt{n_i})^2 | \dots, n_i - 1, \dots \rangle = n_i$.

L'interaction de Gogny, contrairement à d'autres forces telles que l'interaction de Skyrme, présente la particularité de posséder une portée finie sous forme gaussienne. Cela implique une reproduction plus élaborée de l'interaction entre les nucléons que dans le cas d'une interaction de contact, au prix d'un temps de calcul beaucoup plus important. Voici la forme générale de la force :

$$\begin{aligned}
v_{12} = & \sum_{i=1}^2 e^{-(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2 / \mu_i^2} (W_i + B_i P_\sigma - H_i P_\tau - M_i P_\sigma P_\tau) \\
& + t_3 (1 + x_0 P_\sigma) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \left[\rho \left(\frac{\vec{r}_1 - \vec{r}_2}{2} \right) \right]^\alpha \\
& + i W_{LS} \overleftarrow{\nabla}_{12} \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \times \overrightarrow{\nabla}_{12} \cdot (\vec{\sigma}_1 + \vec{\sigma}_2) \\
& + (1 + 2\tau_{z1})(1 + 2\tau_{z2}) \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}.
\end{aligned} \tag{1.6}$$

On identifie les différents termes, dans l'ordre dans lequel ils apparaissent dans la formule précédente :

- le terme central de portée finie (double portée),
- le terme densité, visant à reproduire l'impact de l'interaction à trois corps,
- le terme spin-orbite,
- le terme coulombien.

Différents jeux de paramètres ont été obtenus au cours du temps et ont permis d'obtenir différentes formes dont les plus connues sont, par ordre d'apparition : D1, suivie de D1S (la plus utilisée), puis D1N, et enfin D1M (la plus récente³). Le tableau 1.1 recense les jeux de paramètres des deux interactions les plus utilisées. Dans les deux cas, le paramètre x_0 est pris égal à 1 et α vaut 1/3. On ne considèrera dans la suite que des méthodes microscopiques faisant intervenir l'interaction effective de Gogny, sous ses paramétrisations D1S ou D1M.

3. Toutes générations confondues, l'interaction de Gogny la plus récente est l'interaction D2[Cha07, CPGB15], mais celle-ci n'est pas encore implémentée dans les codes courants.

	i	μ_i [fm]	W_i [MeV]	B_i [MeV]	H_i [MeV]	M_i [MeV]	t_0 [MeV.fm ^{3($\alpha+1$)}]	W_{LS} [MeV.fm ⁵]
D1S	1	0.7	-1720.3	1300	-1813.6	1397.6	1390.6	130
	2	1.2	103.63	-163.48	162.81	-223.92		
D1M	1	0.5	-12797.57	14048.85	-15144.43	11963.89	1562.22	115.36
	2	1	490.95	-752.27	675.12	-693.57		

TABLE 1.1 – Valeurs des paramètres pour les forces de Gogny D1S et D1M.

1.4 Description de l'état fondamental par des méthodes de champ moyen

Dans la partie suivante, nous traiterons de méthodes de champ moyen parmi les plus répandues qui sont les méthodes de type Hartree-Fock.

1.4.1 Méthode Hartree-Fock (HF)

1.4.1.1 Hypothèses du modèle

Le modèle Hartree-Fock repose sur l'hypothèse que le noyau est formé de particules indépendantes soumises à un potentiel. Un nucléon d'un noyau de masse A subit l'interaction résultant de l'action combinée des $A - 1$ autres nucléons sous forme d'un champ moyen décrit par l'intermédiaire d'une interaction effective, ici une interaction de Gogny. Dans cette optique, on reprend l'équation (1.3) en se limitant au terme à 2 corps que l'on transforme afin de faire apparaître l'expression d'un champ moyen V_i et d'un terme que l'on traitera de manière approchée ou que l'on négligera :

$$\sum_{i < j}^A v_{ij} = \sum_i^A V_i + \left(\sum_{i < j}^A v_{ij} - \sum_i^A V_i \right). \quad (1.7)$$

Postuler que des particules sont indépendantes contraint la fonction d'onde

$\Phi_{12}(x_1, x_2)$ de 2 fermions à s'écrire sous la forme du produit de Hartree :

$$\Phi_{12}(x_1, x_2) = \varphi_1(x_1)\varphi_2(x_2). \quad (1.8)$$

Mais cette égalité ne permet pas de retranscrire la nature fermionique (spin $\frac{1}{2}$) des nucléons au sein du noyau. Pour vérifier à la fois le produit de Hartree et l'antisymétrie des fonctions d'onde décrivant les fermions ($\Psi_{12} = -\Psi_{21}$), on choisit donc de définir la nouvelle fonction d'onde comme suit :

$$\Psi_{12}(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \varphi_1(x_1)\varphi_2(x_2) - \varphi_1(x_2)\varphi_2(x_1) \}. \quad (1.9)$$

Cette forme correspond à un déterminant que l'on nomme déterminant de Slater. On peut aisément la généraliser à un système de A particules :

$$\Psi(x_1, \dots, x_A) = \frac{1}{\sqrt{A!}} \det[\varphi_1 \ \varphi_2 \ \dots \ \varphi_A]. \quad (1.10)$$

La décomposition selon A fonctions d'onde conduit aux égalités suivantes qui présenteront un intérêt explicité par la suite :

$$h\varphi_i = \epsilon_i\varphi_i, \quad (1.11)$$

$$\text{et } E = \sum_{i=1}^A \epsilon_i, \ \forall i \in \llbracket 1, A \rrbracket. \quad (1.12)$$

1.4.1.2 Approche variationnelle

Dans la méthode HF, on suit une démarche de type variationnelle qui consiste à approcher l'état fondamental en cherchant à annuler la dérivée fonctionnelle de l'énergie (et en s'assurant que l'extremum est bien le minimum). En notation de Dirac, l'équation de Schrödinger ne dépendant pas du temps s'écrit, pour un état

Ψ_E :

$$\hat{H}|\Psi_E\rangle = E|\Psi_E\rangle. \quad (1.13)$$

On prend maintenant une fonction test Ψ pour laquelle le principe variationnel s'exprime sous la forme :

$$\delta E[\Psi] = 0 \quad (1.14)$$

$$\text{avec } E[\Psi] = \frac{\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}. \quad (1.15)$$

On obtient une énergie approchée $E[\Psi]$ telle que $E[\Psi] \geq E_0$, où E_0 est l'énergie du fondamental (Démonstration dans l'annexe B).⁴

1.4.1.3 Calcul Hartree-Fock

Comme évoqué précédemment, le calcul HF prend pour point de départ la minimisation de l'énergie appliquée aux A particules du noyau, supposées indépendantes. Afin d'éviter l'apparition d'une divergence dans le calcul, il convient de redéfinir l'énergie en contraignant les fonctions d'onde à conserver leur norme $\langle \varphi_i | \varphi_i \rangle = 1$. Pour cela, on utilise les multiplicateurs de Lagrange

$$F = E - \sum_{i=1}^A \epsilon_i (\langle \varphi_i | \varphi_i \rangle - 1), \quad (1.16)$$

ce qui permet de réécrire l'équation (1.15) sous une autre forme :

$$\frac{\delta F}{\delta \varphi_i^*} = 0, \quad \forall i \in \llbracket 1, A \rrbracket. \quad (1.17)$$

4. Dans le cas où le potentiel dépend de la densité ρ , l'approche par valeurs supérieures n'est pas rigoureusement vérifiée.

Après une mise en forme non développée ici, les équations HF s'écrivent :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\varphi_i(\mathbf{r}) + U_H(\mathbf{r})\varphi_i(\mathbf{r}) + \int d\mathbf{r}' U_F(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\varphi_i(\mathbf{r}') = \epsilon_i\varphi_i(\mathbf{r}), \quad \forall i \in \llbracket 1, A \rrbracket. \quad (1.18)$$

Les champs U_H et U_F sont respectivement nommés *champ de Hartree* (ou terme direct) et *champ de Fock* (ou terme d'échange) et ont pour expression :

$$U_H(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{r}' \sum_{j=1}^A \varphi_j^*(\mathbf{r}') v(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \varphi_j(\mathbf{r}'), \quad (1.19)$$

$$\text{et } U_F(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{j=1}^A \varphi_j^*(\mathbf{r}') v(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \varphi_j(\mathbf{r}). \quad (1.20)$$

On obtient un système de A équations qui présentent la particularité d'être couplées. En effet, les termes de champs U_H et U_F dépendent eux-mêmes des fonctions d'onde à une particule φ_i . Pour résoudre ces équations, il faudrait déjà connaître la solution ! On procède donc de manière itérative en postulant une solution (fonction test) et en l'injectant dans le système, comme illustré par le dessin humoristique de Jacques Dechargé (figure 1-1).

Il est utile pour la suite d'introduire la matrice de densité à un corps définie comme suit :

$$\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{j=1}^A \varphi_j^*(\mathbf{r}') \varphi_j(\mathbf{r}). \quad (1.21)$$

On peut établir une analogie avec la densité au sens classique du terme dans le cas où $\mathbf{r}' = \mathbf{r}$, ρ s'écrit alors :

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{j=1}^A \varphi_j^*(\mathbf{r}) \varphi_j(\mathbf{r}). \quad (1.22)$$

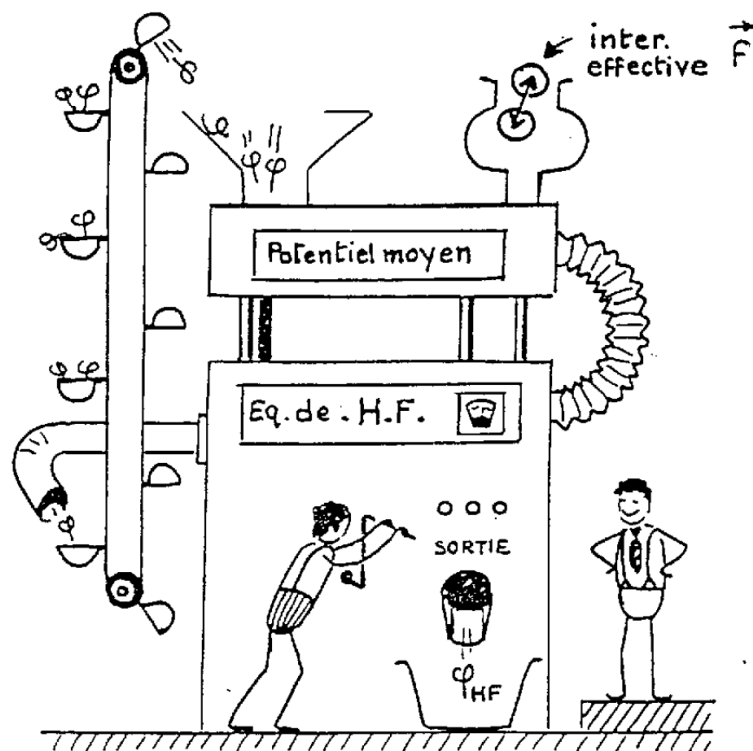


FIGURE 1-1 – La machine Hartree-Fock, dessin de J. DECHARGÉ [Ber91].

Ces relations s'écrivent dans le cadre de la seconde quantification :

$$\rho_{ij} = \langle \Psi | c_j^\dagger c_i | \Psi \rangle, \quad (1.23)$$

$$\text{et } \rho_i = \langle \Psi | c_i^\dagger c_i | \Psi \rangle. \quad (1.24)$$

La matrice densité est diagonale dans la base des états propres du hamiltonien HF, elle possède les mêmes vecteurs propres que le hamiltonien HF, donc les deux opérateurs commutent et on peut alors réécrire les équations HF de façon synthétique

$$[H_{HF}, \rho] = 0. \quad (1.25)$$

On pourra remarquer également que

$$\text{Tr}(\rho) = \sum_{i=1}^A \rho_i = \sum_{i=1}^A \langle \Psi | c_i^\dagger c_i | \Psi \rangle = \sum_{i=1}^A \langle \Psi | \hat{n}_i | \Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{N} | \Psi \rangle, \quad (1.26)$$

et donc finalement, on a

$$\text{Tr}(\rho) = A. \quad (1.27)$$

Ceci n'est qu'un exemple des propriétés de cette matrice densité, qui est très largement utilisée dans les expressions mathématiques manipulées en structure nucléaire.

Malheureusement, la méthode HF présente quelques faiblesses qu'il faut garder à l'esprit. Les noyaux pouvant être traités sont exclusivement les noyaux ayant un nombre de nucléons $A \geq 16$, voire $A \geq 40$ pour obtenir de bons résultats. Ces résultats sont d'autant meilleurs si le noyau possède une structure proche d'un noyau pair-pair doublement magique. Ces considérations établies, la méthode HF est un outil relativement simple (étant donné la difficulté intrinsèque du système ...) qui permet d'obtenir des informations sur un noyau, au prix d'approximations pouvant

montrer assez rapidement leur limite, notamment l'absence de certaines corrélations au sein du noyau qui entraîne une mauvaise convergence lorsque le noyau est à couche ouverte.

1.4.2 Méthode Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB)

La figure 1-2 illustre l'évolution de l'énergie de liaison par nucléon ($\frac{E_{\text{liaison}}}{A}$) dans la chaîne isotopique de l'étain. En plus des effets donnant à l'ensemble un aspect bombé (évolution de N-Z), avec un ventre dont le maximum correspond au maximum de stabilité, on observe des oscillations autour de cette tendance globale. On retrouve alternativement les noyaux pairs au-dessus de la tendance - donc plus stables que la moyenne - et les noyaux impairs, situés en-dessous - donc moins stables.

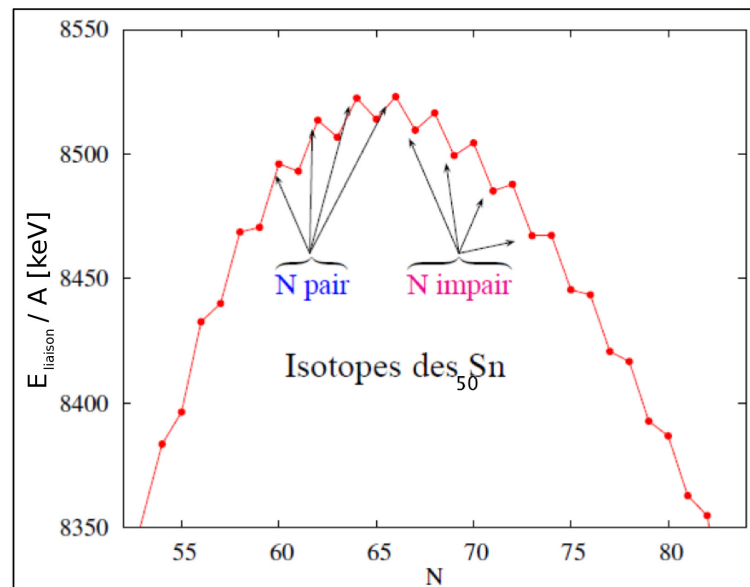


FIGURE 1-2 – Effet de l'appariement dans la chaîne isotopique de l'étain [Ben12].

Ce phénomène (confirmé par l'expérience) est lié à l'énergie de liaison de paire au sein du noyau qui est fortement diminuée pour les noyaux impairs. Il est par conséquent possible d'enrichir le modèle HF en ajoutant ces corrélations dans le calcul de l'énergie de liaison et donc dans le potentiel.

1.4.2.1 Opérateurs de quasiparticules

En partant du constat établi ci-dessus, on incorpore dans la méthode Hartree-Fock la gestion des effets de paires dans le noyau au travers le concept de quasiparticules de Bogoliubov dont les opérateurs de création et d'annihilation sont définis à partir des opérateurs attachés aux particules :

$$\begin{cases} \eta_i^+ = \sum_{\alpha} u_{i\alpha} c_{\alpha}^+ + v_{i\alpha} c_{\alpha} \\ \eta_i = \sum_{\alpha} u_{i\alpha}^* c_{\alpha} + v_{i\alpha}^* c_{\alpha}^+ \end{cases} \quad (1.28)$$

On peut noter que :

- les coefficients $u_{i\alpha}$ et $v_{i\alpha}$ sont normés, si bien que l'on a : $\sum_{\alpha} u_{i\alpha}^2 + v_{i\alpha}^2 = 1$,
- à la limite, pour un état vide - *état de particule* - on a $u_{i\alpha} = 1$ et $v_{i\alpha} = 0$, et inversement, pour un état occupé - *état de trou* - on a $u_{i\alpha} = 0$ et $v_{i\alpha} = 1$,
- $v_{i\alpha}$ étant le facteur d'occupation de l'état α , on a $\sum_{i,\alpha} v_{i\alpha}^2 = \langle \hat{N} \rangle$.

De façon analogue aux particules, les quasiparticules vérifient les relations suivantes (en notant le vide de quasiparticules, également nommé *vide HFB*, $|HFB\rangle$) :

$$\text{Pour les quasiparticules} \begin{cases} \eta_i^+ |HFB\rangle = |1_i\rangle \\ \eta_i |HFB\rangle = 0 \\ \eta_i^+ |1_i\rangle = 0 \\ \eta_i |1_i\rangle = |HFB\rangle \end{cases} \quad (1.29)$$

Il est possible de démontrer que ces opérateurs respectent bien les règles de commutation des opérateurs fermioniques :

i) si $i \neq j$

$$\{\eta_i, \eta_j^+\} = \eta_i \eta_j^+ + \eta_j^+ \eta_i.$$

On remarque sans aucun calcul que si l'on applique à droite un état pour lequel i est vide et/ou j est occupé, on trouve une valeur nulle. On ne se penchera donc que sur le cas i occupé et j vide :

$$\begin{aligned}
 \eta_i \eta_j^+ |i\rangle + \eta_j^+ \eta_i |i\rangle &= \eta_i |j\ i\rangle + \eta_j^+ |-\rangle \\
 &= -\eta_i |i\ j\rangle + |j\rangle \\
 &= -|j\rangle + |j\rangle \\
 &= 0.
 \end{aligned}$$

Quelles que soient les occupations de i et de j , on a

$$\{\eta_i, \eta_j^+\} = 0 \quad \text{pour } i \neq j.$$

ii) si $i = j$

$$\begin{aligned}
 \{\eta_i^+, \eta_i\} |i\rangle &= (\eta_i^+ \eta_i + \eta_i \eta_i^+) |i\rangle = \eta_i^+ \eta_i |i\rangle + \eta_i \eta_i^+ |i\rangle \\
 &= \eta_i^+ |-\rangle \\
 &= |i\rangle.
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \{\eta_i^+, \eta_i\} |-\rangle &= (\eta_i^+ \eta_i + \eta_i \eta_i^+) |-\rangle = \eta_i^+ \eta_i |-\rangle + \eta_i \eta_i^+ |-\rangle \\
 &= \eta_i |i\rangle \\
 &= |-\rangle.
 \end{aligned}$$

On conclut des deux cas précédents l'égalité suivante :

$$\{\eta_i, \eta_j^+\} = \delta_{ij}. \tag{1.30}$$

Relation de fermeture

On peut également redémontrer la relation de fermeture usuelle en partant de

l'opérateur suivant que l'on fait agir sur un état $|i\rangle$ de la base des quasiparticules :

$$\hat{A} = \sum_k |k\rangle\langle k|$$

$$\begin{cases} \hat{A}|i\rangle = (\sum_k |k\rangle\langle k|) |i\rangle = \sum_k |k\rangle\langle k|i\rangle = \sum_k |k\rangle\delta_{ik} = |i\rangle \\ \langle i|\hat{A} = \langle i| (\sum_k |k\rangle\langle k|) = \sum_k \langle i|k\rangle\langle k| = \sum_k \delta_{ik}\langle k| = \langle i| \end{cases}$$

$$\hat{A} = \sum_k |k\rangle\langle k| = \mathbb{1}.$$

En appliquant l'opérateur $\eta_{k'}$ à gauche, on obtient

$$\begin{aligned} \sum_k \eta_{k'} |k\rangle\langle k| &= \eta_{k'} \\ \sum_k \delta_{kk'} |-\rangle\langle k| &= \eta_{k'} \\ |-\rangle\langle k'| &= \eta_{k'}. \end{aligned} \tag{1.31}$$

En appliquant cette fois-ci l'opérateur $\eta_{k'}^+$ à droite, on obtient

$$\begin{aligned} \sum_k |k\rangle\langle k| \eta_{k'}^+ &= \eta_{k'}^+ \\ \sum_k \delta_{kk'} |k\rangle\langle -| &= \eta_{k'}^+ \\ |k'\rangle\langle -| &= \eta_{k'}^+. \end{aligned} \tag{1.32}$$

Lorsque l'on multiplie (1.31) à gauche par (1.32), on obtient

$$\begin{aligned} |k'\rangle\langle -|-\rangle\langle k'| &= \eta_{k'}^+ \eta_{k'} \\ |k'\rangle\langle k'| &= \eta_{k'}^+ \eta_{k'}. \end{aligned}$$

Ce qui conduit, en sommant sur tous les k , à la relation de fermeture suivante :

$$\sum_k \eta_k^+ \eta_k = \mathbb{1}. \quad (1.33)$$

L'arrivée dans le monde quantique nous confronte rapidement à la notion de superpositions d'états à la place d'états uniques bien définis. Ici, on utilise de façon analogue la dualité particule/trou à la place de particules. Cependant, l'introduction de ce concept produit un effet indésirable : la non-conservation du nombre de particules. Ce problème peut être en partie solutionné en utilisant des multiplicateurs de Lagrange pour contraindre le système quant à son nombre moyen de neutrons et son nombre de protons.

1.4.2.2 Résolution de l'équation HFB

Le calcul HFB repose sur le même principe que celui mené en HF, avec toutefois l'ajout de termes dus aux effets de paires. En plus de la matrice densité à un corps ρ définie lors du calcul HF, il est maintenant nécessaire de définir le *tenseur d'appariement* (ou *densité anormale*) κ . On a, de façon analogue à la formule (1.23) :

$$\kappa_{ij} = \langle \Psi | c_j c_i | \Psi \rangle. \quad (1.34)$$

Il est également utile de définir la matrice densité généralisée R qui prend en compte ρ et κ

$$R = \begin{pmatrix} \rho & \kappa \\ -\kappa^* & 1 - \rho^* \end{pmatrix}, \quad (1.35)$$

et dont les vecteurs propres sont les coefficients $\begin{pmatrix} u_i \\ v_i \end{pmatrix}$ définissant la transformation unitaire de Bogoliubov [P11].

Pour obtenir l'énergie de liaison dans le nouveau formalisme - l'*énergie HFB* - en prenant en compte le champ d'appariement Δ , on doit écrire l'équation HFB matricielle suivante :

$$H_{HFB} \begin{pmatrix} u_i \\ v_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} h & \Delta \\ -\Delta^* & -h^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_i \\ v_i \end{pmatrix} = E_i \begin{pmatrix} u_i \\ v_i \end{pmatrix}. \quad (1.36)$$

Cette équation fait apparaître le terme E_i - l'énergie de quasiparticule - comme valeur propre. Étant donné que les coefficients $\begin{pmatrix} u_i \\ v_i \end{pmatrix}$ sont les vecteurs propres du hamiltonien HFB en plus d'être ceux de R , on peut exprimer de façon synthétique les équations HFB, en s'inspirant de l'équation (1.25) pour HF :

$$[H_{HFB}, R] = 0. \quad (1.37)$$

Afin de résoudre le système, il convient de diagonaliser H_{HFB} . Dans la base où H_{HFB} est diagonale, on a forcément R diagonale, puisque ces deux matrices partagent les mêmes vecteurs propres. Cette diagonalisation permet de construire la matrice R , qui elle-même permet à son tour de construire une nouvelle version de H_{HFB} . Ici aussi, le calcul est itératif.

Malheureusement, bien que le modèle HFB apporte une valeur ajoutée incontestable en traitant de manière plus élaborée les corrélations au sein du noyau, il présente, entre autres, l'inconvénient de ne pouvoir traiter, sans ajout de contraintes supplémentaires, que les noyaux pairs-pairs⁵. Nous nous accommoderons de cette limitation en ne traitant que des noyaux répondant à ce critère et nous choisirons les résultats de calculs HFB comme base pour la suite de notre travail.

5. Des techniques que l'on ne développera pas ici, comme le *blocking*, permettent toutefois d'envisager l'étude de noyaux impairs.

1.4.3 Oscillateur Harmonique (OH)

Les codes développés dans le laboratoire de Physique Nucléaire du CEA - DAM utilisent pour la plupart une base d'états générés par les états propres de l'OH. On présente ici ces bases en fonction des symétries spatiales brisées par le calcul. Les états quantiques peuvent alors s'exprimer en fonction de polynômes particuliers, à savoir les polynômes de Laguerre généralisés et les polynômes de Hermite, qui sont des polynômes orthogonaux.

Suivant les symétries imposées, on a

- sphérique : un produit de polynôme de Laguerre et d'harmoniques sphériques,
- axial : un produit d'un polynôme de Laguerre pour la partie angulaire et d'un polynôme de Hermite pour la partie axiale,
- triaxial : un produit de trois polynômes de Hermite selon les trois directions de l'espace.

Le cas sphérique ne sera pas traité dans ce manuscrit.

1.4.3.1 OH en coordonnées cylindriques

Dans le cas de noyaux présentant une symétrie axiale, on scinde le système en deux parties indépendantes :

- la partie axiale, caractérisée par la coordonnée z et qui constitue un sous-espace de dimension 1,
- la partie angulaire, qui constitue les deux dimensions spatiales restantes.

En nous appuyant sur la figure 1-3, nous pouvons donner les coordonnées utiles au cas axial :

$$\begin{cases} \phi, \\ r_{\perp} = r \sin\theta, \\ z = r \cos\theta. \end{cases} \quad (1.38)$$

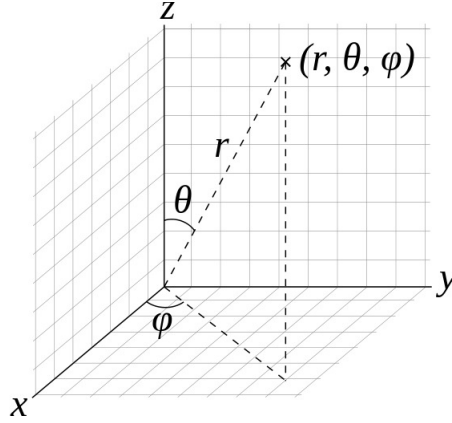


FIGURE 1-3 – Représentation des différents types de coordonnées dans l'espace.

Il est ensuite aisé de retrouver l'intégralité du système (et donc les 3 dimensions) en effectuant un produit des deux parties.

Base de l'OH à 1D Ici l'axe z est l'axe de symétrie. Un état s'écrit en fonction des polynômes de Hermite avec le nombre quantique n_z , $z = r \cos \theta$ et α , le paramètre de l'oscillateur 1D :

$$|n_z\rangle \equiv \sqrt[4]{\frac{\alpha}{\pi}} \sqrt{\frac{1}{2^{n_z} n_z!}} e^{-\frac{\alpha z^2}{2}} H_{n_z}(z\sqrt{\alpha}). \quad (1.39)$$

Il est utile pour la suite de rappeler une des propriétés de récurrence des polynômes de Hermite (en posant $x = z\sqrt{\alpha}$) :

$$x H_{n_z}(x) = \frac{1}{2} H_{n_z+1}(x) + n_z H_{n_z}(x). \quad (1.40)$$

Base de l'OH à 2D Pour les 2 dimensions restantes, on écrit l'état considéré en fonction des polynômes de Laguerre avec les nombres quantiques $n_\perp$ et m , $r_\perp = r \sin \theta$ et β , le paramètre de l'oscillateur 2D⁶ :

$$|n_\perp, m\rangle \equiv \sqrt{\frac{\beta}{\pi}} \sqrt{\frac{n_\perp!}{(n_\perp + |m|)!}} e^{-\frac{\beta r_\perp^2}{2}} (\sqrt{\beta} r_\perp)^{|m|} L_{n_\perp}^{|m|}(\beta r_\perp^2) e^{im\phi}. \quad (1.41)$$

6. Il ne faut pas confondre ce paramètre avec celui de la déformation axiale.

On connaît les formules de récurrence suivantes pour les polynômes de Laguerre (en posant $y = \sqrt{\beta}r_{\perp}$) :

$$yL_{n_{\perp}}^{|m|}(y) = (n_{\perp} + |m|)L_{n_{\perp}}^{|m|-1}(y) - (n_{\perp} + 1)L_{n_{\perp}+1}^{|m|-1}(y), \quad (1.42)$$

$$\text{et } L_{n_{\perp}}^{|m|}(y) = L_{n_{\perp}}^{|m|+1}(y) - L_{n_{\perp}-1}^{|m|+1}(y). \quad (1.43)$$

Recomposition des 3 dimensions Une base orthonormale permettant de décrire l'état d'une particule dans un espace euclidien à 3 dimensions peut être définie en considérant l'ensemble des vecteurs définis par le produit tensoriel des deux kets présentés dans les paragraphes précédents :

$$|n_{\perp}, m, n_z\rangle = |n_z\rangle \otimes |n_{\perp}, m\rangle \text{ avec } (n_z, n_{\perp}) \in \mathbb{N}^2 \text{ et } m \in \mathbb{Z}. \quad (1.44)$$

Ce produit est possible car les deux parties de l'oscillateur sont totalement indépendantes.

1.4.3.2 OH en coordonnées cartésiennes

Toujours d'après la figure 1-3, on peut établir

$$\begin{cases} x = r \sin\theta \cos\varphi, \\ y = r \sin\theta \sin\varphi, \\ z = r \cos\theta. \end{cases} \quad (1.45)$$

Pour l'OH à trois dimensions, on considère trois oscillateurs unidimensionnels indépendants, correspondant aux trois axes du noyau. Les formules sont analogues à celles présentées dans la partie 1.4.3.1. Toutefois, il existe une subtilité dans la reconstruction des trois dimensions, ce que nous verrons plus loin, dans la partie 4.1.1.1.

1.4.3.3 Passage en base finie

Les considérations établies précédemment reposent sur la base des états de l'OH qui est, dans l'absolu, infinie. Malheureusement, pour nos calculs, il est nécessaire de se limiter à une base finie. Le choix de la taille de la base N_0 est d'autant plus crucial qu'il contraint le système sur le nombre d'états possibles par le biais de l'inégalité suivante pour le cas axial

$$2n_{\perp} + |m| + n_z \leq N_0, \quad (1.46)$$

et pour le cas triaxial

$$n_x + n_y + n_z \leq N_0. \quad (1.47)$$

On remarque que les valeurs possibles pour les nombres quantiques $n_{\perp}$, m et n_z ou n_x , n_y et n_z est limité. Typiquement, on mène les calculs avec des tailles de base allant de 8 à 16, selon le nombre A de nucléons du noyau et selon le degré de précision recherché (le calcul résultant d'une base de taille n est sensé être de meilleure qualité que celui issu d'une base de taille $n - 2$ puisque plus d'états sont accessibles, au prix d'un temps de calcul bien plus important). La liste des états accessibles pour des bases axiales de tailles $N_0 = 1$ et $N_0 = 2$ sont regroupées dans le tableau 1.2.

Le choix de la taille de la base ne se fait pas au hasard. Il dépend tout d'abord du nombre de nucléons dans le noyau mais aussi du temps de calcul que l'on vise. Par exemple, pour un noyau relativement léger, comme l' ^{22}O , on peut se contenter d'une base de taille $N_0 = 8$ (9 couches majeures), qui donne de bons résultats et qui est assez rapide⁷. En revanche, pour des noyaux plus gros, tels que des étains, au centre de deux études de cette thèse, il a été nécessaire d'étudier le problème

7. Pour un calcul QRPA, qui sera le sujet de la partie 2, cela représente quelques heures en utilisant plusieurs centaines de cœurs sur un supercalculateur.

Taille de la base	$n_{\perp}$	m	n_z
1	0	0	0
	0	0	1
	0	± 1	0
2	0	0	0
	0	0	1
	0	0	2
	0	± 1	0
	0	± 2	0
	0	± 1	1
	1	0	0
...	...	...	...

TABLE 1.2 – États quantiques accessibles selon la taille de la base en symétrie axiale.

avant de lancer un calcul. C'est pour cette raison qu'avant d'exploiter le code, une étude de convergence selon la taille de la base a été menée.

La figure 1-4 présente l'une des analyses réalisées sur la chaîne isotopique des étains. En abscisse, on retrouve les différentes tailles de base, de la base 8 à la base 16. On note immédiatement le comportement asymptotique de l'énergie de liaison selon la taille de la base, avec une approche par valeurs supérieures, comme l'affirme le principe variationnel. L'augmentation de la taille de la base induit également une convergence pour l'énergie d'appariement, mais on remarque un décrochement pour la base 8, le phénomène de convergence n'étant pas encore amorcé. On peut d'ores et déjà rejeter les bases de taille inférieure ou égale à 8. L'étude des potentiels chimiques protons et neutrons ne fait pas apparaître d'influence notable du fait de la taille de la base. Les fluctuations n'apparaissent qu'à des ordres de grandeurs totalement négligeables, très inférieurs au MeV.

1.4.4 Expression de HFB dans une base d'OH

Pour la suite, il est utile d'écrire les relations entre les opérateurs de création et d'annihilation des 2 bases.

On part de la forme matricielle de l'équation reliant les opérateurs de création et d'annihilation des quasiparticules de Bogoliubov aux opérateurs de création et

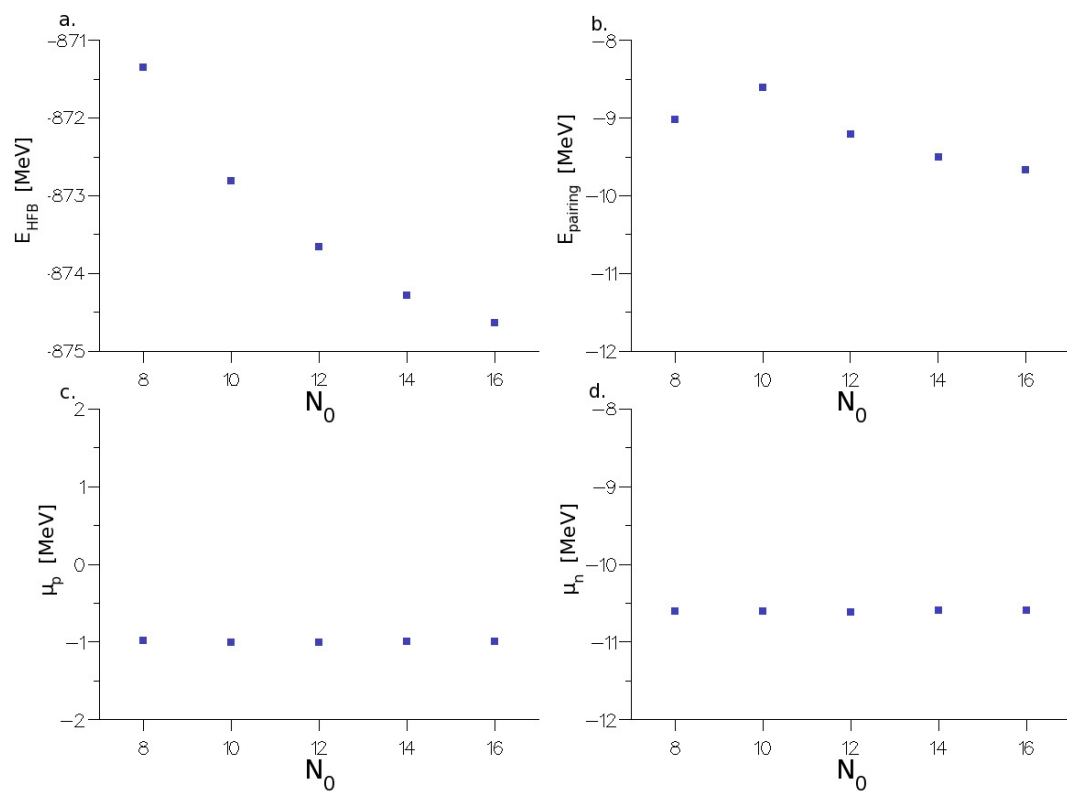


FIGURE 1-4 – Évolution de (a) l'énergie HFB, (b) l'énergie d'appariement, (c) du potentiel chimique protons et (d) du potentiel chimique neutrons selon la taille de la base pour le ^{104}Sn .

d'annihilation des particules :

$$\begin{pmatrix} \eta_i^+ \\ \eta_i \end{pmatrix} = B \begin{pmatrix} c_\alpha^+ \\ c_\alpha \end{pmatrix}, \text{ avec } B = \begin{pmatrix} u_{i\alpha} & v_{i\alpha} \\ \bar{v}_{i\alpha} & \bar{u}_{i\alpha} \end{pmatrix}.$$

La matrice B étant orthogonale, le système est aisément inversible grâce à la relation :

$$B^{-1} = {}^tB = \begin{pmatrix} u_{i\alpha} & \bar{v}_{i\alpha} \\ v_{i\alpha} & \bar{u}_{i\alpha} \end{pmatrix},$$

ce qui permet d'exprimer les opérateurs c_α^+ et c_α en fonction des opérateurs η_i^+ et η_i :

$$\begin{pmatrix} c_\alpha^+ \\ c_\alpha \end{pmatrix} = B^{-1} \begin{pmatrix} \eta_i^+ \\ \eta_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{i\alpha} & \bar{v}_{i\alpha} \\ v_{i\alpha} & \bar{u}_{i\alpha} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \eta_i^+ \\ \eta_i \end{pmatrix}. \quad (1.48)$$

1.4.5 Déformation, spin et parité

1.4.5.1 Déformation statique

Contrairement à la représentation picturale usuelle, les noyaux ne sont pas des framboises bicolores. Ils ne sont pas non plus tous parfaitement sphériques et compacts comme des billes. Si certains sont effectivement sphériques, d'autres peuvent également adopter des formes particulières, tel qu'illustré sur la figure 1-5 lorsque la symétrie axiale est conservée.

La figure 1-5.(a) correspond à un noyau de forme *prolate*, une sorte de ballon de rugby⁸, alors que la figure 1-5.(b) correspond à une forme *oblate*, une sorte de soucoupe volante⁹. Il existe une infinité de formes intermédiaires autres que *prolate* et *oblate* qui correspondent à des noyaux *triaxiaux*. Dans ce dernier cas, les trois

8. En termes mathématiques, il s'agit d'une ellipsoïde de révolution avec $a = b \neq c$ et $c > a$.

9. En termes mathématiques, il s'agit d'une ellipsoïde de révolution avec $a = b \neq c$ et $c < a$.

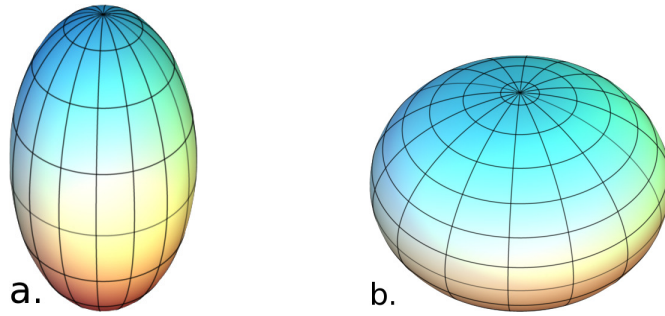


FIGURE 1-5 – Représentation de noyaux (a) prolates et (b) oblates.

axes de l'ellipsoïde ont des valeurs différentes et la symétrie axiale est brisée.

Dans le cas axisymétrique, la coordonnée β traduit l'intensité de la déformation par rapport à la forme de référence, à savoir la forme sphérique, obtenue en $\beta = 0$. Les noyaux prolates sont alors caractérisés par une valeur de $\beta > 0$, d'autant plus grande que la forme prolate est marquée. Pour les oblates, $\beta < 0$, les grandes déformations correspondent à des β très petits (grands en valeur absolue).

1.4.5.2 Spin et parité

Deux des caractéristiques essentielles utilisées par la suite pour décrire un état donné du noyau sont d'une part son spin total J et d'autre part sa parité Π , que l'on note de manière condensée J^Π . On les définit à partir des spins des nucléons composant le noyau. Pour les noyaux pairs-pairs (ayant un nombre pair de neutrons et de protons), le spin de l'état fondamental est toujours égal à 0^+ . Pour les noyaux pairs-impairs (nombre pair de neutrons et impair de protons ou le contraire), le spin résultant est égal au spin du dernier nucléon, il dépend donc en particulier de la couche dans laquelle se trouve ce nucléon. Par exemple, le nucléon célibataire du ^{13}C est situé sur la couche $p_{\frac{1}{2}}$. Comme $\Pi = (-1)^l$ (avec $l = 1$ pour une couche p), le spin et la parité de cet isotope dans l'état fondamental seront donc $J^\Pi = \frac{1}{2}^-$. Déterminer le spin des noyaux impairs-impairs est plus compliqué, mais aucun noyau de ce type ne sera étudié ici. Lorsque la symétrie axiale est conservée, nous

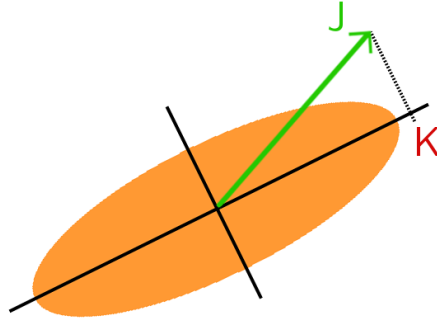


FIGURE 1-6 – Projection de J dans le repère du noyau.

utiliserons également la grandeur K qui n'est autre que la projection de J sur l'axe de symétrie du noyau, comme l'illustre la figure 1-6.

1.5 Excitations nucléaires

Dans les noyaux, on peut observer des excitations individuelles, par exemple une particule qui saute de la couche d'énergie qu'elle occupe dans l'état fondamental vers une couche libre située à une énergie plus élevée. L'énergie d'excitation est, dans le cas des noyaux pairs-pairs, de l'ordre du MeV. On peut également observer des excitations de basse et de haute énergie, comme certaines excitations collectives, correspondant alors à un mouvement d'ensemble de plusieurs nucléons au sein du noyau. Ces excitations collectives peuvent être considérées comme des excitations de type bosons (comme les phonons ou les plasmons dans d'autres domaines de la physique).

1.5.1 Description théorique des excitations nucléaires

1.5.1.1 Rotation du noyau

En mécanique quantique, la rotation n'a de sens que si le système s'en retrouve changé. Si le noyau possède un axe de symétrie, il est invariant par rotation autour de cet axe. Et en particulier, pour un noyau sphérique, c'est à dire avec une infinité

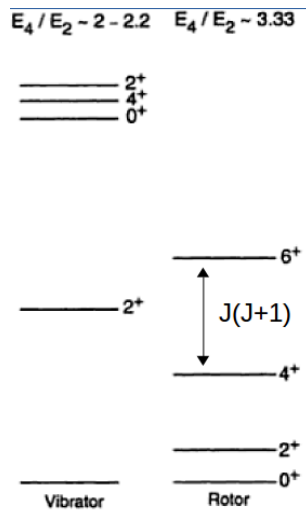


FIGURE 1-7 – Evolution schématique de bandes d'énergies de vibration et de rotation [Cas90].

d'axes de rotation, le noyau est invariant par toute rotation. En revanche, un noyau déformé présente des niveaux d'excitations caractéristiques (cf. figure 1-7) correspondant à des rotations autour d'axes qui ne sont pas des axes de symétrie. La rotation du noyau ne sera pas traitée dans ce mémoire.

Il est ainsi possible, lorsque le spectre n'est pas trop congestionné, de détecter la présence d'une rotation par la fréquence propre des états, et donc d'affirmer que le noyau est déformé. Cela se traduit par l'apparition d'une *bande rotationnelle* pour laquelle la différence d'énergie entre les niveaux J et $J + 2$ augmente de façon quadratique, comme illustré à droite sur la figure 1-7.

1.5.1.2 Déformation dynamique (vibration) du noyau

Les noyaux vibrent autour d'une forme d'équilibre, qu'elle soit sphérique ou déjà déformée. Comme on le voit sur la figure 1-8, dans le cas de noyaux ayant déjà une forme particulière dans l'état fondamental, par exemple prolate. Ici sont représentés deux types de vibrations :

- β -vibration, le noyau est alternativement plus ou moins prolate, il peut éven-

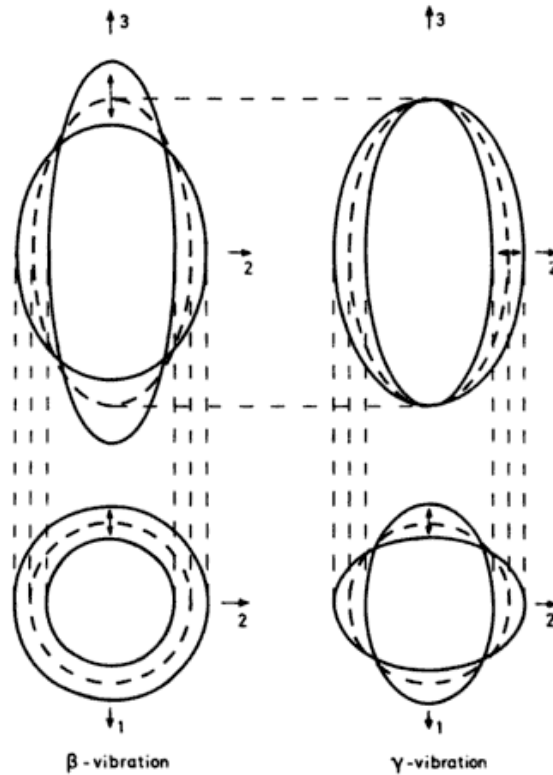


FIGURE 1-8 – Représentation de la β -vibration et de la γ -vibration dans un noyau symétrique autour de l'axe 3 par des coupes dans le plan 2-3 (en haut) et 1-2 (en bas) [RS80].

tuellement devenir oblate en passant par une forme sphérique, il reste toujours axisymétrique

— γ -vibration, le noyau initialement prolate passe à une forme triaxiale - donc non axisymétrique.

Ces deux types de vibrations, regroupées sous l'appellation de *vibrations quadrupolaires* correspondent à un ordre de multipolarité $\lambda = 2$. Il existe également des vibrations *monopolaires* ($\lambda = 0$), *dipolaires* ($\lambda = 1$), *octupolaires* ($\lambda = 3$), *hexadécapolaires* ($\lambda = 4$), etc ... Une représentation schématique de chacun de ces ordres est présentée sur la figure 1-9. Ces vibrations peuvent être mises en évidence grâce à leur schéma spectroscopique caractéristique, avec un espace régulier entre les niveaux d'énergie successifs, comme présenté à gauche sur la figure 1-7.

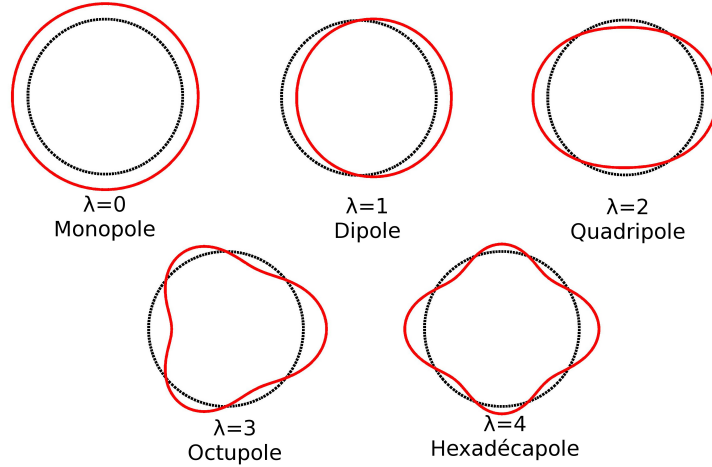


FIGURE 1-9 – Premiers ordres de vibrations multipolaires (Illustrations reproduites avec l’aimable autorisation de J.P.EBRAN).

Il convient de préciser que ces vibrations existent sous deux formes :

- isoscalaire, les protons et les neutrons se déplacent en phase,
- isovectorielle, les protons et les neutrons se déplacent en opposition de phase.

Cependant, la réponse dipolaire isoscalaire présente une particularité : la présence d’un état hors du spectre d’excitation correspondant à un déplacement de concert des protons et des neutrons dans une direction donnée, menant à un déplacement global de matière sans limite puisque sans force de rappel. Cette translation globale du noyau n’existe pas en mécanique quantique, puisque indissociable de l’état d’origine, tout comme la rotation d’une sphère mentionnée plus haut. Et il conviendra de retirer un tel état, dit spurieux, du spectre calculé.

1.5.2 Quasiparticle Random Phase Approximation

En partant de la méthode HFB présentée dans la partie 1.4.2, il semblerait judicieux d’utiliser sa version dynamique, à savoir la méthode TDHFB (Time-Dependent HFB ou HFB dépendant du temps). Toutefois, à cause notamment d’un coût calculatoire trop important, nous utilisons une méthode dérivée issue d’une linéarisation des équations HFB qui se nomme Quasiparticle Random Phase

Approximation ou QRPA.

1.5.2.1 Présentation de la QRPA

La méthode QRPA est une méthode analogue à la RPA (cf. [RS80] chap.8) intégrant le concept de quasiparticules. Elle permet de suivre un raisonnement auto-cohérent si elle prend pour point de départ les résultats d'un calcul HFB et en respectant les mêmes conditions de calcul (interaction, base, ...). On l'utilise lorsque l'on s'intéresse à la physique des basses et des hautes énergies en faisant l'hypothèse d'harmonicité. Cette dernière suppose que la réponse du noyau aux excitations suit une loi harmonique. On considère dans un premier temps uniquement les excitations de faible oscillation autour de l'état fondamental, puis on détermine l'ensemble des niveaux d'excitations par une extrapolation harmonique (conséquence de la linéarisation des équations TDHFB). Il faut toutefois bien noter que l'hypothèse repose sur les faibles amplitudes, et pas les faibles énergies, nous pourrions alors accéder aux réponses géantes du noyau situées au-delà de 10 MeV.

En QRPA, on utilise un nouveau couple d'opérateurs, nommés *opérateurs de quasi-bosons*, et dont l'opérateur de création est défini comme suit (l'opérateur d'annihilation étant son conjugué complexe) :

$$\theta_n^+ = \sum_{i,j} X_{ij}^n \eta_i^+ \eta_j^+ - Y_{ij}^n \eta_j \eta_i. \quad (1.49)$$

On repère dans cette formule la présence de produits d'opérateurs η^+ et η , les opérateurs associés aux quasiparticules. On rappelle que ces opérateurs sont définis tels que

$$\begin{cases} \eta_i^+ = \sum_{\alpha} c_{\alpha}^+ u_{\alpha i} - c_{\alpha} v_{\alpha i} \\ \eta_i = \sum_{\alpha} c_{\alpha} u_{\alpha i} + c_{\alpha}^+ v_{\alpha i} \end{cases} \quad (1.50)$$

Une excitation - également appelée *phonon QRPA* - correspond alors à l'action d'un opérateur de quasi-boson sur un état quantique donné, mettant en jeu une paire de quasiparticules (traduit par le produit d'opérateurs). Les termes X_{ij} et Y_{ij} correspondent aux amplitudes des excitations à 2 quasiparticules. Ces amplitudes permettent de caractériser la nature individuelle ou collective, ainsi que la cohérence des phonons.

Tout comme l'ensemble des autres opérateurs de création/annihilation, les opérateurs θ et θ^+ vérifient les relations suivantes (l'état fondamental, également nommé *vide QRPA* est noté $|QRPA\rangle$) :

$$\text{Pour les quasi-bosons} \quad \begin{cases} \theta_n^+ |QRPA\rangle = |n\rangle \\ \theta_n |QRPA\rangle = 0 \\ \theta_n |n\rangle = |QRPA\rangle \end{cases} \quad (1.51)$$

On peut regretter le fait que l'on ait défini un nouveau couple d'opérateurs de création et d'annihilation. Cependant, leur importance prend tout son sens lorsque l'on écrit l'équation QRPA, donnée ci-dessous sous forme matricielle, celle-ci faisant apparaître les amplitudes X_{ij} et Y_{ij} comme vecteurs propres de l'équation

$$\begin{pmatrix} A & B \\ B & A \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X^n \\ Y^n \end{pmatrix} = \omega_n \begin{pmatrix} X^n \\ -Y^n \end{pmatrix}. \quad (1.52)$$

La matrice QRPA est une matrice par blocs, les sous-matrices A et B comportant les termes de l'interaction résiduelle.

1.5.2.2 Dérivation des équations QRPA

On part des équations du mouvement définies dans [Suh07, Won04, Row10] et d'un opérateur $\hat{O}$ quelconque

$$\left[\hat{O}, [H, \theta_n^+] \right] = \hat{O} [H, \theta_n^+] - [H, \theta_n^+] \hat{O}, \quad (1.53)$$

et on cherche des solutions telles que

$$[H, \theta_n^+] = \omega_n \theta_n^+, \quad (1.54)$$

on établit que

$$\begin{aligned} \left[\hat{O}, [H, \theta_n^+] \right] &= \omega_n \hat{O} \theta_n^+ - \omega_n \theta_n^+ \hat{O} \\ \left[\hat{O}, [H, \theta_n^+] \right] &= \omega_n \left[\hat{O}, \theta_n^+ \right]. \end{aligned} \quad (1.55)$$

En prenant $\hat{O}$ comme l'opérateur infinitésimal

$$\hat{O} = \sum_{k < l} \delta X^{kl} \eta_k^+ \eta_l^+ - \delta Y^{kl} \eta_l \eta_k, \quad (1.56)$$

on arrive à l'équation suivante :

$$\sum_{k < l} \delta X^{kl} [\eta_k^+ \eta_l^+, [H, \theta_n^+]] - \delta Y^{kl} [\eta_l \eta_k, [H, \theta_n^+]] = \omega_n \left(\sum_{k < l} \delta X^{kl} [\eta_k^+ \eta_l^+, \theta_n^+] - \delta Y^{kl} [\eta_l \eta_k, \theta_n^+] \right). \quad (1.57)$$

Étant donné que $\hat{O}$ est infinitésimal, on peut faire tendre δX^{kl} ou δY^{kl} vers 0, ce qui nous permet d'obtenir un système de deux équations, et pour tout couple

$(k, l) :$

$$\begin{cases} \delta X^{kl} [\eta_k^+ \eta_l^+, [H, \theta_n^+]] = \omega_n \delta X^{kl} [\eta_k^+ \eta_l^+, \theta_n^+] \\ -\delta Y^{kl} [\eta_l \eta_k, [H, \theta_n^+]] = -\omega_n \delta Y^{kl} [\eta_l \eta_k, \theta_n^+], \end{cases} \quad (1.58)$$

soit

$$\begin{cases} [\eta_k^+ \eta_l^+, [H, \theta_n^+]] = \omega_n [\eta_k^+ \eta_l^+, \theta_n^+] \\ [\eta_l \eta_k, [H, \theta_n^+]] = \omega_n [\eta_l \eta_k, \theta_n^+]. \end{cases} \quad (1.59)$$

En développant l'expression du phonon QRPA (1.49), on obtient :

$$\begin{cases} \sum_{i < j} X_n^{ij} [\eta_k^+ \eta_l^+, [H, \eta_i^+ \eta_j^+]] & -Y_n^{ij} [\eta_k^+ \eta_l^+, [H, \eta_j \eta_i]] \\ & = \omega_n \left(\sum_{i < j} X_n^{ij} [\eta_k^+ \eta_l^+, \eta_i^+ \eta_j^+] - Y_n^{ij} [\eta_k^+ \eta_l^+, \eta_j \eta_i] \right) \\ \sum_{i < j} X_n^{ij} [\eta_l \eta_k, [H, \eta_i^+ \eta_j^+]] & -Y_n^{ij} [\eta_l \eta_k, [H, \eta_j \eta_i]] \\ & = \omega_n \left(\sum_{i < j} X_n^{ij} [\eta_l \eta_k, \eta_i^+ \eta_j^+] - Y_n^{ij} [\eta_l \eta_k, \eta_j \eta_i] \right). \end{cases} \quad (1.60)$$

On utilise à présent l'approximation du quasi-boson qui considère qu'une paire de quasiparticule agit presque comme un opérateur bosonique, ce qui implique que les combinaisons $\eta\eta$ et $\eta^+\eta^+$ obéissent aux règles de commutation bosonique (cf. annexe A).

Le système précédent devient alors pour tout couple $(i, j) :$

$$\begin{cases} \sum_{i < j} X_n^{ij} [\eta_k^+ \eta_l^+, [H, \eta_i^+ \eta_j^+]] - Y_n^{ij} [\eta_k^+ \eta_l^+, [H, \eta_j \eta_i]] = \omega_n Y_n^{kl} \\ \sum_{i < j} X_n^{ij} [\eta_l \eta_k, [H, \eta_i^+ \eta_j^+]] - Y_n^{ij} [\eta_l \eta_k, [H, \eta_j \eta_i]] = \omega_n X_n^{kl}. \end{cases} \quad (1.61)$$

En posant

$$A_{ij,kl} = \langle 0_{HFB} | \left[\eta_j \eta_i, \left[\hat{H}, \eta_k^+ \eta_l^+ \right] \right] | 0_{HFB} \rangle, \quad (1.62)$$

$$B_{ij,kl} = -\langle 0_{HFB} | \left[\eta_j \eta_i, \left[\hat{H}, \eta_l \eta_k \right] \right] | 0_{HFB} \rangle, \quad (1.63)$$

et en remplaçant dans (1.61) les termes qui conviennent (et en inversant l'ordre des lignes), on retrouve les équations QRPA telles que définies dans l'équation (1.52) :

$$\begin{cases} AX_n + BY_n = \omega_n X_n \\ B^* X_n + A^* Y_n = -\omega_n Y_n. \end{cases} \quad (1.64)$$

On note au passage la présence d'une conjugaison complexe sur la seconde ligne, alors qu'elle était absente dans l'équation (1.52). L'expression rigoureuse doit faire apparaître cette conjugaison complexe, mais celle-ci est souvent omise par commodité. Le lecteur voulant plus de précisions à ce sujet est invité à consulter la référence [Tho60].

En pratique, on utilise les équations (1.62) et (1.63) sous une forme différente¹⁰ :

$$A_{ij,kl} = (\epsilon_i + \epsilon_j) \delta_{ik} \delta_{jl} + V_{abcd}^{(A)} \quad (1.65)$$

$$B_{ij,kl} = V_{abcd}^{(B)}, \quad (1.66)$$

où les termes $V_{abcd}^{(A,B)}$ sont des sommes mettant en jeu des combinaisons de quatre coefficients U et V définis par la transformation de Bogoliubov (1.28). Ces termes sont faibles comparativement aux énergies de quasiparticules $\epsilon_{i,j}$, ce qui fait que la matrice A sera majoritairement diagonale.

Résoudre l'équation QRPA (1.52) est strictement équivalent à résoudre une équation de Schrödinger - dont elle est issue - ou encore résoudre une équation aux

10. Les deux formes sont strictement égales, il suffit de développer le hamiltonien en termes de quasiparticules, voir [RS80].

valeurs propres¹¹, celles-ci étant les énergies d'excitation ω_n des phonons QRPA. À la suite de ce calcul, on obtient les états excités, définis à partir du vide QRPA, le fondamental du système. Ces fonctions d'onde sont obtenues par le produit des amplitudes X et Y et des fonctions d'ondes "individuelles" des états de quasiparticules qui elles-mêmes reposent sur les états propres de l'oscillateur harmonique.

1.5.2.3 Expression des produits c^+c^+, c^+c, cc^+ et cc en fonction des phonons QRPA

De la même façon que nous avons exprimé les opérateurs de la base canonique en fonction des opérateurs de quasiparticules, il est possible d'exprimer les produits d'opérateurs $\eta_i^+\eta_j^+$ et $\eta_j\eta_i$ en fonction des opérateurs de quasi-bosons θ_n^+ et θ_n :

$$\begin{pmatrix} \theta_n^+ \\ \theta_n \end{pmatrix} = \Xi \begin{pmatrix} \eta_i^+\eta_j^+ \\ \eta_j\eta_i \end{pmatrix}, \text{ avec } \Xi = \begin{pmatrix} X_{ij}^n & -Y_{ij}^n \\ -Y_{ij}^n & X_{ij}^n \end{pmatrix}.$$

Sachant que $X_{ij}^{n^2} - Y_{ij}^{n^2} = 1$, la matrice Ξ vérifie la relation suivante¹² :

$$\Xi^{-1} = \frac{1}{\det(\Xi)} {}^t\text{Com}(\Xi) = {}^t\text{Com}(\Xi).$$

On écrit alors l'équation matricielle permettant d'exprimer $\eta_i^+\eta_j^+$ et $\eta_j\eta_i$ en fonction des opérateurs θ_n^+ et θ_n :

$$\begin{pmatrix} \eta_i^+\eta_j^+ \\ \eta_j\eta_i \end{pmatrix} = \Xi^{-1} \begin{pmatrix} \theta_n^+ \\ \theta_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X_{ij}^n & Y_{ij}^n \\ Y_{ij}^n & X_{ij}^n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \theta_n^+ \\ \theta_n \end{pmatrix}. \quad (1.67)$$

À l'aide de cette inversion ainsi que de la relation (1.48), nous pouvons exprimer les produits d'opérateurs $c_\alpha c_\beta$ (ainsi que les variantes faisant intervenir les c_α^+) qui

11. Il ne s'agit pas en toute rigueur d'une équation aux valeurs propres à cause de la métrique qui confère un signe moins à Y^n , mais on peut s'y ramener grâce au fait que $\sum_{i,j} |X_{ij}^n|^2 - |Y_{ij}^n|^2 = 1$, en prenant les ω_n^2 comme valeurs propres, cf [PG08], eqs.(4-9).

12. l'exposant t correspond à la transposition matricielle, et $\text{Com}(\Xi)$ est la comatrice de Ξ autrement appelée matrice adjointe de Ξ .

seront utiles par la suite :

$$\left\{ \begin{array}{lcl} c_{\alpha}^{+} c_{\beta}^{+} & = & [u_{i\alpha} \eta_i^{+} + \bar{v}_{i\alpha} \eta_i][u_{j\beta} \eta_j^{+} + \bar{v}_{j\beta} \eta_j] = u_{i\alpha} u_{j\beta} \eta_i^{+} \eta_j^{+} + \bar{v}_{i\alpha} \bar{v}_{j\beta} \eta_i \eta_j + u_{i\alpha} \bar{v}_{j\beta} \eta_i^{+} \eta_j + \bar{v}_{i\alpha} u_{j\beta} \eta_i \eta_j^{+} \\ c_{\alpha} c_{\beta} & = & [v_{i\alpha} \eta_i^{+} + \bar{u}_{i\alpha} \eta_i][v_{j\beta} \eta_j^{+} + \bar{u}_{j\beta} \eta_j] = v_{i\alpha} v_{j\beta} \eta_i^{+} \eta_j^{+} + \bar{u}_{i\alpha} \bar{u}_{j\beta} \eta_i \eta_j + v_{i\alpha} \bar{u}_{j\beta} \eta_i^{+} \eta_j + \bar{u}_{i\alpha} v_{j\beta} \eta_i \eta_j^{+} \\ c_{\alpha}^{+} c_{\beta} & = & [u_{i\alpha} \eta_i^{+} + \bar{v}_{i\alpha} \eta_i][v_{j\beta} \eta_j^{+} + \bar{u}_{j\beta} \eta_j] = u_{i\alpha} v_{j\beta} \eta_i^{+} \eta_j^{+} + \bar{v}_{i\alpha} \bar{u}_{j\beta} \eta_i \eta_j + u_{i\alpha} \bar{u}_{j\beta} \eta_i^{+} \eta_j + \bar{v}_{i\alpha} v_{j\beta} \eta_i \eta_j^{+} \\ c_{\alpha} c_{\beta}^{+} & = & [v_{i\alpha} \eta_i^{+} + \bar{u}_{i\alpha} \eta_i][u_{j\beta} \eta_j^{+} + \bar{v}_{j\beta} \eta_j] = v_{i\alpha} u_{j\beta} \eta_i^{+} \eta_j^{+} + \bar{u}_{i\alpha} \bar{v}_{j\beta} \eta_i \eta_j + v_{i\alpha} \bar{v}_{j\beta} \eta_i^{+} \eta_j + \bar{u}_{i\alpha} u_{j\beta} \eta_i \eta_j^{+} \end{array} \right.$$

À l'aide des équations (1.33) et (1.30), on peut réécrire les couples $\eta_i^{+} \eta_j$ et $\eta_i \eta_j^{+}$ du système précédent :

$$\begin{aligned} c_{\alpha}^{+} c_{\beta} &= u_{i\alpha} v_{j\beta} \eta_i^{+} \eta_j^{+} + \bar{v}_{i\alpha} \bar{u}_{j\beta} \eta_i \eta_j + u_{i\alpha} \bar{u}_{j\beta} \eta_i^{+} \eta_j + \bar{v}_{i\alpha} v_{j\beta} \eta_i \eta_j^{+} \\ c_{\alpha}^{+} c_{\beta} &= u_{i\alpha} v_{j\beta} \eta_i^{+} \eta_j^{+} + \bar{v}_{i\alpha} \bar{u}_{j\beta} \eta_i \eta_j + u_{i\alpha} \bar{u}_{j\beta} \eta_i^{+} \eta_j + \bar{v}_{i\alpha} v_{j\beta} [\delta_{ij} - \eta_j^{+} \eta_i] \\ c_{\alpha}^{+} c_{\beta} &= u_{i\alpha} v_{j\beta} \eta_i^{+} \eta_j^{+} + \bar{v}_{i\alpha} \bar{u}_{j\beta} \eta_i \eta_j + u_{i\alpha} \bar{u}_{j\beta} \eta_i^{+} \sum_k (\eta_k^{+} \eta_k) \eta_j + \bar{v}_{i\alpha} v_{j\beta} \left[\delta_{ij} - \eta_j^{+} \sum_k (\eta_k^{+} \eta_k) \eta_i \right] \\ c_{\alpha}^{+} c_{\beta} &= u_{i\alpha} v_{j\beta} \eta_i^{+} \eta_j^{+} + \bar{v}_{i\alpha} \bar{u}_{j\beta} \eta_i \eta_j + u_{i\alpha} \bar{u}_{j\beta} \sum_k (\eta_i^{+} \eta_k^{+} \eta_k \eta_j) + \bar{v}_{i\alpha} v_{j\beta} \left[\delta_{ij} - \sum_k (\eta_j^{+} \eta_k^{+} \eta_k \eta_i) \right] \end{aligned}$$

En utilisant la relation (1.67), on peut exprimer l'ensemble en fonction de θ_n^{+} et θ_n :

$$\begin{aligned} c_{\alpha}^{+} c_{\beta} &= u_{i\alpha} v_{j\beta} \sum_n (X_{ij}^n \theta_n^{+} + Y_{ij}^n \theta_n) + \bar{v}_{i\alpha} \bar{u}_{j\beta} \sum_n (Y_{ji}^n \theta_n^{+} + X_{ji}^n \theta_n) \\ &\quad + u_{i\alpha} \bar{u}_{j\beta} \left[\sum_k \left(\sum_m X_{ik}^m \theta_m^{+} + Y_{ik}^m \theta_m \right) \left(\sum_{m'} Y_{jk}^{m'} \theta_{m'}^{+} + X_{jk}^{m'} \theta_{m'} \right) \right] \\ &\quad + \bar{v}_{i\alpha} v_{j\beta} \left[\delta_{ij} - \sum_k \left(\sum_m X_{jk}^m \theta_m^{+} + Y_{jk}^m \theta_m \right) \left(\sum_{m'} Y_{ik}^{m'} \theta_{m'}^{+} + X_{ik}^{m'} \theta_{m'} \right) \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
c_\alpha^+ c_\beta &= u_{i\alpha} v_{j\beta} \sum_n (X_{ij}^n \theta_n^+ + Y_{ij}^n \theta_n) + \bar{v}_{i\alpha} \bar{u}_{j\beta} \sum_n (Y_{ji}^n \theta_n^+ + X_{ji}^n \theta_n) \\
&+ u_{i\alpha} \bar{u}_{j\beta} \sum_k \sum_{m,m'} (X_{ik}^m Y_{jk}^{m'} \theta_m^+ \theta_{m'}^+ + Y_{ik}^m X_{jk}^{m'} \theta_m \theta_{m'} + X_{ik}^m X_{jk}^{m'} \theta_m^+ \theta_{m'} + Y_{ik}^m Y_{jk}^{m'} \theta_m \theta_{m'}^+) \\
&- \bar{v}_{i\alpha} v_{j\beta} \sum_k \sum_{m,m'} (X_{jk}^m Y_{ik}^{m'} \theta_m^+ \theta_{m'}^+ + Y_{jk}^m X_{ik}^{m'} \theta_m \theta_{m'} + X_{jk}^m X_{ik}^{m'} \theta_m^+ \theta_{m'} + Y_{jk}^m Y_{ik}^{m'} \theta_m \theta_{m'}^+) \\
&+ \bar{v}_{i\alpha} v_{j\beta} \delta_{ij}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
c_\alpha^+ c_\beta &= u_{i\alpha} v_{j\beta} \sum_n (X_{ij}^n \theta_n^+ + Y_{ij}^n \theta_n) + \bar{v}_{i\alpha} \bar{u}_{j\beta} \sum_n (Y_{ji}^n \theta_n^+ + X_{ji}^n \theta_n) \\
&+ \sum_k \sum_{m,m'} \left(u_{i\alpha} \bar{u}_{j\beta} X_{ik}^m Y_{jk}^{m'} - \bar{v}_{i\alpha} v_{j\beta} X_{jk}^m Y_{ik}^{m'} \right) \theta_m^+ \theta_{m'}^+ \\
&+ \left(u_{i\alpha} \bar{u}_{j\beta} Y_{ik}^m X_{jk}^{m'} - \bar{v}_{i\alpha} v_{j\beta} Y_{jk}^m X_{ik}^{m'} \right) \theta_m \theta_{m'} \\
&+ \left(u_{i\alpha} \bar{u}_{j\beta} X_{ik}^m X_{jk}^{m'} - \bar{v}_{i\alpha} v_{j\beta} X_{jk}^m X_{ik}^{m'} \right) \theta_m^+ \theta_{m'} \\
&+ \left(u_{i\alpha} \bar{u}_{j\beta} Y_{ik}^m Y_{jk}^{m'} - \bar{v}_{i\alpha} v_{j\beta} Y_{jk}^m Y_{ik}^{m'} \right) \theta_m \theta_{m'}^+ \\
&+ \bar{v}_{i\alpha} v_{j\beta} \delta_{ij}
\end{aligned}$$

Le produit $c^+ c$ est particulièrement intéressant, puisqu'il s'agit de l'opérateur qui permet de calculer la densité d'un système. On sera donc en mesure de calculer la densité à partir des phonons QRPA.

1.5.2.4 Observables et grandeurs calculées

Si les énergies de phonons sont les valeurs propres de l'équation QRPA, les densités et les probabilités de transitions sont obtenues à partir des vecteurs propres X et Y (fonctions d'ondes des phonons). Dans le cas particulier des probabilités de transitions électromagnétiques multipolaires, nous utilisons les opérateurs détaillés dans cette partie.

En électromagnétisme, il est possible d'étudier un champ généré par un système globalement neutre, l'exemple le plus accessible étant le dipôle électrique.

Grâce au développement multipolaire, on peut vérifier qu'il est bien la source d'un champ électrique. En physique atomique, les atomes polarisés, systèmes globalement neutres mais déformés, suivent le même principe et induisent un champ. Contrairement aux deux cas précédents, les noyaux ne respectent pas une neutralité globale, mais ils génèrent tout de même de nouveaux termes de champs du fait de leur déformation.

On peut ainsi définir l'opérateur électrique $\hat{Q}_{\lambda\mu}$ [HvdW01] :

$$\hat{Q}_{\lambda\mu} = \int \rho(\mathbf{r}) r^\lambda Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi) d^3r, \quad (1.68)$$

avec les harmoniques sphériques $Y_{\lambda\mu}$ définies à partir de [LL58] :

$$Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi) = (-1)^{\frac{\mu+|\mu|}{2}} \sqrt{\frac{2\lambda+1}{4\pi} \frac{(\lambda-|\mu|)!}{(\lambda+|\mu|)!}} P_{\lambda|\mu|}(\cos\theta) e^{i\mu\phi}, \text{ avec } \lambda \in \mathbb{N} \text{ et } \mu \in \llbracket -\lambda, \lambda \rrbracket. \quad (1.69)$$

On peut également définir l'opérateur de moment magnétique $\hat{M}_{\lambda\mu}$ [HvdW01] :

$$\hat{M}_{\lambda\mu} = \int \boldsymbol{\mu}(\mathbf{r}) \cdot \nabla (r^\lambda Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi)) d^3r. \quad (1.70)$$

Quel que soit l'opérateur concerné, on exprime son moment sous la forme

$$\mathcal{M} = \sum_n \langle n | \hat{O}_{\lambda\mu} | n \rangle. \quad (1.71)$$

Il est possible de calculer les moments issus de ces opérateurs en discrétisant l'intégrale selon un maillage. L'avantage de cette méthode réside dans sa facilité de programmation. Cependant, elle se révèle extrêmement coûteuse en temps de calcul, pour peu que l'on utilise un pas suffisamment fin. Elle peut éventuellement servir à comparer et valider les résultats obtenus par la méthode que nous avons choisie et qui sera explicitée par la suite.

L'intérêt de ces moments est double. Ils peuvent servir à évaluer les défor-

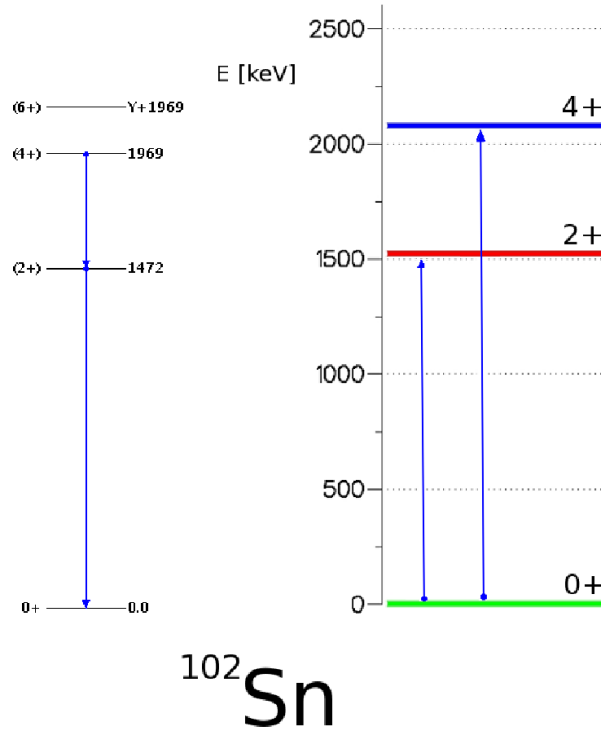


FIGURE 1-10 – Schémas de niveaux expérimental, à gauche [NND] et théorique, à droite.

mations des noyaux mais surtout, ils permettent de calculer les probabilités de transitions, notée $B(E\lambda)$ dans le cas de transitions électriques d'ordre λ , depuis l'état de moment angulaire J_i vers un état J_f selon la formule :

$$B(E\lambda, J_i \rightarrow J_f) = \frac{1}{2J_i + 1} |\langle J_f | \hat{Q}_{\lambda\mu} | J_i \rangle|^2. \quad (1.72)$$

Cette grandeur est capitale pour les différentes collaborations avec les expérimentateurs puisqu'elle permet de remonter à la durée de vie d'un état, celle-ci étant inversement proportionnelle à la probabilité de transition $B(E\lambda)$ ou aux fonctions de force γ .

La figure 1-10 permet la comparaison entre un spectre expérimental et un spectre théorique obtenus pour le ^{102}Sn .

On remarque que le niveau 6^+ n'est pas représenté sur le schéma obtenu par calcul, puisque le moment le plus élevé ayant été programmé au début de ce travail de thèse était $\hat{Q}_{40}$. Les opérateurs $\hat{Q}_{41}$, $\hat{Q}_{42}$, $\hat{Q}_{43}$ et $\hat{Q}_{44}$ n'ayant pas été programmés, cette comparaison s'arrête à l'octupole pour les noyaux déformés. Il était possible d'associer la multipolarité 6 à des valeurs propres issues du calcul par la méthode décrite au 3.1.3. Toutefois, le manque d'opérateurs d'ordre 6 n'aurait pas permis de lui associer certaines observables, comme sa probabilité de transition depuis le fondamental. L'importance d'écrire et de programmer de nouveaux ordres pour les moments multipolaires apparaît ici comme une évidence lorsque l'on cherche à étudier la spectroscopie des noyaux, et c'est ce que nous verrons au chapitre 3.

Chapitre 2

Utilisation du code QRPA à symétrie axiale ISAAC

Dans cette partie, je vais présenter des analyses de résultats obtenus par l'utilisation du code QRPA axisymétrique ISAAC, écrit en 2008 [PG08]. Dans un premier temps, je rappellerai les caractéristiques principales de ce code. Dans un second temps, je présenterais différentes études publiées grâce à son exploitation.

2.1 Schéma de calcul global

Comme expliqué dans le chapitre précédent, le calcul QRPA prend comme donnée d'entrée le spectre de quasiparticules obtenu par un calcul HFB. Afin de rester cohérence, toutes les conditions du calcul sont identiques : mêmes paramètres de la base de l'OH, même paramétrisation de l'interaction,...

La figure 2-1 illustre les différentes étapes du calcul, depuis HFB jusqu'aux observables théoriques de structure. L'étape nommée "base qrpa" correspond à la création de la base de paires de quasiparticules en réalisant un calcul combinatoire sur toutes les quasiparticules selon les conditions du calcul : parité Π , projection K du spin, et éventuellement troncature (ou *cutoff*). Une fois la base établie, on remplit la matrice QRPA, c'est le cœur du code ISAAC. L'étape "Diago" correspond,

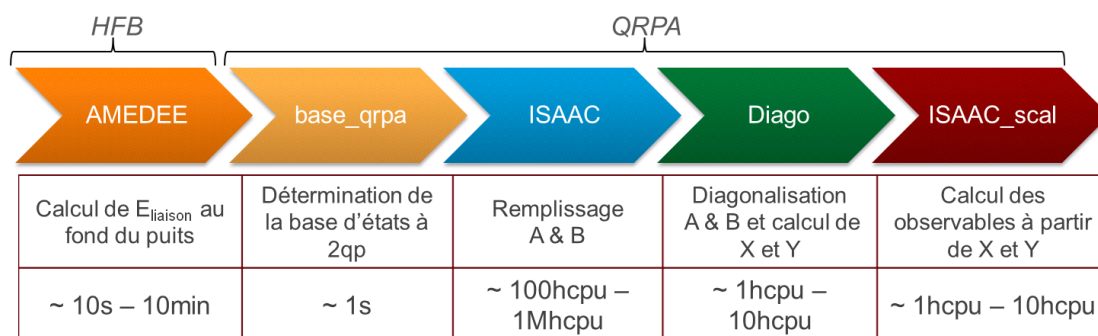


FIGURE 2-1 – Schéma de calcul du code ISAAC.

comme son nom l'indique, à la diagonalisation de la matrice QRPA, ce qui nous permet d'obtenir les valeurs et vecteurs propres que l'on envoie vers la dernière partie, "ISAAC scal" qui permet de calculer les observables d'intérêt.

Pour chaque étape, les temps de calcul moyens sont indiqués. Il faut garder à l'esprit que ces temps ne sont qu'indicatifs mais permettent tout de même de se rendre compte que la majorité des efforts de calculs se concentre sur la partie de remplissage de la matrice QRPA. Il s'agit d'une matrice ayant des dimensions importantes. Il nous faut calculer plusieurs centaines de millions d'éléments pour un noyau de taille moyenne comme l'étain. On peut mentionner au passage que dans le cas d'autres interactions, par exemple la force de Skyrme, ce temps de remplissage est extrêmement réduit, celle-ci bénéficiant du fait d'être une interaction de contact, c'est à dire qu'elle ne possède pas de terme de portée finie.

L'ensemble de la chaîne de codes est écrit en FORTRAN et a été parallélisé il y a quelques années [PGM⁺11]. Le code ISAAC est organisé selon un procédé de type "maître-esclave". Un processus MPI maître distribue un par un les éléments de matrice à calculer aux autres processus. Une fois le calcul fini, ceux-ci retournent le résultat au processus maître qui envoie un nouvel élément à calculer jusqu'à ce que tous les termes aient été déterminés. Étant donnée la taille de matrice typique d'un tel calcul, et le temps caractéristique de calcul d'un de ces éléments¹, cette

1. Dépendant de la taille de la base et donc de la taille du noyau.

manière de procéder confère au code un facteur d'échelle infini, *a priori*.

2.2 Étude de noyaux d'étain ($Z = 50$)

Dans le cadre de la collaboration COPENHAGEN (DAM/DSM²), nous avons étudié la spectroscopie de basse énergie de la chaîne isotopique des étains ($Z=50$) pairs-pairs ayant un nombre total de nucléons compris entre 100 et 120. Des expériences récentes menées au RIKEN (Japon), par le Service de Physique Nucléaire du centre du CEA - Saclay, ont permis d'enrichir la spectroscopie des étains, notamment celle de ^{104}Sn . Il nous a été demandé de calculer les réponses quadripolaires et octupolaires de cette chaîne isotopique. Pour valider le dispositif, le spectre du ^{120}Sn , noyau stable et dont les propriétés sont bien connues, a servi de référence. Les mesures se sont ensuite concentrées vers le ^{104}Sn et ont permis de mettre au jour un état jamais étudié auparavant aux alentours de 3 MeV. Afin d'identifier la nature de cet état, nous avons étudié la systématique des étains et comparé les énergies des premiers états 2^+ et 3^- prédits par la QRPA aux valeurs expérimentales disponibles comme le montre la figure 2-2.

On remarque que le calcul théorique fournit des résultats très satisfaisants concernant les états de spin 2^+ . L'étude des niveaux 3^- fait apparaître un décalage globale des valeurs théoriques vis-à-vis des quelques valeurs expérimentales disponibles. L'ajout de l'énergie du ^{104}Sn nous permet de penser qu'il s'agit peut-être d'un état de spin 3^- . La cohérence entre la section efficace théorique et la mesure nous autorise à attribuer le spin et la parité 3^- au nouvel état.

Grâce à ces mêmes résultats QRPA, il a également été possible de calculer des sections efficaces de diffusion inélastique (p,p'). Tous ces résultats sont présentés dans l'article [C⁺15] publié dans la revue Physics Letters B et reproduit ici.

2. Entre temps, une réorganisation du CEA a conduit à la fusion de la Direction des Sciences de la Matière avec la Direction des Sciences du Vivant pour former une nouvelle entité nommée Direction de la Recherche Fondamentale.

La méthode utilisée pour calculer les probabilités de transitions de multipolarité λ est traité dans le chapitre 3.



Neutron-driven collectivity in light tin isotopes: Proton inelastic scattering from ^{104}Sn



A. Corsi^{a,*}, S. Boissinot^a, A. Obertelli^a, P. Doornenbal^b, M. Dupuis^c, F. Lechaftois^c, M. Matsushita^d, S. Péru^c, S. Takeuchi^b, H. Wang^{b,e}, N. Aoi^f, H. Baba^b, P. Bednarczyk^g, M. Ciemala^{g,n}, A. Gillibert^a, T. Isobe^b, A. Jungclaus^h, V. Lapoux^a, J. Lee^b, M. Martini^m, K. Matsuiⁱ, T. Motobayashi^b, D. Nishimura^j, S. Ota^d, E. Pollacco^a, H. Sakurai^{b,i}, C. Santamaria^a, Y. Shiga^k, D. Sohler^l, D. Steppenbeck^d, R. Taniuchiⁱ

^a CEA, Centre de Saclay, IRFU/Service de Physique Nucléaire, F-91191 Gif-sur-Yvette, France

^b RIKEN Nishina Center, 2-1 Hirosawa, Wako, Saitama 351-0198, Japan

^c CEA/DAM/DIF, 91297 Arpajon, France

^d CNS, The University of Tokyo, RIKEN Campus, Wako, Saitama 351-0198, Japan

^e State Key Laboratory, Peking University, Beijing, PR China

^f RCNP Osaka University, Ibaraki, Osaka 567-0047, Japan

^g The Niewodniczanski Institute of Nuclear Physics, Krakow, Poland

^h Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, E-28006 Madrid, Spain

ⁱ Department of Physics, University of Tokyo, Bunkyo, Tokyo 113-0033, Japan

^j Department of Physics, Tokyo University of Science, Noda, Chiba 278-8510, Japan

^k Department of Physics, Rikkyo University, Toshima, Tokyo 172-8501, Japan

^l Institute for Nuclear Research, Debrecen, Hungary

^m Department of Physics and Astronomy, Ghent University, Proeftuinstraat 86, B-9000, Gent, Belgium

ⁿ Grand Accélérateur National d'Ions Lourds (GANIL), CEA/DSM-CNRS/IN2P3, F-14076 Caen Cedex 5, France

ARTICLE INFO

Article history:

Received 23 October 2014

Received in revised form 10 February 2015

Accepted 9 March 2015

Available online 12 March 2015

Editor: V. Metag

Keywords:

Collectivity

Inelastic scattering

Gamma spectroscopy

ABSTRACT

Inelastic scattering cross sections to individual bound excited states of ^{104}Sn were measured at 150 MeV/u beam energy and analyzed to evaluate the contribution of neutron and proton collectivity. State-of-the-art Quasi-Particle Random Phase Approximation (QRPA) with the D1M Gogny interaction reproduces the experimental proton collectivity and our inelastic scattering cross sections once used as input for a reaction calculation together with the Jeukenne–Lejeune–Mahaux (JLM) potentials. Experimental inelastic scattering cross section decreases by 40(24)% from ^{112}Sn to ^{104}Sn . The present work shows that (i) proton and neutron collectivities are proportional over a large range of tin isotopes (including ^{104}Sn), as is typical for isoscalar excitations, and (ii) the neutron collectivity dominates. It suggests that the plateau in the mass range $A = 106\text{--}112$ displayed by E2 transition probabilities is driven by neutron collectivity.

© 2015 The Authors. Published by Elsevier B.V. This is an open access article under the CC BY license (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>). Funded by SCOAP³.

The evolution of nuclear shell structure along isotopic or isotonic chains has revealed unexpected onsets of collectivity or shell gap modifications [1–3]. The proton-closed shell Sn isotopes form an ideal testing ground to study the evolution of shell structure and collectivity with isospin. Experimental results reported in [4,5] provide a signature of the magicity of ^{100}Sn and ^{132}Sn . According to the seniority scheme, the reduced transition probabilities

$B(E2; 0_1^+ \rightarrow 2_1^+)$ ($B(E2)$ in the following) in Sn isotopes are expected to exhibit a parabolic trend with a maximum at mid-shell. The experimental trend instead is asymmetric with a persistence of proton collectivity approaching the doubly magic ^{100}Sn [6–11]. Three Coulomb excitation experiments have been reported recently [12–14] for ^{104}Sn , the most neutron-deficient isotope for which the $0_1^+ \rightarrow 2_1^+$ transition probability has been accessed to date. While [12] claims a drop of the experimental $B(E2)$ in agreement with large-scale shell model calculations, the authors of [13,14] have measured a smoother decrease at $N = 54$. Up to now, no shell model calculation can explain satisfactorily the tins' $B(E2)$

* Corresponding author.

E-mail address: acorsi@cea.fr (A. Corsi).

systematics [6–9,12–14]. Calculations systematically underestimate collectivity from ^{112}Sn down to ^{104}Sn . Truncations applied to the valence space used to run shell model calculations are pointed out as responsible for the missing collectivity in $^{104-106}\text{Sn}$ [13–15] and no clear microscopic understanding has been achieved yet.

Beyond-mean field approaches, which do not suffer from valence space restrictions, have been also applied to tin isotopes [16–19]. Different calculations using the QRPA approach find an increase of collectivity going from the mid-shell towards the lightest tin until $^{106,108}\text{Sn}$. The QRPA approach was compared to a Generator-Coordinate-Method-based model using the same mean field [19]. The former is found to be more suitable to describe the spectroscopy of rather spherical nuclei such as semi-magic tin isotopes.

No information is available on neutron collectivity in light tin isotopes. The neutron transition matrix element M_n can be estimated from proton inelastic scattering cross sections provided the proton transition matrix element $M_p(L) = \sqrt{B(EL)/(2L+1)}$ is known [20–22].

Inelastic scattering experiments have been performed only for stable tin isotopes (^{112}Sn – ^{124}Sn) [20,23]. We report here on the first measurement of inelastic scattering on hydrogen for a neutron deficient tin, namely ^{104}Sn .

The experiment was performed at the Radioactive Isotope Beam Factory operated by the RIKEN Nishina Center and the Center for Nuclear Study (CNS) of the University of Tokyo. The ^{104}Sn beam at 150 MeV/u was produced with an intensity of 350 pps via fragmentation of a ^{124}Xe primary beam at 6 pnA on a $0.555 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-2}$ ^9Be target and separated via the BigRIPS separator [24]. A measurement with a ^{112}Sn beam at 170 MeV/u was performed as a reference. The beam impinged on a CH_2 (C) target of $192.1 (370.5) \text{ mg}\cdot\text{cm}^{-2}$. The cross section on hydrogen was extracted by subtracting from the CH_2 spectrum the one measured on carbon, after normalization. The setup consisted of the DALI2 array composed of 186 NaI scintillators [25] for gamma-ray detection and the ZeroDegree Spectrometer for downstream particle identification [26]. A mass resolution of $\sigma \sim 0.001$ was achieved, allowing for an unambiguous isotopic identification. A total of 1.5×10^7 and 1.7×10^7 ^{104}Sn ions was identified at the ZeroDegree focal plane during the measurement with CH_2 and C targets, respectively. The scintillators of the DALI2 array were calibrated in energy with ^{137}Cs , ^{88}Y and ^{60}Co sources, with gamma emission ranging between ~ 600 and ~ 1800 keV. The efficiency of the DALI2 array, covering angles between 19 and 150 degrees, was 14% at 1.33 MeV. This value was in relative agreement within 6% with the Geant4 simulation [27] and was rather independent of the angular distribution of the emitted gamma radiation thanks to the large solid angle coverage. The FWHM intrinsic energy resolution evaluated from Cs, Co and Y sources scaled as $2.4\sqrt{E}$, consistently with [25]. The gamma spectra of ^{104}Sn (^{112}Sn) inelastically scattered on C and CH_2 targets were Doppler corrected with $\beta = 0.47$ and 0.45 (0.495 and 0.485), respectively.

The gamma spectrum of ^{112}Sn shown in Fig. 1 displays a transition at 1245(15) keV and a broad structure around 800–1100 keV. This structure was found in coincidence with the 1245 keV transition as shown in the inset of Fig. 1. Since the spectroscopy of ^{112}Sn is well known [28], we considered three transitions in this peak: $930(30)$, $985(30)$ and $1090(30)$ keV, corresponding to the $0_2^+ \rightarrow 2_1^+$, $4_1^+ \rightarrow 2_1^+$ and $3_1^- \rightarrow 2_1^+$ transitions, respectively.

In order to extract the cross section to the excited states observed in this experiment, the spectrum was adjusted with the sum of a double-exponential background and the simulated response function of the DALI2 array to the gamma-transitions mentioned above. The background originated mainly from atomic processes (bremsstrahlung in the target) at low energy ($E_\gamma < 500$ keV),

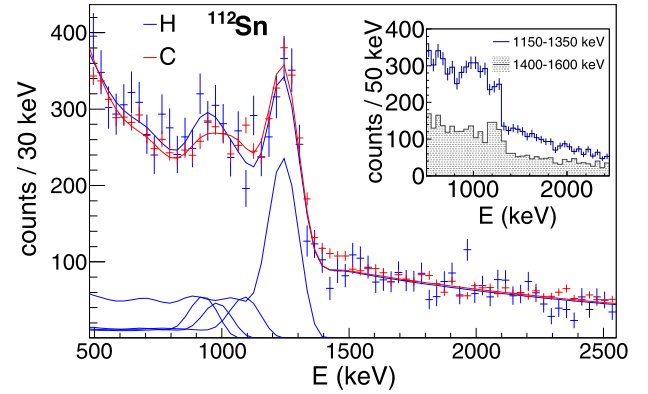


Fig. 1. (Color online.) Gamma spectra of ^{112}Sn inelastically scattered on C (red) and H (blue). The solid line is the fit function used to extract the cross sections (sum and contributions from each transition, for H only). The inset shows the gated gamma spectra ($\text{CH}_2 + \text{C}$) of ^{112}Sn in coincidence with the $2_1^+ \rightarrow 0_1^+$ transition and with an adjacent gamma energy window.

from Compton scattering and target breakup at higher gamma energy. We could not extract the angular distribution of the observed transition, due to the limited statistics. We quantified the effect of the uncertainty on the angular distribution through simulations. The photo peak efficiency for a 1 MeV transition emitted isotropically in the center of mass at $\beta \sim 0.5$ was 24%, whereas the same transition emitted with an anisotropic angular distribution as the one shown in [25] leads to a detection efficiency of 22%. This was considered in the error bars of the inclusive cross sections. The adjustment procedure was performed using spectra with and without addback between adjacent crystals of DALI2 array, yielding consistent results. If a state was both directly excited and populated by the feeding from higher-lying states, as happens here for 2_1^+ , the feeding was subtracted in order to obtain the direct population cross section. The error on the cross section was obtained as the sum of the error issued from the χ^2 minimization (which includes statistical error), the uncertainty on DALI2 efficiency (6% relative systematic error), the statistical error on the number of incident beam particles, and a 2% uncertainty on target thickness. Note that for overlapping peaks (as in the case of the structure observed in ^{112}Sn at energy between 800 and 1100 keV, see Fig. 1) the adjustment procedure was affected by a large uncertainty whereas the sum of the cross sections to the states feeding the 2_1^+ state was reliable.

As a cross check, the cross section on H was also obtained as the difference of the cross sections on CH_2 and C, namely $\sigma_H = (\sigma_{\text{CH}_2} - \sigma_C)/2$, where σ_{CH_2} is the effective cross section per atom of the target. Results were found consistent with the ones obtained on the H spectrum.

We finally obtained cross sections on H of 9.1(38), 3.6(26), 4.0(24) and 4.6(20) mb for the 2_1^+ , 4_1^+ , 0_2^+ and 3_1^- states, respectively. The cross sections on C target for the same states were found to be 22.5(35), 5.9(32), 4.7(29) and 12.3(27) mb.

In the ^{104}Sn spectrum shown in Fig. 2 (up), four transitions are visible at 670(20), 1040(20), 1260(15) and 1950(50) keV. The transitions at 670(20) and 1260(15) keV are in good agreement with the known energy of $4_1^+ \rightarrow 2_1^+$ decay at 682 keV and 2_1^+ state [28]. The 1260 keV transition was found in coincidence with the three other ones, which therefore correspond to the decay of feeders to the 2_1^+ state (Fig. 2, bottom). Prompt transitions are consistent only with E1, M1, E2 multipolarities. Since the final state is a 2_1^+ , the initial state spin must be $J = 0$ to 4 for angular momentum conservation. Inelastic scattering measurements on nuclei with few neutrons outside the closed shell show that the 3_1^- state is strongly populated. The inelastic scattering cross section to the 3_1^- state of

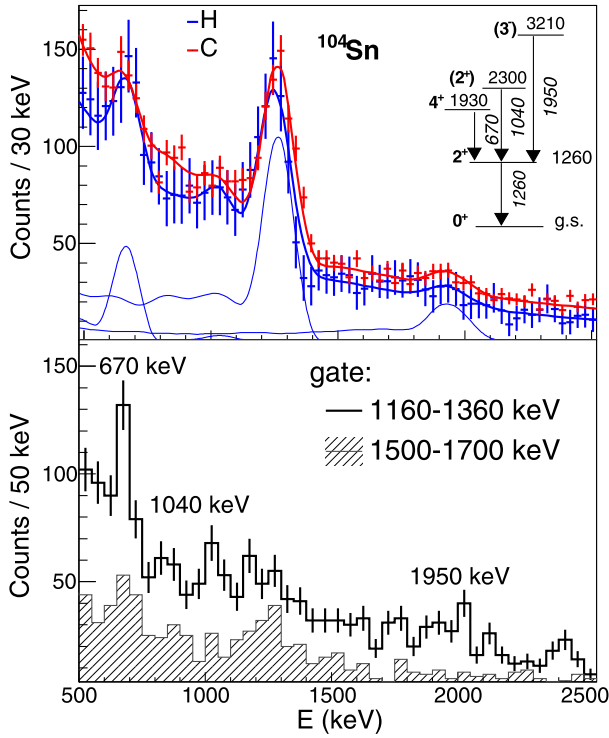


Fig. 2. (Color online.) Top: gamma spectra of ^{104}Sn inelastically scattered on C (red) and H (blue). The solid line is the fit function used to extract the cross sections (sum and contributions from each transition, for H only). Bottom: gamma spectra ($\text{CH}_2 + \text{C}$) of ^{104}Sn in coincidence with the peak at 1260 keV and with an adjacent gamma energy window.

^{20}O [29], ^{44}Ca [30] and ^{94}Zr [31] is of the same order of magnitude of the cross section to the 2_1^+ state ($\sigma_{3^-}/\sigma_{2^+} = 0.5\text{--}1$). We therefore propose a spin-parity assignment of 3_1^- for the state at 3210 keV, consistent with the systematics of 3_1^- excitation energies in stable tin isotopes [28]. The state at 2300 keV is weakly populated so its feeding contribution is negligible. Nevertheless, it was clearly observed in coincidence with the 1260 keV transition and therefore assigned to a 2_2^+ state on the basis of systematics of heavier tin isotopes. The measured cross sections for ^{104}Sn inelastic scattering on H are $5.4(24)$, $4.2(8)(^{+10}_{-0})$, $1.7(9)$ and $3.9(14)(^{+10}_{-0})$ mb for 2_1^+ , 4_1^+ , 2_2^+ and the proposed 3_1^- states, respectively. The systematic error of 1 mb accounts for the possibility that the 3210 keV state feeds the 4_1^+ state via a 1280 keV transition that we cannot completely rule out due to the proximity with the strong 1260 keV transition. The cross sections on the C target for the same states are $18.6(41)$, $3.5(13)$, $0.88(155)$ and $5.0(27)$ mb. If one believes the proposed 3_1^- spin-parity assignment of the 3210 keV state, this state lies higher energy with respect to the 3_1^- states measured for $A \geq 110$. Its excitation energy of 3210 keV is in good agreement with the prediction of [18].

Fig. 3 shows 2^+ and 3^- experimental excitation energies compared to theoretical values. The latter are obtained from consistent Hartree–Fock–Bogoliubov + QRPA calculations [32] using the Gogny D1M interaction [33]. The Gogny D1M interaction parameters are fitted to all measured masses, with the constraints to provide reliable nuclear matter and neutron matter properties and also radii, giant resonance and fission properties for a selected set of nuclei. The excitation energy of 2_1^+ states is correctly reproduced. The calculated 3_1^- excitation energies overestimate the experimental values by a roughly constant factor. This remains valid for our ^{104}Sn measurement, if one believes the proposed spin-

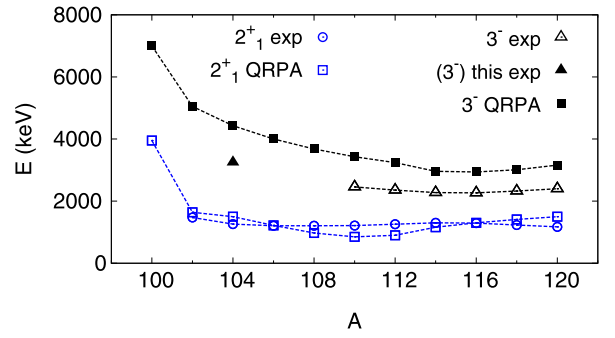


Fig. 3. (Color online.) Systematics of 2^+ and 3^- excitation energies in tin isotopes from experiment and HFB + QRPA calculations using the Gogny D1M interaction.

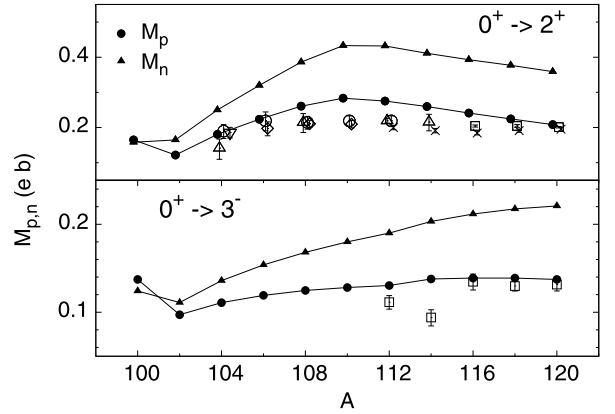


Fig. 4. M_p ($\bullet$) and M_n ($\blacktriangle$) from QRPA calculations with the Gogny D1M interaction compared to experimental M_p (∇ : RIKEN [14], $\circ$: NSCL [9,13], $\times$: GSI Doppler Shift Attenuation Method [34], $\triangle$: GSI Coulomb excitation [6,10–12], $\diamond$: ISOLDE [7,8], $\square$: NNDC [28]). Top: 2_1^+ . Bottom: 3_1^- . Experimental M_n values are taken from the literature [22].

parity assignment. Thus both experimental and theoretical values would suggest a 3_1^- excitation energy rise towards ^{100}Sn .

M_p and M_n of the transitions from the ground state to the 2_1^+ and 3_1^- states obtained within this same theoretical framework are shown in Fig. 4. Both M_p and M_n to the 2_1^+ state display a maximum of collectivity at ^{110}Sn and a minimum at ^{102}Sn , while experimental data show a rather flat dependence on mass between ^{106}Sn and ^{122}Sn . An increase of collectivity with decreasing mass until ^{106}Sn was already predicted by relativistic QRPA calculations [17]. We note that D1M QRPA M_p 's to the 2_1^+ of $^{104,106}\text{Sn}$ are in agreement with recent measured values [14,9]. M_p and M_n to the 3_1^- state decrease linearly from $A = 120$ to $A = 102$. This loss of collectivity is consistent with the high 3_1^- state excitation energy in ^{104}Sn measured in this experiment. This calculation shows that neutron collectivity is the dominant contribution to the 2_1^+ and 3_1^- configurations, as expected in proton-magic isotopes. More importantly, these M_p and M_n values show that the trend of proton collectivity follows the neutron one, except for the doubly magic nucleus ^{100}Sn . The maximum of collectivity predicted at $A = 110$ and the drop at $A = 102$ indicate that the proton configuration is influenced by neutron excitations. Such a change in both proton and neutron collectivity from ^{112}Sn to ^{104}Sn appears in our measured inelastic cross section in conjunction with the $B(E2)$: the 2_1^+ inelastic excitation cross section decreases by 40(24)% from 9.1(38) mb (^{112}Sn) to 5.4(24) mb (^{104}Sn), while the $B(E2)$ value evolves by 26(12)% from $0.240(14) \text{ e}^2\text{b}^2$ to $0.176(22) \text{ e}^2\text{b}^2$ [13,14].

In order to give credit to this interpretation, we calculated (p, p') inelastic cross sections within a parameter free approach.

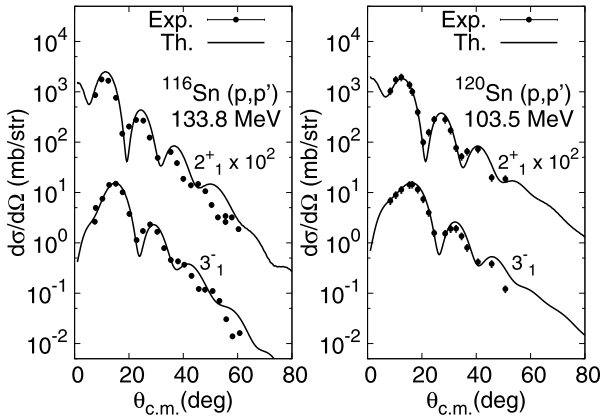


Fig. 5. Differential proton inelastic cross sections. Calculated cross sections from the JLM convolution model (full curves) are compared to experimental data (symbols) for the incident energy 133.8 MeV for ^{116}Sn [37] and 103.5 MeV for ^{120}Sn [38].

This formalism uses one body neutron and proton local transition densities from QRPA and the semi-microscopic JLM potential [35]. The JLM potential is well suited for inelastic scattering on spherical and near-spherical nuclei with mass $40 < A < 209$ at energies up to 200 MeV/u [36]. First, to estimate the uncertainty related to calculated inelastic cross sections, we compare theoretical and experimental differential cross sections for $^{116,120}\text{Sn}$ for the first 2^+ and 3^- states. As seen from Fig. 5, predicted angular distribution shapes and magnitudes are in good agreement with measurements without using any normalization factor. We roughly estimate that this agreement is typically within 20%.

Even though M_n values are routinely extracted from such studies, we choose here to discuss only cross sections since only these are observables. Our choice is motivated by the difficulty to assess uncertainties from reaction models. We therefore acknowledge that the following discussion, even though benchmarked on stable nuclei data and performed with care, depends on the details of the chosen reaction model.

Angle integrated calculated cross sections are then compared to the experimental data from this work in Table 1. A good agreement is observed for the population of the 2^+_1 and 3^-_1 states both for the ^{112}Sn benchmark and the ^{104}Sn case. This consistency gives significant credit to (i) the decrease by a factor ~ 2 of M_n for the $0^+ \rightarrow 2^+$ transition going from the stable ^{112}Sn to ^{104}Sn and (ii) the predominance of M_n over M_p for all Sn isotopes from stability to ^{102}Sn predicted by QRPA calculations. Note that the second conclusion differs from [14] where the nuclear contribution was roughly estimated from a macroscopic model as a correction to the Coulomb scattering cross section.

One may argue that the calculated M_p values are different from the measured ones for some tin isotopes (e.g. ^{112}Sn) and such an effect may impact our conclusions. We therefore performed additional cross section calculations only for ^{112}Sn (since for ^{104}Sn the measured and calculated M_p coincide) by keeping fixed the theoretical M_n and renormalizing M_p to the experimental value. This yields 5.8(12) and 3.4(7) mb for the cross section to the 2^+_1 and the tentatively assigned 3^-_1 state, respectively. The effect is sizable but conclusions are conserved: the decrease of the inelastic cross section is still predicted in agreement with the strong M_n reduction. Indeed, a simple relation exists between the inelastic scattering cross section σ_{inel} and $M_{n,p}$:

$$\sigma_{inel} \propto (b_n \times M_n + b_p \times M_p)^2 \quad (1)$$

where $b_{n,p}$ are the neutron and proton field strengths [20].

In the present work, the ratio of inelastic cross sections to the 2^+ of ^{112}Sn and ^{104}Sn is 1.7(10), while the ratio of theoretic-

Table 1

Gamma-transition energies and extracted inelastic scattering cross sections for excited states in ^{112}Sn and ^{104}Sn . Spin-parities displayed between parentheses are those suggested by the present analysis. Theoretical cross sections from QRPA calculations with the Gogny D1M interaction are shown for comparison.

^{112}Sn on H				
J^π	E_{ex} (keV)	E_γ (keV)	σ_{exp} (mb)	σ_{th} (mb)
2^+_1	1245	1245(15)	9.1(38)	6.5(13)
0^+_2	2175	930(30)	4.0(24)	< 0.1
4^+_1	2230	985(30)	3.6(26)	1.8(4)
3^-_1	2335	1090(30)	4.6(20)	3.6(7)
^{104}Sn on H				
J^π	E_{ex} (keV)	E_γ (keV)	σ_{exp} (mb)	σ_{th} (mb)
2^+_1	1260	1260(15)	5.4(24)	3.2(6)
4^+_1	1930	670(20)	4.2(8) $^{+0}_{-10}$	0.7(1)
(2^+_2)	2300	1040(20)	1.8(9)	0.3(1)
(3^-_1)	3210	1950(50)	3.8(14) $^{+10}_{-0}$	3.0(6)

cal estimates is 2.0(6). The strengths of proton and neutron fields are known to be proportional, with a factor that depends on the kind of probe and the beam energy [21]. We have calculated this value for several beam energies and found that the factor b_n/b_p is 2.0–2.5 at beam energy of ~ 130 MeV/u, while it approaches 3 at lower beam energies (10–50 MeV/u), in agreement with experimental findings [21]. Therefore, relation (1) can then be approximated by $\sigma_{inel} \sim b_p^2 \times (2.25 \times M_n + M_p)^2$. If we use this simple relation, we expect a reduction of the cross section to the 2^+ state by a factor 2.8(7) going from ^{112}Sn to ^{104}Sn . Within the error bars, the ratios are still consistent confirming the robustness of the information extracted from inelastic scattering cross sections.

In summary, we measured the inclusive proton-induced inelastic scattering of low lying states in ^{104}Sn , the first measurement of this kind in a light tin isotope. We performed a similar measurement with ^{112}Sn as a benchmark. We tentatively identify the transition at 1950(50) keV in ^{104}Sn with the decay of a 3^- state at 3210(50) keV, the first one observed in neutron deficient tin isotopes. The measurement is at the limits of feasibility, due to the low, although most intense worldwide, ^{104}Sn beam intensity. We have performed QRPA calculations with the Gogny D1M interaction and adopted them as input for the cross section calculation using the JLM convolution model. The QRPA calculations display a dominance of neutron over proton collectivity, with $M_n/M_p = 1.4$ and 1.6 for $^{104,112}\text{Sn}(2^+)$. We have observed a reduction in the population of the 2^+_1 state from ^{112}Sn to ^{104}Sn , in agreement with predictions. This gives credit to the interpretation of a strong neutron collectivity (M_n) reduction from ^{112}Sn to ^{104}Sn . The predicted isoscalar excitation of protons and neutrons suggests that the M_p ($L = 2$) plateau observed from stable tin isotopes to ^{106}Sn is induced by an increased neutron collectivity.

Acknowledgements

This work has been supported by the European Research Council through the ERC Starting Grant No. MINOS-258567 and by the ENSAR European FP7 Project No. 262010. A. Jungclaus acknowledges support from the Spanish Ministerio de Ciencia e Innovacion under Contracts No. FPA2009-13377-C02-02 and No. FPA2011-29854-C04-01. D. Sohler acknowledges travel support from Hungarian Scientific Research funds (Contracts No. K100835 and No. NN104543).

References

- [1] T. Motobayashi, et al., Phys. Lett. B 346 (1995) 9.
- [2] B. Bastin, et al., Phys. Rev. Lett. 99 (2007) 022503.

- [3] A. Obertelli, et al., Phys. Lett. B 633 (2006) 33.
- [4] C.B. Hinke, et al., Nature 486 (2012) 341.
- [5] K.L. Jones, et al., Nature 465 (2010) 454.
- [6] A. Banu, et al., Phys. Rev. C 72 (2005) 061305.
- [7] A. Ekström, et al., Phys. Rev. Lett. 101 (2008) 012502.
- [8] J. Cederkäll, et al., Phys. Rev. Lett. 98 (2007) 172501.
- [9] C. Vaman, et al., Phys. Rev. Lett. 99 (2007) 162501.
- [10] P. Doornenbal, et al., Phys. Rev. C 78 (2008) 031303.
- [11] R. Kumar, et al., Phys. Rev. C 81 (2010) 024306.
- [12] G. Guastalla, et al., Phys. Rev. Lett. 110 (2013) 172501.
- [13] V.M. Bader, et al., Phys. Rev. C 88 (2013) 051301.
- [14] P. Doornenbal, et al., Phys. Rev. C 90 (2014) 061302.
- [15] T. Bäck, et al., Phys. Rev. C 87 (2013) 031306.
- [16] A. Ansari, Phys. Lett. B 623 (2005) 37.
- [17] A. Ansari, P. Ring, Phys. Rev. C 74 (2006) 054313.
- [18] B.G. Carlsson, J. Toivanen, A. Pastore, Phys. Rev. C 86 (2012) 014307.
- [19] S. Péru, M. Martini, Eur. Phys. J. A 50 (2014) 88.
- [20] A. Bernstein, V. Brown, V. Madsen, Phys. Lett. B 103 (1981) 255.
- [21] A. Bernstein, V. Brown, V. Madsen, Comments Nucl. Part. Phys. 11 (1983) 203.
- [22] M. Kennedy, P. Cottle, K. Kemper, Phys. Rev. C 46 (1992) 5.
- [23] P. Blankert, H. Blok, J. Blok, Nucl. Phys. A 356 (1981) 74.
- [24] T. Kubo, et al., Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. 2012 (2012).
- [25] S. Takeuchi, T. Motobayashi, Y. Togano, M. Matsushita, N. Aoi, K. Demichi, H. Hasegawa, H. Murakami, Nucl. Instrum. Methods A 763 (2014) 596.
- [26] L. Audirac, et al., Phys. Rev. C 88 (2013) 041602.
- [27] S. Agostinelli, et al., Nucl. Instrum. Methods 506 (2003) 250.
- [28] NNDC, www.nndc.bnl.gov.
- [29] E. Khan, et al., Phys. Lett. B (ISSN 0370-2693) 490 (2000) 45.
- [30] R. Peterson, D. Perlman, Nucl. Phys. A 117 (1968) 185.
- [31] J.K. Dickens, E. Eichler, G.R. Satchler, Phys. Rev. 168 (1968) 1355.
- [32] S. Péru, H. Goutte, Phys. Rev. C 77 (2008) 044313.
- [33] S. Goriely, S. Hilaire, M. Girod, S. Péru, Phys. Rev. Lett. 102 (2009) 242501.
- [34] A. Jungclaus, et al., Phys. Lett. B 695 (2011) 110.
- [35] E. Bauge, et al., Phys. Rev. C 61 (2000) 034306.
- [36] E. Bauge, J.P. Delaroche, M. Girod, Phys. Rev. C 63 (2001) 024607.
- [37] S. van der Werf, et al., Phys. Lett. B 166 (1986) 372.
- [38] S. Kailas, P.P. Singh, D.L. Friesel, C.C. Foster, P. Schwandt, J. Wiggins, Phys. Rev. C 29 (1984) 2075.

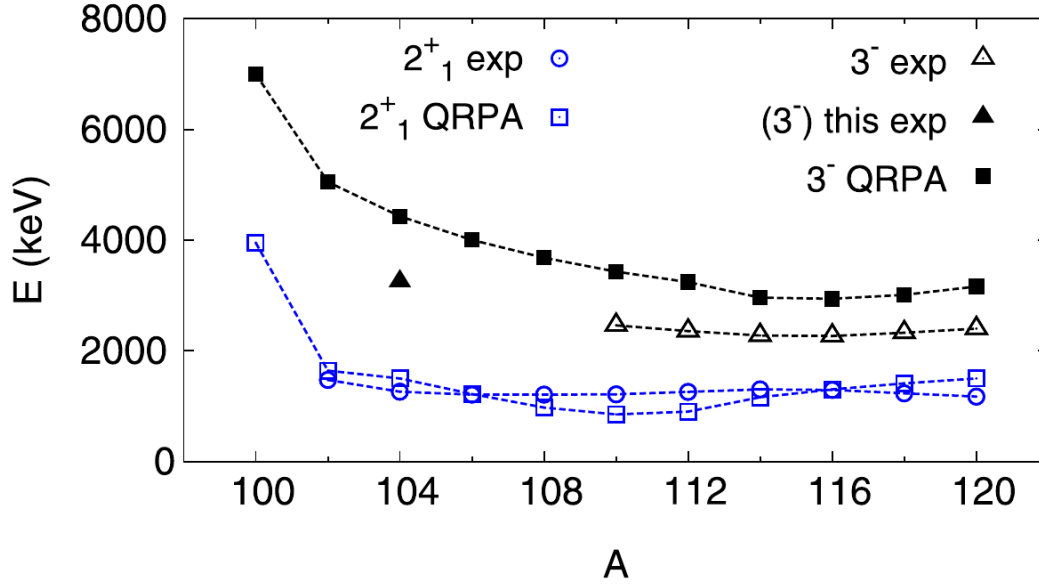


FIGURE 2-2 – Énergies des premiers états 2^+ et 3^- dans la chaîne isotopique des étains.

2.3 Contribution à la conférence P(ND)² : Perspective on Nuclear Data for the Next Decade

Afin de calculer des sections efficaces de façon la plus prédictive et indépendante des données possible, on recourt à des données calculées par des codes microscopiques, comme la QRPA. On calcule des densités de transitions qui sont ensuite utilisées pour construire un potentiel microscopique de transition. Une fois ce potentiel obtenu, il est possible de remonter aux sections efficaces. C'est le travail qui a été réalisé pour l'étude [DBH⁺15] publiée dans la revue *European Physical Journal A* et dont la version *postprint* est reproduite ici³. Dans cet article, les sections efficaces issues de la QRPA sont comparées à celles obtenues par des modèles phénoménologiques, ainsi que des données expérimentales pour les réactions (n, n') , (n, xn) et $(n, n'\gamma)$ de l'²³⁸U. Bien que présentant certaines faiblesses, notamment le manque de corrélations à deux phonons dans notre calcul QRPA, ou la non prise en compte des excitations de parité anormale par le modèle JLM,

3. Version publiée : <http://link.springer.com/article/10.1140/epja/i2015-15168-x>.

les sections efficaces issues de la QRPA présentent un accord satisfaisant avec les données expérimentales, surtout à plus haute énergie. Les résultats microscopiques prennent de l'importance dans le domaine des réactions, et la QRPA fait même son entrée dans le code TALYS.

Progress in microscopic direct reaction modeling of nucleon induced reactions

M. Dupuis, E. Bauge, S. Hilaire, F. Lechaftois, S. Péru, N. Pillet, C. Robin^a

CEA, DAM, DIF, Arpajon

Received: date / Revised version: date

Abstract. A microscopic nuclear reaction model is applied to neutron elastic and direct inelastic scatterings, and pre-equilibrium reaction. The JLM folding model is used with nuclear structure information calculated within the quasi-particle random phase approximation implemented with the Gogny D1S interaction. The folding model for direct inelastic scattering is extended to include rearrangement corrections stemming from both isoscalar and isovector density variations occurring during a transition. The quality of the predicted (n,n) , (n,n') , (n,xn) and $(n,n'\gamma)$ cross sections, as well as the generality of the present microscopic approach, shows that it is a powerful tool that can help improving nuclear reactions data quality. Short and long term perspectives are drawn to extend the present approach to more systems, to include missing reactions mechanisms, and to consistently treat both structure and reaction problems.

PACS. XX.XX.XX No PACS code given

1 Introduction

Numerous applications such as nuclear astrophysics, reactor studies, nuclear waste recycling and storage require a precise knowledge of nuclear reaction observables. Constant experimental and modeling efforts are needed to fulfill the increasing needs of accuracy within a reasonable time scale. For instance, integral reactor sensitivity studies have pointed out the need for more accurate ^{238}U inelastic cross sections and angular distributions [1].

Nuclear models are thus constantly improved to provide more accurate nuclear structure properties and reaction observables. Progress can be approached from three general perspectives. First, in refining parametrisations of phenomenological models. Second, in developing ab-initio inspired methods that rely on the closest to first principle, starting from the most fundamental knowledge on nucleon-nucleon interactions, and introducing controlled approximations to tackle the dynamical many-body problem. Third and finally in developing effective approaches, based on phenomenological two-body interactions, used within many-body theories to predict coherently nuclear structure properties and reaction observables.

One of the most widely used phenomenological model is the phenomenological optical potential fitted to reproduce elastic scattering observables and used in the description of all inelastic processes. Intensive work has been led since the 1950's and refinement are still being performed nowadays, aiming at a global parametrisation applicable

to light projectiles and to a wide range of energies and of target masses.

Developments were also dedicated to the dispersive optical potential that allows to consistently fit negative and positive energy nucleon scattering observables. Recent applications focus on light nuclei such as n - ^9Be reactions [2], as well as actinides (nucleon scattering on ^{232}Th up to 200 MeV [3]). Elastic, inelastic and charge exchange observables for nucleon scattering on Cr, Fe, Ni isotopes were also successfully described within a dispersive coupled-channels optical-model [4]. A phenomenological non-local dispersive optical potential was also developed to describe all single particle properties in ^{40}Ca [5].

In general, in order to provide accurate evaluation of nuclear reaction observables for a wide range of incident energies and nuclear masses, global nuclear reaction codes, such as TALYS [6,7] and EMPIRE [8] are used. These reaction codes gather and link together nuclear reactions model to describe all reaction mechanisms of importance in nucleon (and some light nuclei) induced reactions. The models embedded in these codes are usually (but not only) phenomenological. They have been successfully used to produce reliable evaluated data files (see refs.[9,10] for a few examples) by choosing the right set of parameters and ingredients to account for a given amount of measurements. These models are in essence only valid in energies and mass regions where measurements are available and description of reaction mechanisms are simplified with respect to more fundamental approaches.

Ab-initio approaches based on chiral Hamiltonian were recently applied to determine the optical potential for nucleon scattering in nuclear matter (NM) [11]. Applications

^a Present address: Department of Physics, Western Michigan University, Kalamazoo MI 49008-5252 USA

in finite nuclei were also performed dealing with nucleon- ^4He scattering with three-nucleon forces [12]. Many features of empirical dispersive optical potentials for nucleon scattering off $^{40,48,60}\text{Ca}$ isotopes were explained using a microscopic Faddeev-random-phase approximation and realistic nucleon-nucleon interactions [13]. Collision dynamics of four-nucleon systems has recently been described solving Faddeev-Yakubovsky equations with the complex-scaling method [14]. These examples show that application fields for ab-initio methods are enlarging on a daily basis. Yet they are, as for today, still limited to light- and medium-mass nuclei and restricted to a few nuclear structure properties and reaction observables.

At present, microscopic methods enabling a unified description of many phenomena in nuclear structure and dynamics over the entire chart of nuclei [15] are based on nuclear mean field theories, such as Hartree-Fock (HF) and Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB), and beyond mean field theories, such as the Random Phase Approximation (RPA), the Quasiparticle-RPA (QRPA), and the Generator Coordinate method. They are based upon a phenomenological effective nucleon-nucleon interaction, such as Skyrme and Gogny forces (see [16,17] and references therein), the parameters of which are fitted on a restricted key nuclear structure observables ensemble. They provide a satisfactory account of ground states, low-lying states, and giant resonances properties for nuclear masses covering almost all the nuclear landscape (see [15,18–20] for a few, but not exhaustive, examples). An alternative to mean field and beyond mean field methods resides in the shell model approach which, implemented with two- and three-body contributions, provides a quantitative and qualitative accurate description of many nuclear structure properties [21]. Approaches based on effective interaction are also applied to nuclear reaction modeling. An early derivation of the optical potential, from a Green's function formalism that includes RPA correlations, was achieved in [22]. An improved implementation of this method recently provided an accurate prediction of nucleon elastic scattering off ^{40}Ca observables using the Gogny D1S interaction as the sole input [23]. This work is presently devoted to nucleon elastic scattering off doubly-magic nuclei and will be soon extended to spherical open-shell nuclei and axially deformed nuclei [24].

Microscopic reaction models developed since late 1970's start from nuclear structure ingredients, derived from shell model or mean field and beyond mean field theories, and use them in a reaction model through a folding procedure. The effective nucleon-nucleon interaction is generally represented by a g -matrix defined in NM. Within the last two decades, such approaches have reached a good level of accuracy, and now even offer the opportunity to challenge precisely nuclear structure predictions. The Melbourne g -matrix [25] was for instance used with HF and RPA nuclear structure ingredients, calculated with the Gogny D1S interaction, to successfully predict elastic scattering observables [26], and inelastic scattering to discrete states cross sections within the Distorted Wave Born Approximation (DWBA) [27]. Work based on density dependent

M3Y effective interactions is widely performed in inelastic nucleon scattering [28–30] and in nucleus-nucleus scattering studies using a double-folding approach [31]. However these NM approaches are less suited to nucleon scattering studies below 40 MeV. An alternative approach is the JLM (Jeukenne Lejeune Mahaux) folding model based on an optical potential for nucleon scattering in NM [32]. Components of this interaction were adjusted to fit nucleon elastic scattering and charge exchange observables between 1 keV and 200 MeV [33,34]. It has been successfully applied to inelastic scattering to discrete states in spherical nuclei using RPA or or Quasiparticle-RPA (QRPA) radial transition densities [35,36]. Inelastic scattering to excitations belonging to the ground state rotational band (GSRB) in axial nuclei has also been successfully described within a coupled channels framework, using HFB deformed densities [37,33,38]. An extension of this model to handle direct inelastic scattering to rotational bands built on intrinsic excitations was also reported in [39]. This approach consistently accounted for inelastic scattering to low energy discrete excitations, to giant resonances and for direct pre-equilibrium emission. In this application, nuclear structure ingredients needed by the JLM folding model, namely the diagonal and transition matter densities, were calculated within HFB and QRPA models implemented with the D1S interaction [40]. The JLM folding model approach was recently successfully applied to the analysis of proton inelastic scattering off the halo nuclei $^6,^8\text{He}$ cross sections, with densities calculated from the no-core shell model and treating explicitly the coupling effects induced by the weak binding of the unstable nuclei [41].

We are interested here in developing direct inelastic scattering models that can improve predictions of all observables linked to neutron induced reaction on actinides for energies of interest in applications, that is below about 30 MeV. Improving modeling can help the interpretation of newly measured $(n,xn\gamma)$ cross sections [42–44]. It can also provide improved (n,n') and $(n,2n)$ cross sections data, that can be deduced from $(n,n'\gamma)$ and $(n,2n\gamma)$ measurements through a proper modeling. To fulfill the increasing need of accuracy in nuclear data files in a rational time scale, the development of microscopic reaction models based on reliable nuclear structure ingredients, predicted from mean field and beyond mean field methods, offers an excellent compromise between phenomenological models and ab-initio approaches. First, reducing the amount of phenomenology in the various steps of the modeling would provide a better understanding of the different reaction mechanisms contribution to chosen observables values. Second, it would lead to more reliable predictions for incident energy and/or mass for which experiments are lacking to constrain the models. Finally, effective approaches account for nuclear structure properties even for heavy masses nuclei such as actinides that are needed to perform nuclear reaction calculations useful for nuclear energy applications.

The JLM folding model is well suited to study neutron induced reactions on actinides in the energy range 1 keV

to 200 MeV. We report here on various applications of this model for neutron elastic and inelastic scatterings on spherical and axially deformed targets. Since the effective interaction used in the folding model depends on the nucleus density, the density variations that occur during the inelastic process change the effective interaction. This effect is accounted for introducing the so-called "rearrangement" [45,46] corrections when the transition potential for the inelastic process is calculated. In the present work, rearrangement corrections stemming from both isoscalar and isovector target densities variations have been considered. For calculations with actinides, transitions to excited spin up to $J = 16\hbar$ have been introduced and allow to improve the calculation of $(n,n'\gamma)$ cross-sections that are known to be very sensitive to spin distributions of the residual nucleus [47]. In these calculations, improved QRPA results, with respect to those reported in [40], have been used. Future extensions of the present work will also be detailed.

The main characteristics of the JLM folding model applied to the description of nucleon elastic and inelastic scatterings off spherical nuclei are reminded in sect. 2. We characterize the rearrangement's corrections impact on cross sections for inelastic scattering to discrete states in ^{208}Pb . Section 3 is dedicated to the application of the JLM folding model to axially deformed nuclei. The QRPA nuclear structure model providing the relevant spectroscopic ingredients is detailed in sect. 3.2 where a comparison between predictions and measurements is performed for reduced transition probabilities in ^{238}U for low lying states. Application to neutron induced reactions off ^{238}U are presented in sects. 3.1, 3.4 and 3.5, respectively for neutron elastic and inelastic scattering to excitations belonging to the GSRB, for the direct (n,n') contribution to the (n,xn) double differential cross sections, and for the modeling of $^{238}\text{U}(n,n'\gamma)$ reactions. Section 4 is dedicated to perspectives where we explain foreseen improvements for the present modeling of pre-equilibrium emission and low energy neutron scattering off actinides. An application of the present microscopic reaction model with nuclear structure inputs calculated from the multiparticle-multihole configuration mixing method, particularly suited to the description of light nuclei, is also discussed and illustrated. Directions for a consistent description of both nuclear structure and nucleon scattering based on nucleon-nucleon effective interactions such as the Gogny force are also provided. General conclusions are drawn in sect. 5.

2 JLM folding model

In this part, we briefly review the JLM folding model [32] applied to elastic and inelastic neutron scatterings on spherical nuclei, focusing on rearrangement corrections for inelastic scattering.

2.1 Effective interaction

The JLM folding model is based on the Brueckner-Hartree-Fock (BHF) theory of NM. J.-P. Jeukenne *et al.* [32] de-

rived a mass operator which depends on the NM density. An on-shell approximation provides the local optical model potential for nucleon scattering in NM. Since exchange components are explicitly treated at the BHF level [48], non-locality effects are approximately embedded in the energy dependence of the interaction amplitudes. The optical potential for the elastic scattering of a nucleon with an energy E in a NM of density $\rho = \rho_n + \rho_p$ reads:

$$V^{\text{NM}}(\rho_n, \rho_p, E) = V_0(\rho, E) + iW_0(\rho, E) + \tau\alpha(\rho_n, \rho_p) (V_1(\rho, E) + iW_1(\rho, E)) , \quad (1)$$

where $\tau = +1(-1)$ for incident neutron (proton). The parametric form of the isoscalar (IS) $V_0(\rho, E)$ and $W_0(\rho, E)$, and the isovector (IV) $V_1(\rho, E)$ and $W_1(\rho, E)$ components are provided in [32]. The function $\alpha(\rho_n, \rho_p) = \frac{\rho_n - \rho_p}{\rho}$ is the asymmetry parameter.

An optical potential for nucleon scattering on a finite nuclei can be determined from this NM optical potential. J.-P. Jeukenne *et al.* defined a two-body effective interaction that provides a NM optical potential equivalent to eq.(1) when folded with matter densities. This interaction reads

$$V(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \rho_n, \rho_p, E) = \frac{V^{\text{NM}}(\rho_n, \rho_p, E)}{\rho} (t\sqrt{\pi})^{-3} e^{\frac{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^2}{t^2}} , \quad (2)$$

where $\mathbf{r}$ is the projectile coordinate and $\mathbf{r}'$ the struck target nucleon coordinate. Note that the Gaussian form factors, introduced in [32], provide adequate root mean square radii for real potentials calculated in finite nuclei.

The initial parametrisation provided in [32] (eqs. (1) and (2)) was lately altered adding the freedom to renormalize each potential components $V_{0/1}$ and $W_{0/1}$ in eq. (1), to improve agreement with measured elastic scattering observables. Various studies were then performed, defining various normalization sets. Recently, a global parameter set was obtained by E. Bauge *et al.* [34], who performed a Lane-consistent description of nucleon elastic scattering as well as charge exchange observables, valid in the incident energy range 1 keV-200 MeV for spherical and near-spherical targets with $A=40$ to 209. The method presented in this work is referred to as the JLM-Bruyères (JLMB) folding model. The JLMB optical potential reads:

$$V_{\tau}^{\text{JLMB}}(\rho_n, \rho_p, E) = \lambda_V(E) [V_0(\rho, E) + \tau\lambda_{V_1}(E)\alpha(\rho_n, \rho_p)V_1(\rho, E)] + i\lambda_W(E) [W_0(\rho, E) + \tau\lambda_{W_1}(E)\alpha(\rho_n, \rho_p)W_1(\rho, E)] . \quad (3)$$

The energy dependent parameters $\lambda_V, \lambda_{V_1}, \lambda_W, \lambda_{W_1}$ and the ranges t_V, t_W are provided in [34,49]. As the JLM model provides no spin-orbit interaction, we rely on the specific prescription of Scheerbaum [50] for scattering off spherical nuclei (see [51,34] for more details).

2.2 Optical potentials

Introducing the radial ground state (GS) density

$$\rho_{\tau_z}(\mathbf{r}) = \langle 0 | \sum_{\sigma} \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}, \sigma, \tau_z) \Psi(\mathbf{r}, \sigma, \tau_z) | 0 \rangle, \quad (4)$$

where $\Psi^{\dagger}/\Psi(\mathbf{r}, \sigma, \tau_z)$ is the field creation/annihilation operator of a nucleon of spin and isospin projections σ and τ_z at the position $\mathbf{r}$, the optical potential at vector point $\mathbf{r}$ for an incident energy E is defined as:

$$U(\mathbf{r}, E) = \int V(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E, \rho_n^{(x)}, \rho_p^{(x)}) \rho(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \quad (5)$$

Superscript (x) stands for the selected LDA prescription. In the application displayed in the present paper, we select the LDA prescription defining the density in eq.(5) at $\mathbf{r}'$, the struck target nucleon position, since it was the one used in [34] where the JLMB parameters set was fitted.

2.3 Inelastic scattering

Studies of inelastic scattering within the DWBA framework and a folding model approach are often performed identifying the transition potential to the potential given by eq.(5) where the GS density is replaced by the transition density [52], namely

$$U_{\text{tr}}(\mathbf{r}, E) = \int V(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E, \rho) \rho_{\text{tr}}(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \quad (6)$$

where $\rho_{\text{tr}} = \sum_{\tau_z} \rho_{\tau_z}^{(0,N)}$ is the IS transition density for a transition between the target GS $|0\rangle$ and an excited state $|N\rangle$ with

$$\rho_{\tau_z}^{(0,N)}(\mathbf{r}) = \langle N | \sum_{\sigma} \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}, \sigma, \tau_z) \Psi(\mathbf{r}, \sigma, \tau_z) | 0 \rangle. \quad (7)$$

Starting from the consideration that the use of the Brueckner g-matrix as the transition interaction lacks a theoretical background, T. Cheon *et al.* provided in [45] a derivation of the transition potential, for inelastic scattering, from an optical potential built with a folding model. They showed that the effective interaction density-dependence generates a medium correction to the transition potential, that is the rearrangement term.

The macroscopic derivation of rearrangement corrections to the transition potential first provided in [45] for IS transitions was extended to IV transitions in [46]. T. Cheon *et al.* also provided in [46] a derivation of this medium correction in the framework of the Watson's multiple scattering theory, limited to IS transitions, that provides the same expressions as those first intuited from the collective model approach in [45].

We provide here one possible derivation of the transition potential with dynamical corrections, based on the same assumptions as those used in [45]. The microscopic

optical potential results from the folding of a density-dependent effective interaction with the GS radial density. If we do not consider isospin, that reads:

$$U_{\text{opt}} = V(\rho) \rho. \quad (8)$$

where $\rho = \sum_{\tau_z} \rho_{\tau_z}$.

The transition density can be expressed as a variation of the GS density with respect to the surface collective variable R , namely

$$\rho_{\text{tr}} = \frac{d\rho}{dR} \delta R. \quad (9)$$

Besides, collective models for inelastic scattering [52] assume that the shape of the transition potential follows that of the matter transition density. Combining these considerations leads to identify the transition potential as the derivative of the optical potential with respect to the surface collective variable R , namely

$$U_{\text{tr}} = \frac{\delta U_{\text{opt}}}{\delta R} \delta R, \quad (10)$$

which can be, considering eq.(9), written as

$$U_{\text{tr}} = \frac{\delta U_{\text{opt}}}{\delta \rho} \rho_{\text{tr}}. \quad (11)$$

Combining eqs. (8) and (11) leads to the microscopic transition potential expression:

$$U_{\text{tr}} = \left(V(\rho) + \rho \frac{dV(\rho)}{d\rho} \right) \rho_{\text{tr}}. \quad (12)$$

The rearrangement term stemming from the density-dependence of the effective interaction is:

$$U_{\text{tr}}^R = \rho \frac{dV(\rho)}{d\rho} \rho_{\text{tr}}. \quad (13)$$

We now apply these considerations with the effective interaction, eq. (3), of the JLMB folding model. In the following, we do not write explicitly energy-dependencies. Introducing the factors F_0 and F_1 respectively defined as:

$$F_0(\rho) = \lambda_V V_0(\rho) + i\lambda_W W_0(\rho) \quad (14)$$

$$F_1(\rho) = \frac{1}{\rho} [\lambda_V \lambda_{V_1} V_1(\rho) + i\lambda_W \lambda_{W_1} W_1(\rho)]. \quad (15)$$

the JLMB interaction amplitude $V(\rho_n, \rho_p)$ in eq. (2) can be expressed in terms of ρ and the IV density $\rho_1 = \rho_n - \rho_p$ as:

$$V(\rho, \rho_1) = F_0(\rho) + \tau \rho_1 F_1(\rho). \quad (16)$$

The transition potential for an excitation $|N\rangle$ is then identified as the derivative of the potential $U_{\text{opt}} = \rho V(\rho, \rho_1)$ with respect to the IS and IV densities, namely

$$U_{\text{tr}} = \frac{\partial U_{\text{opt}}}{\partial \rho} \delta \rho + \frac{\partial U_{\text{opt}}}{\partial \rho_1} \delta \rho_1 \quad (17)$$

where $\delta\rho = \rho_n^{(0,N)} + \rho_p^{(0,N)} = \rho^{(0,N)}$ and $\delta\rho_1 = \rho_n^{(0,N)} - \rho_p^{(0,N)} = \rho_1^{(0,N)}$. Combining eqs.(16) and (17) gives:

$$U_{\text{tr}} = U_{\text{tr}}^{(0)} + U_{\text{tr}}^{(R)}, \quad (18)$$

where

$$U_{\text{tr}}^{(0)} = \rho^{(0,N)} F_0(\rho) + \tau \rho_1^{(0,N)} F_1(\rho), \quad (19)$$

$$U_{\text{tr}}^{(R)} = \rho^{(0,N)} \left(\rho \frac{\partial F_0(\rho)}{\partial \rho} + \tau \rho_1 \frac{\partial F_1(\rho)}{\partial \rho} \right), \quad (20)$$

The first term in eq. (20) corresponds to the rearrangement correction provided in the work of T. Cheon *et al.* [45] who considered only IS density variations. The second term in eq. (20) arises from the IV density's variation. The transition potential (18) corresponds to the one derived in [46] for isospin-dependent collective modes.

The transition potential $U_{\text{tr}}^{(0)} + U_{\text{tr}}^{(R)}$ implemented with a g-matrix was used in [45] to predict 135 MeV proton inelastic scattering differential cross sections to the isoscalar 3_1^- excitation in ^{16}O . The rearrangement component was then shown to slightly impact both magnitude and shape of the angular distributions. Rearrangement corrections were also used in the work of D. T. Khoa *et al.* [31] in nucleus-nucleus scattering with density-dependent M3Y interactions.

Here we used the JLM folding approach to describe neutron inelastic scattering off ^{208}Pb below 20 MeV. Calculations are performed with the nuclear reaction code ECIS [53]. We compare in Fig.1, measured and calculated differential cross sections for neutron inelastic scattering off ^{208}Pb for the excitation of the Yrast 2_1^+ state. Calculations performed with the full transition potential (eq. (18), full lines), or the potential without dynamical corrections $U_{\text{tr}}^{(0)}$ (eq. (19), dashed lines) are plotted. The RPA model with the Gogny interaction provides needed GS and transition matter densities. We remind that the RPA model closely accounts for both measured reduced transition probability $B(E2)$ and radial charge transition density [54]. As seen on Fig.1, calculations performed with rearrangement corrections (full curves) reproduce the magnitude of the measured cross section well. In contrast, ignoring rearrangement corrections (dashed curves) leads to over-predicting the cross section magnitude by a factor 2. Angular shapes are nicely reproduced though we can note some local discrepancies at very forward and backward angles. Note that the calculation at 9.5 MeV is slightly out of phase for angles above 60° .

In order to understand the impact on rearrangement corrections on inelastic angular distributions, we display on Fig.2 the real and imaginary components of the transition potential for 12 MeV neutron inelastic scattering off ^{208}Pb with the 2_1^+ excitation. On both plots, the full real and imaginary transition potentials (eq. (18), full lines) are compared to the potentials without dynamical corrections (eq. (19), dashed lines). At the surface ($r > 7$ fm), rearrangement corrections essentially reduce the potentials magnitude but do not significantly change their shape. At low incident energy, neutron scattering is mainly sensitive to the tail and the surface of the potential. Consequently,

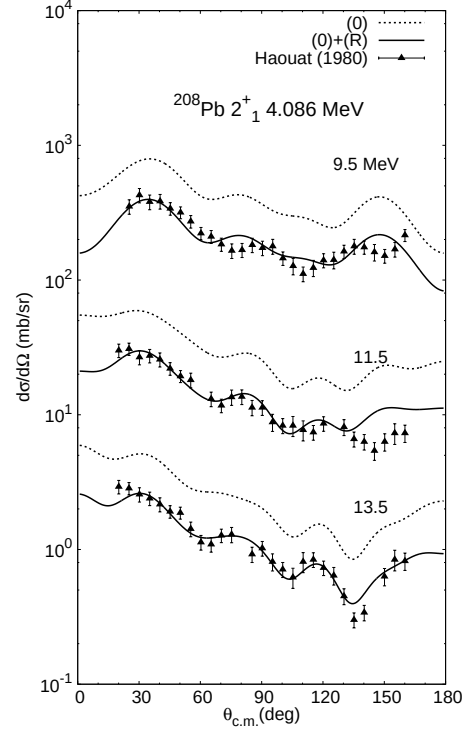


Fig. 1. Calculated neutron inelastic differential cross sections for the 2_1^+ state in ^{208}Pb are compared to measurements [55, 56]. Calculations performed with and without rearrangement are compared (see sect. 2.3 for details).

the cross section magnitudes follow the variation of the potential magnitude at the nucleus surface. Note that rearrangement corrections slightly move potentials maxima at a larger radius. As it can be seen on Fig. 1, this property does not impact on cross sections shape.

In conclusion, this study shows that a reliable inelastic cross section calculation in the framework of folding models requires to consider rearrangement corrections.

However, impact of these corrections may change for larger incident energies, when the incident nucleon probes the nucleus more deeply. A careful study of the impact of these rearrangement corrections with respect to the incident energy, the multipolarity and the isoscalar/isovector nature of the transition for both neutron and proton inelastic scattering will be provided in [55].

3 Scattering off axially deformed nuclei

The folding model presented in sect. 2 is now applied to elastic and inelastic scatterings from axially deformed nuclei. Elastic scattering and inelastic scattering to low energy excitation belonging to the GSRB are considered in sect. 3.1. QRPA response functions in ^{238}U are detailed in sect. 3.2 and used in an inelastic scattering model for rotational bands built on QRPA intrinsic excitations in sect. 3.3. Applications to $^{238}\text{U}(n,xn)$ and $(n,n'\gamma)$ reactions are detailed in 3.4 and 3.5.

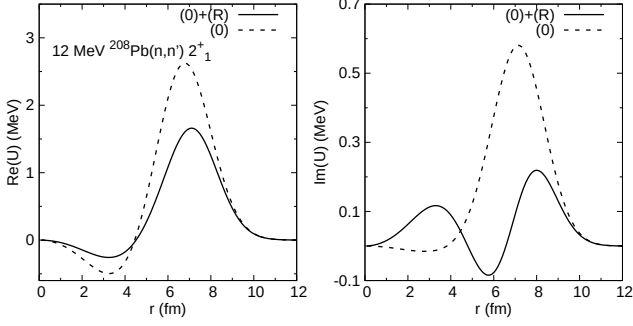


Fig. 2. Real (left panel) and imaginary (right panel) central transition potential for 12 MeV ^{208}Pb (n,n') to the 2_1^+ excited state. Potential calculated with and without rearrangement corrections are compared (see sect. 2.3 for details)

3.1 Elastic and inelastic scattering to the ground state rotational band

Nucleon scattering off axially deformed targets are performed within the JLM folding model in a coupled channel framework. Early studies [37], that used HFB deformed densities, were successful in describing elastic scattering and inelastic scattering to excitations belonging to the GSRB for various actinides. More recently, E. Bauge *et al.* [33, 38] successfully predicted neutron and proton differential cross sections for scattering to the GSRB states up to a spin 8^+ , with the parameter set defined in [51]. Details for application of the JLM folding model for axially deformed nuclei are provided in [37, 33, 38]. We remind here that the GS density defined in eq. (4) is axially deformed and its multipole expansion reads:

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{L=0,2,4,\dots} P_L(\cos\theta) \rho_L(r) \quad (21)$$

where $P_L(\cos\theta)$ is the Legendre polynomial of order L . Introducing this expression in the optical potential formula, eq. (5), provides the deformed optical potential in the body-fixed frame. A projection on the total angular momentum of this potential provides the relevant coupling potentials in the center of mass frame. We present an application for neutron scattering off ^{238}U . Measurements usually do not resolve cross sections for different members of the GSRB for this nucleus for incident energies above a few MeV [37, 57]. Only data corresponding to the sum of the elastic cross sections and the first 2^+ and 4^+ excited states are available. We compare in Fig.3 experimental data to predictions made with the present JLM folding model, with density calculated within the HFB framework with the D1S interaction. Cross sections are calculated with the ECIS code [53]. Predictions nicely follow measurements. Again, the Lane-consistent parametrisation from [34] was used with the LDA at the target position. The present model slightly differs from the studies in [38] which used the JLMB parameter set from [51] and a different LDA prescription. Note that it was not necessary here to introduce an additional renormalisation of

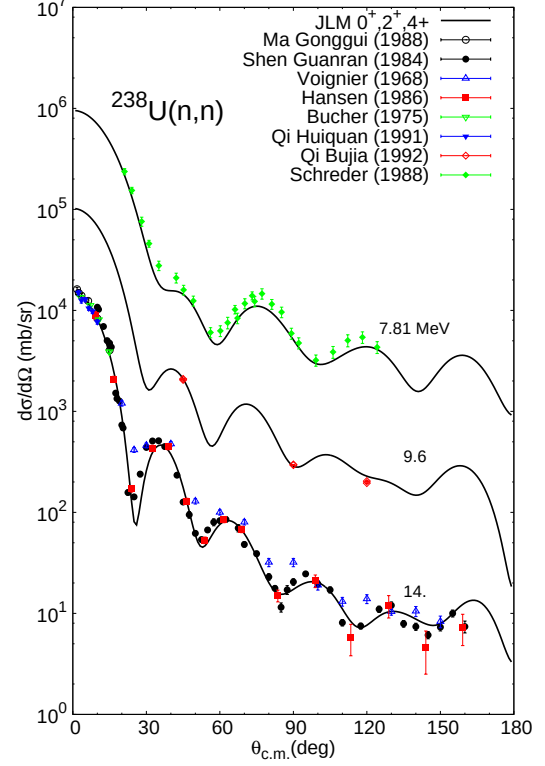


Fig. 3. Differential cross sections for neutron scattering off ^{238}U . The sum of the elastic and 2_1^+ , 4_1^+ inelastic contributions are compared to available data from EXFOR.

the imaginary potential, in contrast to the work [38] where a reduction of 12% of the imaginary part was mandatory to account for measured differential cross sections. In the present modeling, optical potential are calculated using the HFB densities and not QRPA correlated densities. A comparison of the microscopic modeling of elastic scattering based on HF and RPA densities for doubly-closed shell nuclei, performed in [26], reveals that RPA correlations can not be neglected in nucleon elastic scattering calculations for incident energies above 100 MeV, while the effect at lower energies were very thin. We thus believe that neglecting QRPA correlations in the GS density is an approximation suited to describe neutron scattering for energies below 30 MeV considered in the present work.

3.2 QRPA for axially-deformed targets

The (Q)RPA method implemented with Gogny-type interaction has proven to be particularly reliable in describing spectroscopic properties of Yrast as well as giant resonant states for a wide range of nuclei which are not too soft with respect to β deformation (see [20] for a review of QRPA predictions). Full details on the model implementation can be found in [58, 20] and we remind here the method's main features and define the nuclear structure ingredients needed by the nuclear reaction model. Axially-

symmetric-deformed HFB calculations are performed imposing time reversal, TP_2 , axial and left-right symmetries. Projection K of the angular momentum J on the symmetry axis and the parity π are thus good quantum numbers. Within the QRPA formalism, the target's intrinsic excitations correspond to phonons built on the correlated GS $|0_I\rangle$. The reaction model developed in the present work is limited to one-phonon excitations, that read:

$$|\alpha K^\pi\rangle = \Theta_{\alpha K^\pi}^\dagger |0_I\rangle = \frac{1}{2} \sum_{ij \in (K^\pi)} (X_{ij}^{\alpha K^\pi} \eta_{ip_i \Omega_i}^\dagger \eta_{jp_j \Omega_j}^\dagger - (-)^K Y_{ij}^{\alpha K^\pi} \eta_{ip_i - \Omega_i} \eta_{jp_j - \Omega_j}) |0_I\rangle, \quad (22)$$

with $\Theta_{\alpha K^\pi} |0_I\rangle = 0$. Projections Ω and parities p of the quasi-particle creation (annihilation) pair operators $\eta_i^\dagger \eta_j$ ($\eta_i \eta_j$) are such that $\Omega_i + \Omega_j = K$ and $p_i p_j = \pi$. For an even-even nucleus, the GS is such as $K^\pi = 0^+$.

Intrinsic states projected over the total angular momentum of states read, for $K = 0$

$$|\alpha JMK^\pi\rangle = \sqrt{\frac{2J+1}{8\pi^2}} \int d\Omega \mathcal{D}_{M0}^J(\Omega) R(\Omega) |\alpha 0^+\rangle, \quad (23)$$

and for $K \neq 0$

$$|\alpha JMK^\pi\rangle = \sqrt{\frac{2J+1}{16\pi^2}} \int d\Omega \mathcal{D}_{MK}^J(\Omega) R(\Omega) |\alpha K^\pi\rangle + (-)^{J+K} \mathcal{D}_{M-K}^J(\Omega) R(\Omega) |\alpha \bar{K}^\pi\rangle, \quad (24)$$

where the $\mathcal{D}_{MK}^J$'s are the Wigner rotation matrix elements, and $R(\Omega)$ is the rotation operator. For the GS $|\bar{0}\rangle$ and each intrinsic excitation (eq. (22)), projected states defined in eqs.(23) and (24) are identified to a rotational band in the laboratory frame. States belonging to these bands satisfy: $J^\pi \geq K^\pi$ if $K > 0$, $J^\pi = 0^+, 2^+, 4^+ \dots$ if $K^\pi = 0^+$, and $J^\pi = 1^-, 3^-, 5^- \dots$ if $K^\pi = 0^-$. In the present work, the excitation energy in the laboratory frame of a state $|\alpha JMK^\pi\rangle$ is approximated by $E_{\alpha K J^\pi} = E_{\alpha K^\pi} + \frac{J(J+1) - K^2}{2\mathcal{I}}$, where the energies $E_{\alpha K^\pi}$ are the QRPA eigen-values, and $\mathcal{I}$ is approximated by the moment of inertia of the target in its GS.

In the intrinsic frame, the radial GS density $\rho_\tau^{0_I}$ and the transition density $\rho_\tau^{0_I, \alpha K^\pi}(\mathbf{r})$ read

$$\rho_\tau^{0_I}(\mathbf{r}) = \langle 0_I | \sum_\sigma \Psi^\dagger(\mathbf{r}, \sigma, \tau) \Psi(\mathbf{r}, \sigma, \tau) | 0_I \rangle, \quad (25)$$

$$\rho_\tau^{0_I, \alpha K^\pi}(\mathbf{r}) = \langle \alpha K^\pi | \sum_\sigma \Psi^\dagger(\mathbf{r}, \sigma, \tau) \Psi(\mathbf{r}, \sigma, \tau) | 0_I \rangle. \quad (26)$$

where $\tau = +/ - \frac{1}{2}$ for neutron/proton.

In the laboratory frame, the reduced charge transition probability for a transition between the GS and an excited state, for a momentum transfer such as $L > 1$ and $\pi =$

$(-)^L$, reads

$$B(E_L \uparrow) = e^2 \sum_M \left| \langle \alpha JMK^\pi | \sum_{i=1}^A \left(\frac{1}{2} - \tau \right) r_i^L Y_M^L(\Omega_i) | J=0, K^\pi=0^+ \rangle_{GS} \right|^2. \quad (27)$$

QRPA calculations with the D1S interaction were performed for ^{238}U in an harmonic oscillator basis with 13 major shells (see details in [40,20]). Note that in [40] the Coulomb interaction in QRPA was not completely consistent with HFB calculations. A consistent implementation of the Coulomb interaction revealed that response functions at low energy were strongly affected in the case of actinides, while states with energies above 1 MeV, including all giant resonances, were not. Results for lighter nuclei were only very slightly changed. Note that a factor 4 was also omitted in the determination of $B(E3)$ probabilities provided in [40]. We thus discuss here reduced charge transition probabilities, eq.(27), for low energy excitations in ^{238}U obtained with the QRPA/D1S code implemented with the accurate coulomb interaction. We display in Fig.4 predicted $B(EL)$ values for transitions between the GS to $J^\pi = 2^+$ and 3^- states built from the first intrinsic states with quantum numbers $K^\pi = 0^-, 1^-, 2^-$ and $K^\pi = 0^+, 1^+, 2^+$, respectively. Predicted probabilities (red crosses) are in very good agreement with measurements (symbols). This prediction, along with the results depicted in [40,20] about giant resonances in heavy axially deformed nuclei, give us confidence on the ability of the present QRPA calculation to describe accurately the key nuclear structure ingredients, such as transition probabilities, needed by our reaction model.

3.3 Inelastic scattering for intrinsic excitations

We consider a coupling scheme including the GSRB and one rotational band built on an intrinsic excitation. The coupled channels equation for a particular channel α reads:

$$[T + U_{\alpha, \alpha}(\mathbf{r})] \Psi_\alpha(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha' \neq \alpha} U_{\alpha', \alpha}(\mathbf{r}) \Psi_{\alpha'}(\mathbf{r}) + \sum_\beta U_{\beta, \alpha}(\mathbf{r}) \Psi_\beta(\mathbf{r}), \quad (28)$$

where spin and isospin coordinates have been discarded for simplicity. $\Psi_\alpha(\mathbf{r})$ is the wave function of the relative motion in the channel α and in the center of mass.

The sum $\sum_{\alpha' \neq \alpha}$ stands for couplings inside a rotational band (intra-band couplings), and $\sum_\beta$ for couplings between two rotational bands (inter-bands couplings). Intra-band couplings include the diagonal (optical) potentials $U_{\alpha, \alpha}$ and the transition potentials $U_{\alpha, \alpha'}$ which are calculated following the method exposed in sect. 3.1. Inter-bands transition potentials $U_{\alpha, \beta}$ are calculated from eq.

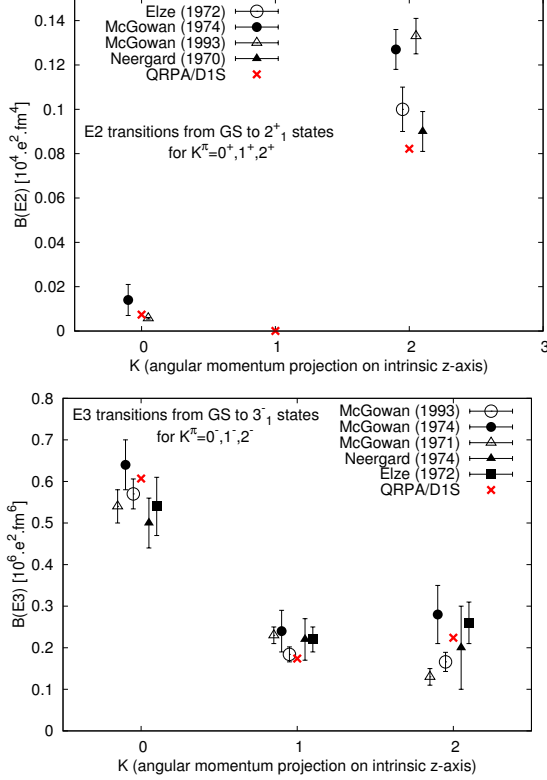


Fig. 4. Calculated reduced transition probabilities for transition from the GS to quadrupole (top panel) and octupole (bottom panel) excitations in ^{238}U compared to measured values (black symbols). X-axis corresponds to the total angular momentum z-projection K .

(18) where ρ_τ and $\rho_\tau^{(0,N)}$ are the ground and transition densities defined in the body-fixed frame by eq.(25). A multipole expansion of the resulting deformed transition potentials provides the relevant coupling potential in the center of mass frame. Explicit expression of the coupling potential, including geometric coefficients, will be provided in [59].

A similar method was applied in [39] where the direct (n,n') component of the $^{238}\text{U}(n,xn)$ double differential cross sections was calculated considering all QRPA intrinsic excitations up to a total angular momentum $J = 8\hbar$ and a transition potential given by eq. (19). We report in the next two sections an extended calculation which includes the rearrangement corrections to the transition potential provided by eq. (20), as well as the corrected QRPA transition densities presented in sect. 3.2. Excitations up to $J = 16\hbar$, that involve QRPA calculations for $K = 0$ to 16 for both parities, are considered. Distinct coupled channels calculations are performed with the code ECIS [53] for each solution of the QRPA equations (eq. (22)). This approach neglects the couplings between rotational bands built on intrinsic excitations. Next sections are dedicated to the application of this model to the study of (n,xn) and $(n,n'\gamma)$ cross-sections.

3.4 $^{238}\text{U}(n,xn)$ cross sections

This section is devoted to the analysis of inclusive $^{238}\text{U}(n,xn)$ cross sections. Contributions to the neutron emission stem from elastic scattering, inelastic scattering to discrete states, pre-equilibrium emission, compound nucleus evaporation, and fission fragments decay.

The microscopic approach depicted in sect. 3.3 provides a coherent description of the direct inelastic scattering process and the direct pre-equilibrium emission. Our model assumes that direct pre-equilibrium emission is accounted for only considering one-phonon excitations. The one-step double differential cross section for emission of a nucleon at the outgoing energy E_f in the range $[E_f, E_f + \Delta E]$ reads

$$\frac{d^2\sigma(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_f)}{d\Omega_f dE_f} = \sum_n \frac{1}{\Delta E} \int_{E_f}^{E_f + \Delta E} dE f_n(E_i - E - E_n) \frac{d\sigma_n(\mathbf{k}_i, \mathbf{k})}{d\Omega_f}, \quad (29)$$

where $E_i = \frac{k_i^2}{2\mu}$ is the nucleon incident energy, and $E = \frac{k^2}{2\mu}$. The differential cross section $\frac{d\sigma_n}{d\Omega}$ corresponds to the inelastic scattering to a discrete state of excitation energy E_n in the target nucleus, calculated from the coupled channel framework with QRPA states as detailed in sect. 3.3. The distribution $f_n(E)$ is a Lorentzian form factor which empirically accounts for the finite width (damping and escape) of target excitations, not described in the present QRPA model (see details in [39]). Moreover, predicted cross-sections are folded by Gaussian form factors to simulate both the incident beam's energy width and the energy spreading related to the detection system.

Our formulation is comparable to the one-step process of the Feshbach, Kerman, Koonin (FKK) [60], the Tamura, Udagawa, Lenske (TUL) [61], or the Nishioka, Weidenmüller, Yoshida (NWY) [62] models for direct pre-equilibrium emission, but also contrasts in various aspects. Here we consider all one-phonon excitations instead of uncorrelated particle-hole states that are used in the FKK and the NWY models. These models also stand on statistical assumptions that lead to pre-equilibrium cross sections expressed in terms of averaged DWBA cross sections folded with level densities. The present model does not require to introduce level densities as cross sections for each excitation corresponding to a one-phonon state are individually calculated. The TUL model formulation of direct pre-equilibrium emission introduces averaged DWBA cross sections and collective response functions calculated with empirical coupling strengths. In the present modeling, QRPA excitations results from more fundamental theories for nuclear structure that predict both strongly and weakly collective responses for all multi-polarities.

Contributions to the (n,xn) cross sections stemming from other reaction mechanisms are calculated as follows. Compound nuclear emission is obtained from the TALYS code [6,7] within the Hauser-Feshbach model. Emission

from fission fragments is calculated within the Madland-Nix model [63] improved by A. Tudora *et al.* [64]. The cross sections for multi-chance fission are calculated with the TALYS code. Finally, elastic scattering, excitation of the GSRB, and one-phonon excitations are calculated within the JLM folding model, and using HFB densities as explained in sect. 3.1. These various contributions to the 11.8 MeV $^{238}\text{U}(n,xn)$ double differential cross section at $\theta_{c.m.} = 90^\circ$ are plotted in the top panel of Fig.5. The sum of these components is represented as a full black curve on the top panel of Fig.6 for both incident energies $E_i = 11.8$ and $E_i = 18$ MeV, and $\theta_{c.m.} = 60, 120^\circ$. Comparison to experimental data shows that our description of the (n,n') direct process accounts for emission at outgoing energies E_f , which corresponds to an excitation energy $E_x = E_i - E_f$ in residual nucleus in the range 1-4 MeV. However, calculated emission at lower outgoing energies is underestimated, especially at $E_i = 18$ MeV (see Fig. 6).

Evaluation of observables for neutron induced reaction on actinides [65,57] usually models pre-equilibrium emission with the excitons model. Direct inelastic scattering to low energy discrete excitations as well as to giant resonances are usually described within DWBA and coupled channels frameworks that require empirical deformation parameters. An additional contribution, that stems from guessed collective states (labeled as "pseudo-states") introduced to compensate for missing high energy emission [65], is also considered. We present results from this model on the bottom panel of Fig.5. Except for the fission-neutron and the "pseudo-states", all the components are calculated with the TALYS code. A comparison to QRPA-based results is displayed in the bottom panel of Fig.6. The excitons model provides cross sections in better agreement than the microscopic model for energy transfer above 5 MeV. For emission at high energy and forward angles, the QRPA-based calculation predicts cross sections with magnitude similar to those of the direct+pseudo-states components. For angles above 60° , The direct+pseudo-states components overestimate data at high emission energy. Note that properties of the "pseudo-states" were adjusted to reproduce integral cross sections [66]. A fine tuning of the pseudo-states properties would most likely allow to better reproduce (n,xn) double differential cross-sections at backward angles.

On the one hand, the QRPA method used to predict response functions was validated through the comparison of calculated and measured transition probabilities observables for low energy excitations (see sect. 3.2). On the other hand, the JLM folding model implemented with HF(B) and (Q)RPA densities successfully predicts elastic scattering and direct inelastic scattering on spherical nuclei, as well as coupled channel calculations for the GSRB of axially deformed target (see sect. 2). Both nuclear structure and inelastic scattering models are thus proved to be accurate, providing confidence in the present determination of the direct neutron emission stemming from one-phonon natural parity states excitations. Thus, discrepancies that appear when predictions are compared to data can be associated to missing reaction mechanisms

rather than flawed ingredients. We believe that the calculated intermediate energy neutron emission could be increased if non-natural parity transitions were included. Indeed these are presently not described since the JLM effective interaction cannot generate spin-flip transitions. Inclusion of two-phonon excitations within a two-step process, not considered in the present calculation, may also strongly contribute to neutron emission. These two possible improvements are discussed in the perspectives section 4.1. Note that a successful account of $^{232}\text{Th}(n,xn)$ cross section was obtained within the TUL approach using QRPA response functions calculated with empirical coupling strengths [67]. This TUL model includes two-step processes that feed two particle-hole or two-phonon excitations, but the respective one-step and two-step contributions are not provided. More insights could be gained from a careful comparison between the ingredients used in the present QRPA-based approach and the work of Ref. [67].

3.5 $(n,n'\gamma)$ cross-sections

The direct neutron emission calculation is applied to the modeling of $^{238}\text{U}(n,n'\gamma)$ cross-sections. We limit our study to $E2$ transitions inside the GSRB. There are mainly three reaction mechanisms that may feed a transition from a state of spin J and excitation energy E_J . The first is the direct excitation of this state of energy E_J which will then rapidly decay via $E2$ transitions toward the GS. In the second mechanism, the projectile is first absorbed and a compound nucleus is formed. Then a neutron will most probably be evaporated in the first place, followed by a γ cascade that will eventually, if the residual excitation energy E^* is such as $E^* > E_J$, feeds the state of energy E_J . The third process starts with a direct inelastic scattering that leaves a residual nucleus at an excitation energy $E^* > E_J$. A γ -cascade will occur and may feed the considered $E2$ transition as well.

We focus here on the third process as it may be strongly impacted by our microscopic calculation of the (n,n') direct cross sections. The spin distribution of the residual nucleus after the direct neutron emission plays a crucial role when modeling this process. This can be understood as follows. As transitions with the lowest angular momentum transfer, with $L > 0$, are favored, the γ cascade will most probably feed a state of spin J if the spin of the residual nucleus, from which the γ emission is initiated, has a spin close to J .

$(n,n'\gamma)$ cross sections are calculated with the TALYS nuclear code [6,7] which takes into account all needed reaction mechanisms. A complete description of the reaction models used in TALYS to describe various reaction mechanisms can be found in [70], and we provide here only details concerning the modeling of the third reaction process. In the TALYS nuclear code, the (n,n') direct part above 1 MeV mainly results from the pre-equilibrium mechanism and giant resonances excitations. The pre-equilibrium part for actinides is calculated from the excitons model. The excitons model provides cross-sections for emitted neutrons

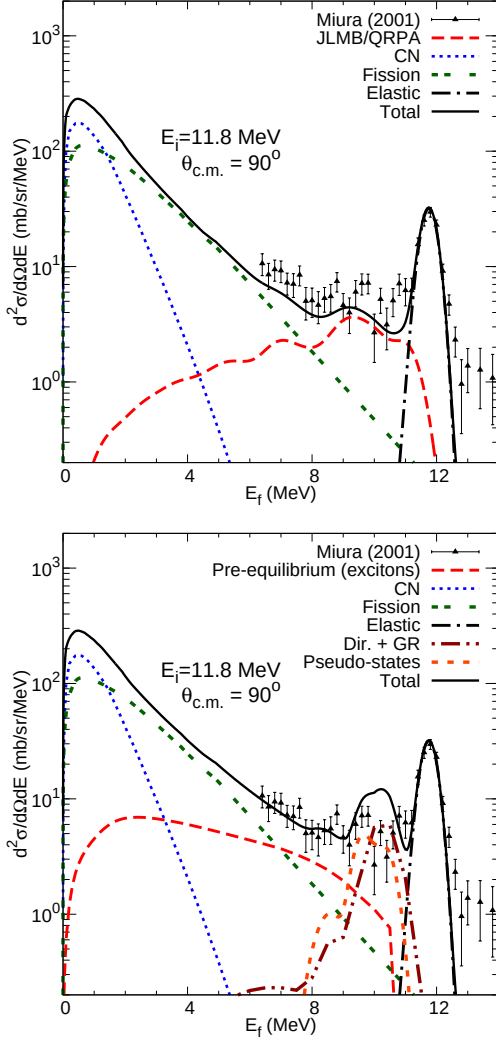


Fig. 5. 11.8 MeV ^{238}U (n,xn) inclusive cross-sections at the outgoing angle 90° . Experimental data [68] (symbols) are compared to predictions. Top panel: calculations performed with the QRPA microscopic modeling of direct emission. Bottom panel: calculations made with phenomenological models for direct inelastic scattering and pre-equilibrium emission. The various contributions to the predicted (n,xn) cross sections are indicated on each plot and detailed in sect. 3.4. Full black curves represent the sum of all components.

but does not provide the spin-parity distribution of the residual nucleus needed to model the third mechanism for (n,n' γ) emission. An ad-hoc prescription is thus adopted in TALYS which consists in assigning a spin distribution to the particle-hole (p-h) state density, that reads

$$\rho(p, h, J, E_x) = (2J+1)R_n(J)w(p, h, E_x) \quad (30)$$

where n is the total number of particles and holes, that is the excitons number. Definitions of the p-h energy-dependent states density $w(p, h, E_x)$ are given in [70]. $R_n(J)$ is the spin distribution for n-excitons states in the contin-

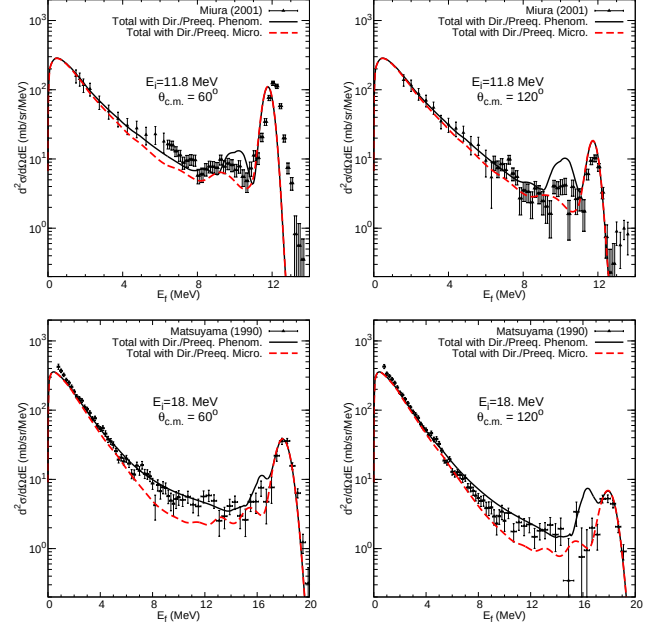


Fig. 6. 11.8 MeV (top panel) and 18 MeV (bottom panel) ^{238}U (n,xn) inclusive cross-sections at both outgoing angles 60° and 120° . Comparison of both calculated (n,xn) cross sections with QRPA excitations (red dashed curves) or direct+GR+pseudo-states+excitons (black full curves) to experimental data (11.8 MeV: [68], 18 MeV: [69]). See sect. 3.4 for details.

uum, that reads

$$R_n(J) = \frac{2J+1}{\sqrt{\pi}n^{3/2}\Gamma^3} e^{-\frac{(2J+1)^2}{n\Gamma^2}} \quad (31)$$

with the spin cut-off parameter $\Gamma^2 = 0.24nA^{2/3}$, where A is the residual nucleus' mass number. As it was recognized by T. Kawano *et al.* [47], such a prescription neglects the probability to excite a continuum state in a direct process which is strongly reduced for high momentum transfer as compared to low momentum. This angular momentum dependent excitation probability concentrates the spin distribution at lower values compared to the prescription given by eq.(31).

Within the present microscopic model, contributions from direct scattering to low energy excitations, pre-equilibrium and giant resonances are replaced by the QRPA-based calculation depicted in sect. 3.4. The spin distribution of the residual nucleus is thus directly obtained from the direct inelastic cross sections with QRPA excited states and reads:

$$R(J) = \frac{\sigma_J}{\sum_{J'} \sigma_{J'}}. \quad (32)$$

We display in Fig.7 a comparison of the spin distributions calculated with eqs.(31) and (32) at both incident energies of 6 and 18 MeV. Distributions are centered at $J=7-8 \hbar$ for the TALYS ad-hoc prescription and at $J=3-4 \hbar$ for the QRPA-based calculation. As previously men-

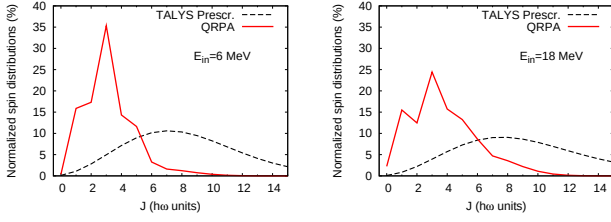


Fig. 7. Spin distributions of the ^{238}U residual nucleus at both incident neutron energies 6 (left panel) and 12 MeV (right panel). Distributions calculated with the Talys prescription (dashed black curves) are compared to those obtained from the QRPA-based reaction model (full red curves).

tioned, taking into consideration the excitation probabilities of the continuum states considerably lowers the spin distribution centroid. Moreover, collective excitations described within the QRPA model impact both the level density and the probability of excitation, that will reflect on residual nucleus spin distributions.

$(n,n'\gamma)$ cross sections obtained with both methods are compared in Fig.8 to experimental data, for four transitions within the ^{238}U GSRB. Comparing to predictions performed with the phenomenological approach (dashed black curves), the cross section calculated with the QRPA-based model (full red curves) is slightly affected for the $4^+ - 2^+$ transition and strongly reduced for the $6^+ - 4^+$, $8^+ - 6^+$ and $10^+ - 8^+$ transitions. This is understood since, within the QRPA-based approach, populated states have a much lower average spin than that given by eq.(31). Predicted cross sections from the present QRPA model for the $8^+ - 6^+$ and $10^+ - 8^+$ transitions nicely follow measurements. We note that the experimental trends for the plateau seen in the four transitions above $E_{\text{in}} = 10$ MeV is also better reproduced by the QRPA-based calculation. The magnitude of this plateau is correctly accounted for in the 103,5 and 210,9 keV transitions. Note that at incident energies above 10 MeV, the QRPA-based calculation may vary if second-order processes are introduced. A more careful analysis of these transitions will be provided in [71] where contributions stemming from various reaction mechanisms will be detailed.

4 Perspectives for the next decade

This section is dedicated to the future work that we intend to perform within the next decade to improve and extend the predictions of nuclear reaction observables for neutron induced reaction on various targets and thus fulfill the increasing needs of reliable nuclear data.

Results reported in this paper from the JLM folding model and the QRPA nuclear structure method are accurate for inelastic scattering off discrete excitations. Description of (n,xn) and $(n,n'\gamma)$ reactions were also of quite good quality, and yet discrepancies between predictions and the existing data remain. We provide in sect. 4.1 two directions to improve the present calculation of pre-equilibrium emission for actinides.

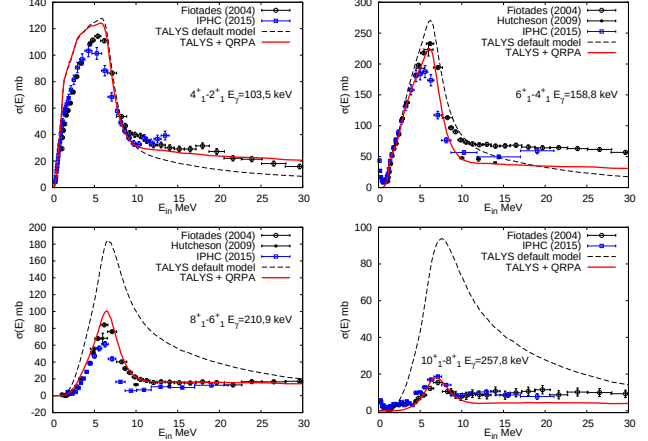


Fig. 8. ^{238}U $(n,n'\gamma)$ cross-sections for transition in the GS rotational band. Spin parities of initial and final states, and γ energies are indicated on each plot. Experimental data (symbols) are compared with TALYS calculations (curves, see details in text).

In addition, the present approach is limited to nucleon scattering above a few MeV for actinides. Moving towards lower energy requires to use a more complex coupling scheme than that constituted by the ground state rotational band. Sect.4.2 focuses on possible improvement of the description of direct elastic and inelastic scattering below 5 MeV in the framework of the JLM folding model.

Moreover, Applications presented in this paper are restricted to medium mass and nuclei. Light nuclei, such as ^{16}O , are of major importance for nuclear energy applications. In this mass region, the description of the GS and low energy positive parity excitations from a beyond mean-field perspective requires many particle-hole excitations, which reflect their clustering aspect. The newly developed multiparticle-multihole mixing configuration method (mpmh) is a nuclear structure approach designed to handle the complexity of such excitations.

Section 4.3 details a first application of this model to the description of nucleon inelastic scattering. Finally, in sect.4.4 we put forward general issues related to microscopic direct reaction models based on effective density-dependent interaction and suggest a few directions that may help solving them.

4.1 Improvement of direct pre-equilibrium emission models

The present modeling describes in an unified way inelastic scattering to discrete excitations and pre-equilibrium emission. To correctly account for emission, the model needs to account for all the possible states of the target that have a non-negligible probability to be excited in a direct inelastic scattering process. One-phonon excitations described within the QRPA method, provide a good description of low lying excitations as well as giant resonances. However, our modeling includes only natural

parity excitations, namely for which the angular momentum L and parity transfer π fulfill the relation $(-)^L = \pi$. This defect arises from the fact that non-natural parity transition are triggered by the interaction's $S = 1$ component which is missing in the effective interaction used in the JLM folding method. The $S = 1$ components of the M3Y [72] or the Melbourne [73] g-matrix could be used as a starting point to extend the JLM effective interaction and account for non-natural parity excitations.

Moreover, as the incident energy rises, so does the possibility to excite states with large excitation energy. Consequently, two particle-hole states, or two-phonon states that are solutions of the QRPA equations, may significantly contribute to neutron emission. The relative importance of one- and two-phonon excitations contributions to the inelastic cross section can be guessed first considering the relative number of one- and two-phonon excitations, then the relative magnitude of the corresponding individual cross sections. We display in Fig.9 a comparison of one and two-phonon level densities in ^{208}Pb and ^{238}U . At the excitation energy $E_x = 8$ MeV, the one-phonon level density is still larger than the two-phonon one in ^{208}Pb , while it is 500 times lower in ^{238}U . Consequently, there will be 500 times more individual contributions stemming from two-phonon than one-phonon excitations for inelastic scattering corresponding to an excitation energy of 8 MeV in ^{238}U . To evaluate the relative cross sections magnitudes for one- and two-phonon excitations, we refer to the work of T. Kawano *et al.* [74]. We point out that one-phonon states (resp. two-phonon states) are mostly excited through a one-step (resp. two-step) process. In [74], one- and two-step processes contributions to 30 MeV $^{208}\text{Pb}(\text{p,p}')$ emission at 15 MeV, that corresponds to excitations energies $E_x = 15$ MeV in ^{208}Pb , were compared and shown to have about the same magnitude (see Fig.11 in [74]). At $E_x = 15$ MeV, the ph level density used in this calculation is 1000 times smaller than the 2p2h one (see Fig.7 in [74]), a situation comparable to that shown in Fig.9 of the present paper at $E_x = 8$ MeV in ^{238}U . This indicates that, even though individual two-step contributions are orders of magnitude smaller than cross sections for a one-step process, the two particle-hole, or two-phonon, state densities increases so rapidly that the two-step process may rapidly dominates as the incident energy rises.

We thus consider describing the two-step process for the excitation of two-phonon states built from the QRPA solutions described in sect.3.2. This could be achieved by extending the coupling scheme described in sect.3.3 to transitions between one-phonon and two-phonon excitations.

Improvement of the one-step process calculation and inclusion of two-step processes will most probably impact on the residual nucleus spin-parity distributions, and thus on predicted $(\text{n,n}'\gamma)$ cross sections. Once these implementations are done, QRPA predictions will be used along with an improved JLM-folding model to predict direct neutron emission, including inelastic scattering to discrete

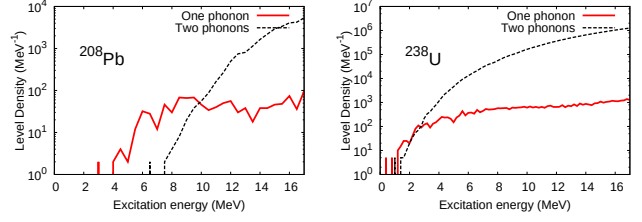


Fig. 9. One- and two-phonon intrinsic level densities in ^{208}Pb (left panel) and ^{238}U (right panel) as a function of the excitation energy E_x .

states as well as pre-equilibrium emission, for a wide range of medium and heavy mass nuclei.

4.2 Elastic and inelastic scattering at low energy

The presented application for neutron inelastic scattering off actinides used a coupling scheme limited to transitions between the GSRB and one rotational band built on an intrinsic excitation. However, it has been shown that coupling all low-lying collective bands of vibrational character observed in even-even actinides is mandatory for an accurate determination of non elastic cross sections for neutron energy below 2 MeV [57]. The involved coupling scheme calls for the knowledge of coupling strengths not only between the GSRB and excited bands, but also between excited bands. While in the first case, part of the coupling strengths can be inferred from existing inelastic scattering measurements, coupling between excited bands are only guessed. These couplings could be calculated from the QRPA nuclear structure method. Transition potential, for inter-band couplings will be calculated from the transition between two QRPA intrinsic excitations

$$\rho_{\tau_z}^{N,N'}(\mathbf{r}) = \langle N' | \sum_{\sigma} \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}, \sigma, \tau_z) \Psi(\mathbf{r}, \sigma, \tau_z) | N \rangle. \quad (33)$$

Coupled channels calculations will thus be performed including couplings between the elastic channel and all low energy excitations, in order to provide a microscopic description of elastic and inelastic scattering observables at energies below 2 MeV which are of first importance for fast reactor systems.

All achieved and predicted calculations will be applied to odd systems such as ^{239}Pu within the weak coupling approximation, that uses a microscopic description of the nearby even-even nucleus.

4.3 Reaction calculations with the mpmh method

Microscopic reaction models allow to challenge nuclear structure information stemming from nuclear structure models. Once these models reach maturity, namely provide satisfactory predictions for a large amount of nuclear structure properties, they can be used within microscopic

models and provide reliable predictions of nuclear reaction observables.

The multiparticle-multi-hole (mpmh) configuration mixing approach was recently developed and applied to describe light nuclei properties considering wave functions with complex mpmh components. Details about the fully self-consistent mpmh formalism are provided in [75–77]. Recent applications in even-even sd-shell nuclei [78, 79], using an approximate solution of the full method, provide a standard deviation to experiment of about 500 keV for two-nucleon separation energies and about 400 keV for $J^\pi = 0_2^+, 1_1^+, 2_{1,2}^+, 3_{1,2}^+, 4_1^+$ states excitation energies. Accurate magnetic dipole moments and reduced M1 transition probabilities, and experimental trends for spectroscopic quadrupole moments and reduced E2 transition probabilities are also obtained. The lack of quadrupole collectivity is related to the restricted configuration space used in the application. Moreover, first applications to the spectroscopy of odd nuclei display a general good agreement with experiment [80].

We now challenge for the first time the mpmh predictions within the framework of a microscopic reaction model. Calculations are performed with the Melbourne g-matrix [73], taken as the effective two-body interaction between the projectile and the target's nucleons, which provides a very accurate account of nucleon scattering above about 50 MeV when used with an adequate nuclear structure model. Numerous studies have already been performed with the Melbourne g-matrix. For instance, applications with RPA densities calculated with the D1S Gogny force accurately accounted for elastic scattering [26], inelastic scattering [27] and pre-equilibrium reactions [54] observables for doubly-magic nuclei. This reaction model offers the possibility to carefully challenge nuclear structure information, such as GS densities [26] and transition densities [27] used to build the optical and transition potentials.

We apply here the same reaction formalism to study proton inelastic scattering off ^{28}Si , using the densities stemming from the mpmh configuration mixing method. Calculations are performed within the DWBA framework using the DWBA07 nuclear reaction code [81]. To challenge the mpmh description of low energy excitation in sd-shell nuclei, (e,e') and (p,p') calculations for the Yrast 2^+ in ^{28}Si were performed. The (e,e') reaction probes both the strength and the shape of the charge transition densities. This completes the study of reduced transition probabilities which only measures charge transition strengths. In addition, (p,p') studies provide further information as a scattered proton probes both proton and neutron transition density profiles. Moreover, as the proton-neutron effective interaction is roughly twice the proton-proton component for incident proton of energy around 100 MeV, proton inelastic scattering cross-section can be used as an efficient tool to challenge predicted neutron transition densities.

Experimental and theoretical electron and proton inelastic scattering observables are compared in Fig.10 for the 2_1^+ excitation in ^{28}Si . Concerning (e,e'), squared lon-

gitudinal form factor for a transition from the GS to an excited state of spin J as a function of the transfer momentum q reads:

$$F_L(q) = \frac{4\pi}{Z^2} \sqrt{2J+1} \int \rho_{0 \rightarrow J}^{\text{ch.}}(r) j_J(qr) r^2 dr, \quad (34)$$

where $j_\lambda(qr)$ is a modified spherical Bessel function, and $\rho_{0 \rightarrow J}$ is the radial local charge transition density. We consider a fully self-consistent solution of the mpmh method. The calculated square form factor reproduces the shape of the measured one but the strength is underestimated by a factor 2.5. This discrepancy is consistent with the experimental to theoretical ratio found for reduced transition probabilities $B_{\text{exp}}(E2)/B_{\text{mpmh}}(E2) \simeq 2.4$ [76]. Very similar conclusions are reached for (p,p') differential cross section: the cross section shape is well reproduced while the magnitude is underestimated by a factor 2. This assesses that the proton and neutron transition density profiles are accurately described. The missing strength can be related to the restricted configuration space used in the present calculation. This first study of electron and proton inelastic scattering performed with mpmh wave functions will be extended to more transitions and nuclei, especially to those with $N \neq Z$ and/or transitions with IV components. It will serve as a tool to challenge mpmh predictions as the method will consider larger valence spaces. A more complete study on electron and proton inelastic scattering off sd-shell nuclei can be found in [76]. A deeper analysis taking into account more transition is being performed [82].

Once the mpmh nuclear structure method provides a good qualitative and quantitative description of electric transition probabilities as well as inelastic scattering to discrete states cross sections within a microscopic reaction model, it will be a suited tool to improve nuclear reactions data, especially for light nuclei.

4.4 Open problems in the microscopic description of direct reactions

In this section, we discuss some problems related to the microscopic description of direct reactions. We limit our remarks to microscopic approaches based on effective density-dependent interactions, either those derived in nuclear matter (NM), or phenomenological ones that are currently used in nuclear structure calculations, such as the Skyrme and the Gogny forces.

The modeling followed in this paper relies on a description of nuclear structure provided by the QRPA or the mpmh methods, and of the interaction between the projectile and the target's nucleons given by an energy- and density-dependent effective interaction derived in NM. Our approach, as all those starting from NM calculations, requires a folding procedure. Two major drawbacks of this approach reside in the fact that first, nuclear structure and reaction are not consistently described and second, the modeling relies on an ad-hoc prescription, that is the local density approximation. Moreover, folding models built from g-matrices hardly provide optical potentials in finite

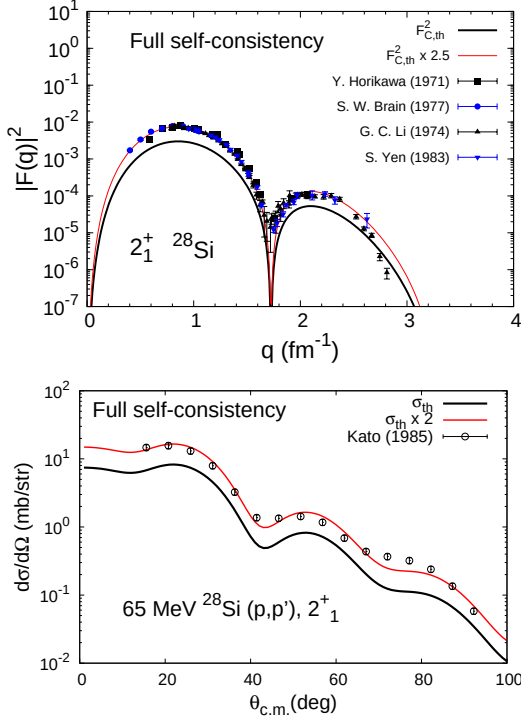


Fig. 10. Top panel : coulomb form factors as a function of transferred momentum for electron inelastic scattering to the 2_1^+ excitation in ^{28}Si . Bottom panel: differential cross sections for proton inelastic scattering to the same excitation. On both panels, calculation from mpnh transition densities (full curves) are compared to measurements (symbols).

nuclei that fulfill the dispersion relation. Dispersion relation for NM can be fulfilled in NM if the method is accurately implemented, but the optical potential for nucleon scattering on a finite nuclei obtained from a folding procedure is not longer dispersive. In the case of the JLM folding model, the energy-dependent normalization coefficient worsens the situation. The dispersive properties of optical potentials built from a folding procedure could be more thoroughly examined in the future.

Another direction that could be followed relies on recent developments in reaction modeling based on the Green's functions formalism. This formalism offers a mean to describe structure properties and reaction observables on an equal footing. The only input is the selected effective interaction. Furthermore, the determination of the optical potential from Green functions methods ensures that the dispersion relations are correctly fulfilled. Recently, an accurate description of the nucleon elastic scattering off ^{40}Ca at low and medium energy was performed using the Green-function method with the HF+RPA approximation implemented with the Gogny D1S interaction [23,24]. In this work the optical potential is derived for positive energies. This approach could be extended to describe both elastic and inelastic scattering to discrete excitations, and to the description of scattering off axially deformed target ap-

plying the same method starting from the HFB+QRPA calculations [24]. Note that this approach applied with finite range effective interactions provides a non-local optical potential.

Another problematic discussed in the present paper concerns rearrangement corrections needed in the description of inelastic scattering. The present analysis shows that its impact on cross sections magnitudes can be very large for medium energy neutron scattering. However, it appears that these corrections are not systematically considered in inelastic nucleon or light particle scattering and heavy ions collisions studies based on a folding (or a double-folding) procedure. All nuclear structure and reaction models based on density-dependent interaction come across issues related to rearrangement corrections. We believe that a deeper study of the rearrangement in scattering modeling would be of great interest.

5 Conclusion

We have presented an analysis of neutron induced reactions off spherical and axially deformed targets using the microscopic JLM folding model and a nuclear structure description from HF(B)+(Q)RPA methods implemented with the Gogny D1S interaction. Concerning the direct inelastic scattering modeling, transition potentials were derived considering the rearrangement corrections stemming from the target density variations. Application to $^{208}\text{Pb}(n,n')$ scattering shows that these corrections strongly reduce the calculated cross sections and that they have to be considered to account for the observed differential cross sections. The same reaction model was used to describe the direct (n,n') component of $^{238}\text{U}(n,xn)$ cross sections. The QRPA nuclear structure model implemented with the Gogny D1S interaction was used to provide the transition densities needed to build the relevant transition potentials used in the coupled channel framework. This microscopic approach provides a good account of (n,xn) emission at high energy while emission at lower energy is underestimated. We propose two possible and complementary explanations. First, non-natural parity transitions, which are not described within the present approach, could contribute significantly as it was predicted in a previous analysis of (n,xn) cross sections for neutron scattering off spherical nuclei [83]. Moreover, second-order processes may become important even at incident energy as low as 10 MeV, as the two-phonon/one-phonon level densities ratio becomes very large. The last displayed application is related to the modeling of $^{238}\text{U}(n,n'\gamma)$ cross sections. The present microscopic approach provides a very different spin-distribution of the residual nucleus resulting from the direct (n,n') process than the one usually assumed in the TALYS code. The QRPA-based modeling improves $(n,n'\gamma)$ cross section predictions for the transitions within the GSRB that start from high spin, such as $J = 8, 10\hbar$ excitations.

We presented perspectives to improve the present direct inelastic scattering modeling, including excitations of

non-natural parity states and two-step process for applications with actinides. The description of neutron scattering below 2 MeV using extended coupled channel schemes and QRPA transition densities is also suggested. The present approach, completed with planned developments, will hopefully offer a complete description of the direct neutron emission mechanisms for neutron induced reaction below 30 MeV on even-even nuclei.

A first microscopic description of proton inelastic scattering with the multiparticle-multihole (mpmh) configuration mixing method has also been displayed. This alternative nuclear structure model is suited to the description of lighter systems, for which multiparticle multihole configurations are of first importance. This nuclear structure approach is still under development since first applications were made using a limited configuration space. Nevertheless, this first application and the planned improvements of the mpmh implementation open possibilities for an accurate modeling of neutron induced reactions for light nuclei.

These microscopic reaction models for neutron induced cross section on even-even nuclei will also be applied to odd nuclei within the weak coupling approximation, or employing more accurate descriptions of odd systems which are currently being developed within the QRPA and the mpmh frameworks.

We finally pointed out problems related the use of density-dependent effective interactions and folding models in the microscopic description of nuclear reactions. General directions to go over these issues were briefly put forward.

Eventually, when all the above developments will have reached sufficient maturity, we aim to include them into our nuclear data model-based evaluation process [10], as well as into our TALYS code platform [6].

Acknowledgments

We wish to thank P. Romain for enlightening discussions and for providing the relevant input for calculations performed with TALYS, and B. Morillon for the calculation of the fission neutron distributions. We are also grateful to G. Haouat for providing the $^{208}\text{Pb}(n,n')$ experimental data, to S. Karataglidis for providing the Melbourne g-matrix, and to J. Raynal for his constant support with the coupled channel code ECIS. We also thank T. Kawano and R. Capote for useful discussions. Advice given by J.-P. Delaroche have been a great help in developing this work. We express to D. Gogny our continuing respect and admiration. His keen interest and constant inspiration help to a very great extent to accomplish this work. This paper is dedicated to him.

References

1. M.B. Chadwick et al. Nucl. Data Sheets, 118, 2014.
2. Angela Bonaccorso and Robert J. Charity. Phys. Rev. C, 89:024619, 2014.
3. E. Sh. Soukhovitskii, R. Capote, J. M. Quesada, and S. Chiba. Phys. Rev. C, 72:024604, 2005.
4. Rui Li, Weili Sun, E. Sh. Soukhovitskii, J. M. Quesada, and R. Capote. Phys. Rev. C, 87:054611, 2013.
5. M. H. Mahzoon, R. J. Charity, W. H. Dickhoff, H. Dussan, and S. J. Waldecker. Phys. Rev. Lett., 112:162503, 2014.
6. A. J. Koning, S. Hilaire, and M. Duijvestijn. in Nuclear Data for Science and Technology, edited by O. Bersillon, F. Gunsing, E. Bauge, R. Jacqmin, and S. Leray (EDP Sciences, Les Ulis, France, 2008), p. 211.
7. A. J. Koning and D. Rochman. Nucl. Data Sheets, 113, 2012.
8. M. Herman, R. Capote, B.V. Carlson, P. Obložinský, M. Sin, A. Trkov, H. Wienke, and V. Zerkin. EMPIRE: Nuclear reaction model code system for data evaluation. Nucl. Data Sheets, 108, 2007.
9. A.J. Koning and D. Rochman. Nucl. Data Sheets, 113, 2012.
10. E. Bauge et al. Eur. Phys. J. A, 48, 2012.
11. J. W. Holt, N. Kaiser, G. A. Miller, and W. Weise. Phys. Rev. C, 88, 2013.
12. G. Hupin, J. Langhammer, P. Navrátil, S. Quaglioni, A. Calci, and R. Roth. Phys. Rev. C, 88, 2013.
13. S. J. Waldecker, C. Barbieri, and W. H. Dickhoff. Phys. Rev. C, 84, 2011.
14. R. Lazauskas. Phys. Rev. C, 91, 2015.
15. M. Bender, P.-H. Heenen, and P.-G. Reinhard. Rev. Mod. Phys., 75, 2003.
16. M. Dutra, O. Lourenço, J. S. Sá Martins, A. Delfino, J. R. Stone, and P. D. Stevenson. Phys. Rev. C, 85, 2012.
17. F. Chappert, N. Pillet, M. Girod, and J.-F. Berger. Phys. Rev. C, 91, 2015.
18. S. Goriely, S. Hilaire, M. Girod, and S. Péru. Phys. Rev. Lett., 102, 2009.
19. J. P. Delaroche, M. Girod, J. Libert, H. Goutte, S. Hilaire, S. Péru, N. Pillet, and G. F. Bertsch. Phys. Rev. C, 81, 2010.
20. S. Péru and M. Martini. Eur. Phys. J. A, 50, 2014.
21. E. Caurier, G. Martínez-Pinedo, F. Nowacki, A. Poves, and A. P. Zuker. Rev. Mod. Phys., 77, 2005.
22. N. Vinh Mau and A. Bouyssy. Nucl. Phys. A, 257, 1976.
23. G. Blanchon, M. Dupuis, H. F. Arellano, and N. Vinh Mau. Phys. Rev. C, 91, 2015.
24. H. Arellano G. Blanchon, M. Dupuis, 2015. Submitted in Eur. Phys. J. A.
25. S. Karataglidis, P. J. Dortmans, K. Amos, and C. Bennhold. Phys. Rev. C, 61, 2000.
26. M. Dupuis, S. Karataglidis, E. Bauge, J.-P. Delaroche, and D. Gogny. Phys. Rev. C, 73, 2006.
27. M. Dupuis, S. Karataglidis, E. Bauge, J.-P. Delaroche, and D. Gogny. Phys. Lett. B, 665, 2008.
28. Dao T. Khoa, Elias Khan, Gianluca Colò, and N. Van Giai. Nucl. Phys. A, 706, 2002.
29. D. Gupta, E. Khan, and Y. Blumenfeld. Nucl. Phys. A, 773, 2006.
30. Nguyen Dang Chien and Dao T. Khoa. Phys. Rev. C, 79, 2009.
31. Dao T. Khoa and G.R. Satchler. Nucl. Phys. A, 668(1-4), 2000.
32. J.-P. Jeukenne, A. Lejeune, and C. Mahaux. Phys. Rev. C, 16, 1977.
33. E. Bauge, J.P. Delaroche, and M. Girod. Nucl. Phys. A, 654(1, Supplement 1), 1999.

34. E. Bauge, J. P. Delaroche, and M. Girod. Phys. Rev. C, 63, 2001.
35. E. Khan et al. Nucl. Phys. A, 694, 2001.
36. A. Corsi et al. Phys. Lett. B, 743, 2015.
37. C. Lagrange and M. Girod. J. Phys. G: Nucl. Part. Phys., 9, 1983.
38. E. Bauge, J. P. Delaroche, M. Girod, G. Haouat, J. Lachkar, Y. Patin, J. Sigaud, and J. Chardine. Phys. Rev. C, 61, 2000.
39. M. Dupuis, S. Péru, E. Bauge, and T. Kawano. 13th International Conference on Nuclear Reaction Mechanisms, Varenna, CERN-Proceedings-2012-002, Vol. 117 (2012) p. 95.
40. S. Péru, G. Gosselin, M. Martini, M. Dupuis, S. Hilaire, and J.-C. Devaux. Phys. Rev. C, 83, 2011.
41. Lapoux, Valérie and Alamanos, Nicolas. Eur. Phys. J. A, 51:91, 2015.
42. Kerveno et al. Phys. Rev. C, 87, 2013.
43. A. Bacquias et al. Nucl. Data Sheets, 119(0), 2014.
44. M. Kerveno et al., 2015. Submitted in Eur. Phys. J. A.
45. T. Cheon, K. Takayanagi, and K. Yazaki. Nucl. Phys. A, 437(2), 1985.
46. T. Cheon, K. Takayanagi, and K. Yazaki. Nucl. Phys. A, 445(2), 1985.
47. D. et al. Dashdorj. Phys. Rev. C, 75, 2007.
48. J.-P. Jeukenne, A. Lejeune, and C. Mahaux. Phys. Rep., 25, 1976.
49. S. Goriely and J.-P. Delaroche. Phys. Lett. B, 653, 2007.
50. R.R. Scheervau. Nucl. Phys., A257, 1976.
51. E. Bauge, J. P. Delaroche, and M. Girod. Phys. Rev. C, 58, 1998.
52. G. R. Satchler. Direct Nuclear Reactions. Oxford University Press, Oxford, 1983.
53. J. Raynal. computer code ECIS-12, (NEA 0850/19).
54. M. Dupuis. PhD thesis, Université Bordeaux I, 2006.
55. G. Haouat et al. To be submitted in Phys. Rev. C.
56. G. Haouat. Private communication.
57. R. Capote, A. Trkov, M. Sin, M. Herman, A. Daskalakis, and Y. Danon. Nucl. Data Sheets, 118, 2014.
58. S. Péru and H. Goutte. Phys. Rev. C, 77, 2008.
59. M. Dupuis et al., 2015. To be submitted in Phys. Rev. C.
60. H. Feshbach and A. Kerman and A. K. Koonin. Ann. Phys. (N.Y.), 125, (1980).
61. T. Tamura and T. Udagawa and H. Lenske. Phys. Rev., C26, (1982).
62. H. Nishioka and W. A. Weidenmuller and S. Yoshida. Ann. Phys. (N.Y.), 183, (1988).
63. D. G. Madland and J. R. Nix. Nucl. Sci. Eng., 81, 1982.
64. A. Tudora, B. Morillon, F.-J. Hambsch, G. Vladuca, and S. Oberstedt. Nucl. Phys. A, 756, 2005.
65. M.B. Chadwick et al. Nucl. Data Sheets, 107(12), 2006.
66. P. Romain. Private communication.
67. H. Wienke, R. Capote, M. Herman, and M. Sin. Phys. Rev. C, 78, Dec 2008.
68. T Miura, M Baba, M Ibaraki, T Win, T Sanami, and Y Hirasawa. Annals of Nuclear Energy, 28(10), 2001.
69. S. Matsuyama, M. Baba, T. Ito, K. Maeda, N. Ito, N. Nakamura, and N. Hirakawa. Measurement of double-differential neutron emission spectra of 238-u and 232-th at neutron energy 18.0 mev. Conference Report 91,032, 1990. JAERI-M Reports.
70. Talys 1-6 User Manual.
71. M. Kerveno et al. Article in preparation.
72. G. Bertsch, J. Borysowicz, H. McManus, and W.G. Love. Nuclear Physics A, 284, 1977.
73. K. Amos, P. J. Dortmans, H. V. von Geramb, S. Karataglidis, and J. Raynal. Adv. in Nucl. Phys., 25, 2000.
74. T. Kawano and S. Yoshida. Phys. Rev. C, 64, 2001.
75. N. Pillet, J.-F. Berger, and E. Caurier. Phys. Rev. C, 78, 2008.
76. C. Robin. PhD thesis, Université Paris-Sud, 2014.
77. C. Robin, N. Pillet, D. Peña Arteaga, and J.-F. Berger. To be submitted.
78. N. Pillet, V. G. Zelevinsky, M. Dupuis, J.-F. Berger, and J. M. Daugas. Phys. Rev. C, 85, 2012.
79. J. Le Bloas, N. Pillet, M. Dupuis, J. M. Daugas, L. M. Robledo, C. Robin, and V. G. Zelevinsky. Phys. Rev. C, 89, 2014.
80. N. Pillet, J.-M. Daugas, and L. Gaudefroy et al. To be submitted.
81. J. Raynal. computer code DWBA07 (NEA-1209/08).
82. C. Robin, N. Pillet, and M. Dupuis. To be submitted.
83. M. Dupuis, T. Kawano, J.-P. Delaroche, and E. Bauge. Phys. Rev. C, 83, 2011.

2.4 Paramètres de masse vibrationnels pour le 5DCH

2.4.1 Présentation du 5DCH

Le 5-Dimensional Collective Hamiltonian, ou 5DCH, est un modèle permettant de décrire les excitations quadripolaires de type rotation, vibration, ainsi que le couplage rotation-vibration. Afin d'effectuer un calcul 5DCH, il est nécessaire d'obtenir, entre autres⁴, des cartes triaxiales (β, γ) donnant les valeurs de paramètres nommés *paramètres de masse vibrationnels* (parfois également nommées *masses 5DCH* ou *masses collectives*). Ceux-ci se notent $B_{\mu\nu}$ et sont définis comme suit [LDG⁺10] :

$$B_{\mu\nu} = \frac{\hbar^2}{2} \frac{\mathcal{M}_{-3,\mu\nu}}{[\mathcal{M}_{-1,\mu\nu}]^2}. \quad (2.1)$$

Pour les calculer, nous avons besoin de la formule des moments $\mathcal{M}_{p,\mu\nu}$

$$\mathcal{M}_{p,\mu\nu} = \sum_n \omega_n^p |\langle \tilde{0} | \hat{Q}_{2\mu} | n \rangle \langle n | \hat{Q}_{2\nu} | \tilde{0} \rangle|. \quad (2.2)$$

Les énergies ω_n sont les énergies de phonons QRPA introduits dans l'équation (1.52), et les états $|n\rangle$ sont les états propres QRPA tels que définis dans l'équation (1.51).

Nous nous proposons ici de calculer ces paramètres de masse par la QRPA en utilisant comme exemple le paramètre B_{00} au point sphérique. Les noyaux étudiés sont les étains pairs-pairs compris entre $A = 100$ et $A = 144$. Pour plus de détails sur le formalisme, le lecteur pourra consulter l'article [LDP15] publié dans la revue Physical Review C et joint ci-après.

4. Les autres données d'entrée étant la surface d'énergie potentielle, et les paramètres d'inertie $\mathcal{J}_{x,y,z}$.

2.4.2 Comparaison des masses obtenues par HFB et QRPA

Traditionnellement, les masses 5DCH sont obtenues par un calcul HFB, selon la formule connue sous le nom de *masses Inglis-Belyaev*. Cependant, plusieurs études ont déjà pointé le manque de corrélations dans ces masses. Il est habituel de les corriger par un facteur de l'ordre de 1.3⁵. Ce facteur a été déterminé de façon empirique, afin que le 5DCH fournisse des spectres d'excitations proches des données expérimentales.

Il a donc été proposé de passer par la QRPA pour obtenir des masses à la *Thouless-Valatin*. Le fait de les calculer par la QRPA étant susceptible, grâce à la prise en compte de corrélations du noyau négligées dans HFB, de les enrichir et de les rendre utilisables sans correction empirique. Notons qu'il est également possible d'obtenir ces masses par le biais d'autres techniques, telles que la Fonctionnelle de la Densité d'Énergie Dépendante du Temps (TD-EDF) comme présenté dans [TLS15] ou encore par un calcul HFB Dépendant du Temps Adiabatique (ATDHFB) dans [LDG16]. Obtenir des masses plus riches permettrait d'améliorer considérablement les calculs 5DCH, ceux-ci restant une référence pour le traitement des excitations quadripolaires. L'étude présentée ici vise à évaluer la faisabilité de cette approche.

Afin d'alimenter le 5DCH, il faut fournir des cartes triaxiales obtenues à partir d'environ 90 points sur la surface (β, γ) . Cependant, un calcul QRPA avec l'interaction de Gogny est beaucoup plus coûteux (de plusieurs ordres de grandeur) qu'un calcul HFB. Effectuer 90 calculs QRPA pour obtenir la carte d'un seul noyau représente, à l'heure actuelle, un défi insoutenable d'un point de vue du temps de calcul. C'est pourquoi nous avons testé plusieurs approximations visant à réduire le coût numérique d'un tel calcul. La première est l'approximation Tamm-Dancoff, qui considère que la matrice B dans l'équation (1.52) est nulle. Cela revient à considérer que les corrélations dans le fondamental sont nulles. La figure 2-3 montre l'impact de cette approximation sur le paramètre de masse.

5. Cette valeur est une moyenne, en réalité, ce facteur prend des valeurs comprises entre 0.7 et 2 environ, selon les cas.

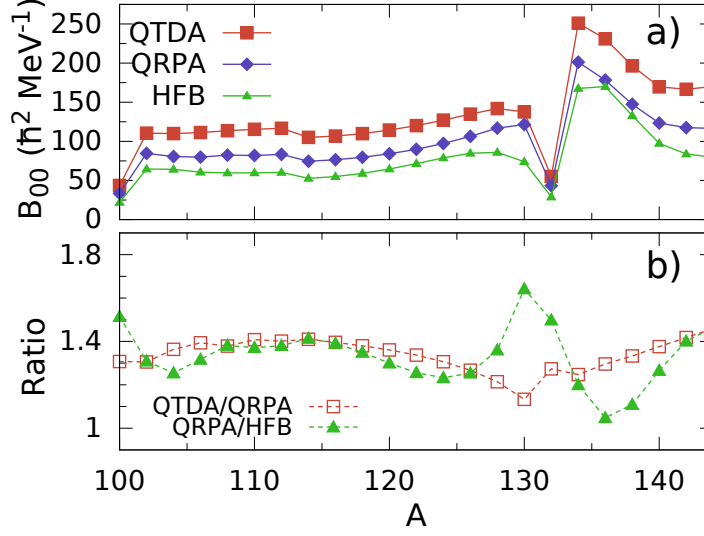


FIGURE 2-3 – (a) Évolution selon le nombre de masse A du paramètre B_{00} calculé avec HFB (triangles verts), avec la QRPA complète (losanges bleus) et avec la QRPA sous l'approximation Tamm-Dancoff (carrés rouges). (b) Rapports des différents paramètres de masse le long de la chaîne isotopique $Z=50$.

On constate plusieurs choses intéressantes. D'une part la QRPA apporte en effet des paramètres de masse enrichis par rapport au calcul HFB. Les effets de fermeture de couche sont bien reproduits. Lorsque l'on se penche sur le rapport QRPA/HFB, on constate qu'il n'est pas constant. On ne peut donc pas tenter de le corriger par un facteur défini de façon unique, même le long de la chaîne isotopique. Notons tout de même que la moyenne de ce rapport sur l'ensemble des noyaux vaut 1.34, ce qui est suffisamment proche de la valeur 1.3 mentionnée auparavant pour nous conforter quant à la pertinence de notre approche pour nous fournir des paramètres de masse de qualité.

Si l'on étudie maintenant l'effet de l'approximation Tamm-Dancoff (QTDA sur la figure), on voit que les valeurs de masses obtenues sont plus importantes que celles obtenues sans l'approximation. Malheureusement, le rapport QTDA/QRPA n'est pas non plus constant, on ne pourra pas espérer obtenir le résultat QRPA complet par extrapolation, et donc s'arroger le droit d'utiliser cette approximation

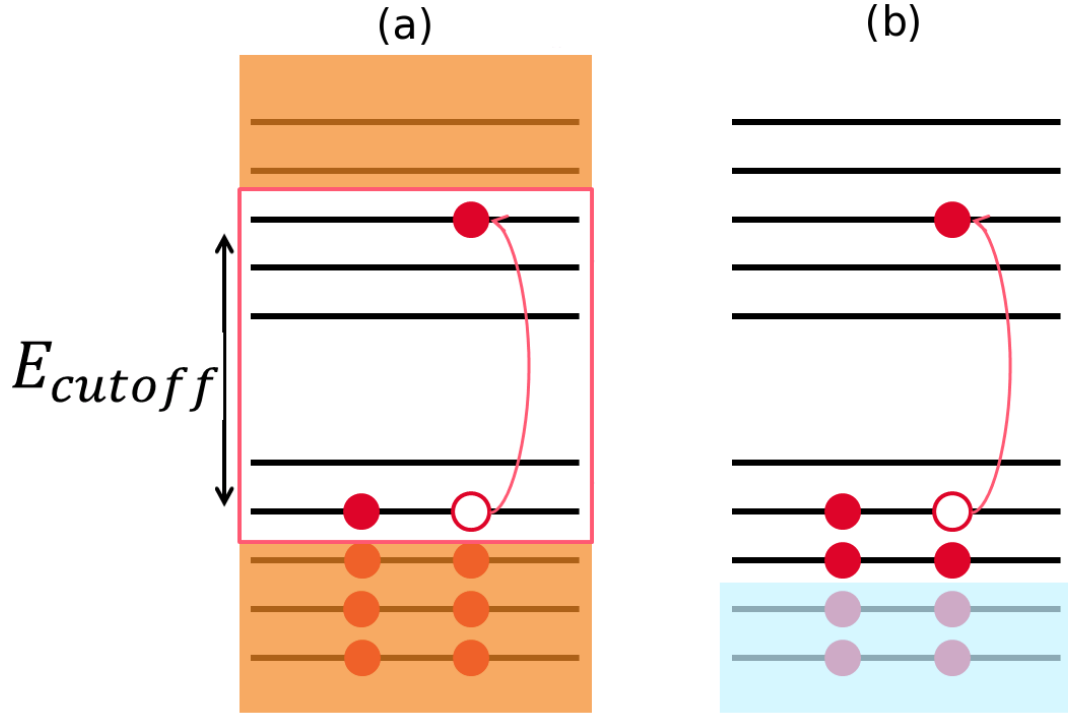


FIGURE 2-4 – (a) Troncature sur l'énergie de paires de quasiparticules : cela revient à choisir une fenêtre de taille E_{cutoff} que l'on fait glisser sur le spectre des particules/trous. On autorise uniquement les couples de quasiparticules dont l'énergie d'excitation est inférieure à cette troncature, c'est à dire les couples particules/trous à l'intérieur de cette fenêtre à participer aux excitations. (b) Insertion d'un cœur inerte : on gèle les états de quasiparticules correspondant aux états de trous les plus profonds.

pour réduire le temps de calcul.

2.4.3 Impact de l'espace de valence sur les paramètres de masse

Puisque l'approximation Tamm-Dancoff n'est pas à même de répondre à nos attentes, nous testons deux nouvelles approximations dont l'effet est illustré dans la figure 2-4 :

- la troncature en énergie de paires de quasiparticules, déjà utilisée depuis plusieurs années,
- l'insertion d'un cœur inerte, développée à l'occasion de cette étude.

La figure 2-5 montre l'évolution de B_{00} selon ces deux approximations pour tous

les étains considérés.

On remarque immédiatement que tous les noyaux suivent le même comportement vis-à-vis de ces approximations. Nous pouvons alors étudier plus en détail l'un de ces noyaux dans la figure 2-6.

An analysant ces résultats, nous avons établi qu'il était possible d'obtenir des paramètres de masse de bonne facture, environ 30 fois plus rapidement, en introduisant un cœur de ^{40}Ca et en imposant une troncature à 50 MeV. En poussant ces approximations plus loin, la qualité des paramètres s'en ressentirait.

Si nous devons effectuer 90 calculs QRPA pour une carte triaxiale, mais que nous sommes à même de les exécuter 30 fois plus rapidement, alors il devient tout à fait envisageable d'utiliser la QRPA pour produire des paramètres de masse de qualité. Il faut maintenant être capable d'effectuer un calcul QRPA en brisant la symétrie axiale, et c'est ce qui sera développé dans le chapitre 4. L'impact final sur la spectroscopie 5DCH reste à déterminer.

Ajoutons au passage que ces approximations ont été testées sur les observables intrinsèques de la QRPA, à savoir les énergies de phonons ainsi que les probabilités de transitions.

Comme on peut le voir dans la figure 2-7, l'effet de ces approximations est tout autre sur ces grandeurs, puisqu'il faut à présent pousser la troncature jusqu'à environ 100 MeV pour obtenir un résultat satisfaisant. Concernant le cœur inerte, nous constatons que son utilisation est à proscrire ici, puisque même le plus petit (^{40}Ca) est inapte à reproduire les valeurs du calcul le plus complet. Un test utilisant un cœur d' ^{16}O a été effectué afin de confirmer que la procédure n'induisait pas un biais. Bien évidemment, un cœur aussi petit ne permet pas de réduire le temps de calcul de façon significative, et il est donc, de fait, inutile pour nous. Cela nous a permis de confirmer la validité de nos conclusions, puisque nous retrouvons presque la courbe correspondant au calcul QRPA complet. L'insertion d'un cœur inerte n'est pas problématique en elle-même, mais son influence devient rapidement critique.

Introduction of a valence space in quasiparticle random-phase approximation: Impact on vibrational mass parameters and spectroscopic properties

F. Lechaftois,^{1,*} I. Deloncle,^{1,2} and S. Péru¹¹CEA, DAM, DIF F-91297 Arpaçon, France²CSNSM, IN2P3/CNRS, F-91405 Orsay, France

(Received 27 November 2014; revised manuscript received 30 July 2015; published 15 September 2015)

For the first time, using a unique finite-range interaction (D1M Gogny force), a fully coherent and time-feasible calculation of the Bohr Hamiltonian vibrational mass is envisioned in a Hartree-Fock-Bogoliubov + quasiparticle random-phase approximation (QRPA) framework. In order to reach a reasonable computation time, we evaluate the feasibility of this method by considering two restrictions for the QRPA: the Tamm-Dancoff approximation and the insertion of a valence space. We validate our approach in the even-even tin isotopes by comparing the convergence scheme of the mass parameter with those of built-in QRPA outputs: excited-state energy and reduced transition probability. The seeming convergence of these intrinsic quantities is shown to be misleading and the difference with the theoretical expected value is quantified. This work is a primary step towards the systematic calculation of mass parameters.

DOI: [10.1103/PhysRevC.92.034315](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.92.034315)

PACS number(s): 21.10.Re, 21.60.Ev, 21.60.Jz, 23.20.Lv

I. INTRODUCTION

One of the most challenging goals in nuclear physics is to describe all the nuclei of the chart using a unique formalism with as few free parameters as possible. Though very promising, the exact triaxial generator coordinate method (GCM) is for now unmanageable for heavy nuclei because of its outrageous computation cost [1–3]. Thus, the quadrupole 5-dimensional collective Hamiltonian (5DCH)—GCM under the Gaussian overlap approximation—is for now our only tool capable of dealing with both light (as soon as the concept of mean field is meaningful) and heavy nuclei under a common theoretical framework. Yet, several studies have already pointed out some drawbacks of this approach such as its inadequacy for describing rigid spherical nuclei, or more generally speaking, the dependence of the reliability of the results with the nuclear deformation [4,5]. Possible improvements would be to add beyond-mean-field correlations in mass parameters as suggested in Refs. [2,4–6]. The quasiparticle random-phase approximation (QRPA) could provide enriched microscopic ingredients entering the vibrational mass parameters to be used for the 5DCH Hamiltonian, if the computational burden is not too heavy. Since mass parameters exhibit strong variations with the deformation [7,8], they have to be computed for each point (β, γ) of a triaxial mesh. Such full QRPA calculations with the Gogny interaction are out of reach due to the calculation time needed for each (β, γ) point of the triaxial map. Some approximations, namely the finite amplitude method [9] or the Arnoldi diagonalization [10], have already been applied successfully to the RPA with zero-range interactions to obtain spectroscopic properties more rapidly. Local QRPA has led to satisfactory results in calculating mass parameters, first restricted to pairing plus quadrupole excitations [11], and more recently using the Skyrme interaction [12]. Here, we decide to test limitations of

the excitations (or correlations) to provide the first vibrational mass parameters obtained through QRPA with a Gogny interaction. Previous studies have already tested the impact of a cutoff of the 2-quasiparticle (2-qp) excitation energy in QRPA, such as Refs. [13] (Skyrme) and [14] (Gogny D1S), but the effect of an inert core in QRPA has never been considered. Approaches such as the one developed here, exploring ways of setting limitations inside the QRPA framework, are of high interest. By reducing the mass parameter computational time, it could open the path towards considerable improvement in the 5DCH approach. In this paper, we briefly consider the Tamm-Dancoff approximation (TDA), in which ground-state correlations are neglected. Then, following standard shell-model techniques, we examine another way of restricting the excitations that consists in introducing a valence space, i.e., limited excitation space, in QRPA calculations. The convergence of the mass parameter is discussed for the first time according to different inert cores as well as the limits in the 2-qp excitation energy that are set. The convergence of the QRPA excitation energies and reduced transition probabilities are examined at each step.

The present study is focused on ^{100–144}Sn (spherical) tin isotopes at zero deformation. It allows us to decorrelate the valence space from the deformation. This work evaluates the feasibility of the approach, and studies dedicated to the impact of the deformation and the effects of the new mass parameters on the 5DCH spectroscopy will be performed in the future.

II. FORMALISM

In a quadrupole 5DCH calculation, the seven parameters entering the Hamiltonian

$$H_{5DCH} = V + T_{\text{rot}} + T_{\text{vib}} \quad (1)$$

are obtained from constrained Hartree-Fock-Bogoliubov (CHFB) calculations over the (β, γ) map. These parameters are a collective potential V , three moments of inertia $\mathcal{J}_i$ (with $i \in \{x, y, z\}$) for the rotational part, and three vibrational

*francois.lechaftois@cea.fr

mass parameters $B_{\mu\nu}$ (with $(\mu, \nu) \in \{0, 2\}^2$, $B_{02} = B_{20}$) for the vibrational part. These vibrational mass parameters can be obtained by using a formula analogous to the one derived in Ref. [15] for RPA

$$B_{\mu\nu} = \frac{\hbar^2}{2} \frac{\mathcal{M}_{-3, \mu\nu}}{[\mathcal{M}_{-1, \mu\nu}]^2}, \quad (2)$$

where the p th order moment $\mathcal{M}_{p, \mu\nu}$ of the quadrupolar strength distribution ($\hat{Q}_{2\nu}$) reads

$$\mathcal{M}_{p, \mu\nu} = \sum_n E_n^p |\langle \tilde{0} | \hat{Q}_{2\mu} | n \rangle \langle n | \hat{Q}_{2\nu} | \tilde{0} \rangle|. \quad (3)$$

When dealing with a HFB calculation, $|\tilde{0}\rangle$ is the vacuum for Bogoliubov quasiparticles as defined in Ref. [16] (later on, for the sake of simplicity, a Bogoliubov quasiparticle is merely called a quasiparticle, qp), $|n\rangle$ is a 2-qp excitation state, and E_n is the associated energy $E_n = E_{qp1} + E_{qp2}$. In the QRPA framework, $|\tilde{0}\rangle$ is the vacuum for QRPA excitations (phonons) and $|n\rangle$ is a QRPA phonon of energy ω_n defined by the quasiboson creation operator θ_n^+

$$\theta_n^+ |\tilde{0}\rangle = |n\rangle, \quad (4)$$

$$\text{with } \theta_n |\tilde{0}\rangle = 0 \quad (5)$$

$$\text{and } \theta_n^+ = \sum_{i < j} X_n^{ij} \eta_i^+ \eta_j^+ - Y_n^{ij} \eta_j \eta_i, \quad (6)$$

where i, j run over the qp levels obtained from the HFB ground state (spherical point for considered isotopes), η^+ (η) is the quasiparticle creation (annihilation) operator, and X_n , Y_n are the amplitudes of the 2-qp excitations. Following a few steps [17], Eq. (3) can be rewritten to work with mass parameters a la Thouless-Valatin:

$$\mathcal{M}_{p, \mu\nu} = \sum_n \omega_n^p |\langle \tilde{0} | \hat{Q}_{2\mu} \theta_n^+ | \tilde{0} \rangle \langle \tilde{0} | \hat{Q}_{2\nu} \theta_n^+ | \tilde{0} \rangle|. \quad (7)$$

The phonon energy ω_n is associated to the amplitudes X_n and Y_n which are solutions of the QRPA equation

$$\begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_n \\ Y_n \end{pmatrix} = \omega_n \begin{pmatrix} X_n \\ -Y_n \end{pmatrix}, \quad (8)$$

using the interaction matrices A and B.

We define

$$\hat{Q}_{20} = \sqrt{\frac{4\pi}{5}} r^2 Y_{20}, \quad (9)$$

$$\hat{Q}_{22} = \sqrt{\frac{4\pi}{5}} r^2 (Y_{22} + Y_{2-2}). \quad (10)$$

For spherical nuclei, it can be shown that

$$B_{00} = \frac{\hbar^2}{2} \frac{\mathcal{M}_{-3, 00}}{[\mathcal{M}_{-1, 00}]^2} = 2B_{20} = 4B_{22}. \quad (11)$$

This relation of proportionality allows us to restrict our study to B_{00} .

All calculations, at each step, are performed with the D1M Gogny force [18] in a harmonic oscillator basis with 11 major shells. It is worth noting that we checked the stability of the

results versus the number of major shells in the basis. The HFB calculations have been performed using the axial code of Ref. [19]. The full computation of the cylindrical QRPA [20] matrix elements of one nucleus requires approximately 2 000 CPU hours. It can now be spread over hundreds of MPI threads [14] to get the result within a day. We extract a submatrix from the QRPA matrix according to the desired valence space (depending on the approximation studied). We then diagonalize the matrix as explained in Ref. [20] and finally process the X_n and Y_n amplitudes with a fast portion of code in order to get the mass parameter and the energy spectrum with the corresponding γ strengths at once. It is worth noting that in the case of a full QRPA calculation, the potential spurious states go down to zero energy. For spherical nuclei, whatever the restriction considered, spurious states that would appear and not completely fall down to zero would still not be a problem. As a matter of fact, we study here $J = 2$ and $J = 3$ states only. Due to the sphericity, these states are fully decoupled from the possible spurious states, which can only be $J = 0$ or $J = 1$ states.

III. APPROXIMATIONS

A. Tamm-Dancoff approximation

Contrary to calculations based on the Skyrme interaction where the diagonalization is the most time-consuming part, filling the matrices A and B with the Gogny interaction is roughly 3 000 times longer than the diagonalization, and reducing the number of matrix elements is the most efficient way to decrease the computation load. The TDA assumes that there are no correlations in the ground state, except those coming from the HFB calculation. This implies that the interaction matrix B is null and results in $Y_n = 0$. Equation (8) then reduces to QTDA:

$$AX_n = \omega_n X_n, \quad (12)$$

which leads to a half-sized eigensystem problem and a calculation time divided by two. Figure 1(a) shows the

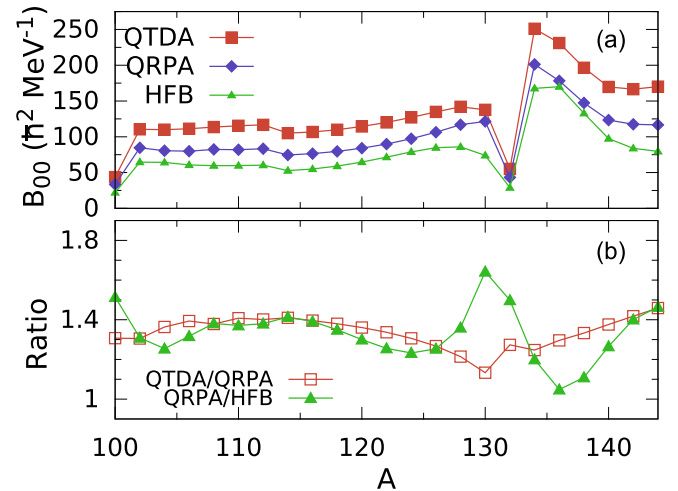


FIG. 1. (Color online) Variation of (a) B_{00}^{QTDA} , B_{00}^{QRPA} , B_{00}^{HFB} and (b) $B_{00}^{QTDA}/B_{00}^{QRPA}$, $B_{00}^{QRPA}/B_{00}^{HFB}$ with the mass number A .

evolution of the mass parameters calculated with QTDA, QRPA, and HFB for the whole isotopic chain. First, the HFB mass parameter exhibits a strong shell closure effect. Thus the mass parameter cannot be blamed for the inability of the 5DCH to deal with doubly magic nuclei. Second, the HFB mass parameters, known for being too low, are indeed lower than the QRPA ones. Figure 1(b) presents the variation with the mass number A of the $B_{00}^{\text{QTDA}}/B_{00}^{\text{QRPA}}$ and $B_{00}^{\text{QRPA}}/B_{00}^{\text{HFB}}$ ratios. It is worth noting that we obtain an average $B_{00}^{\text{QRPA}}/B_{00}^{\text{HFB}}$ ratio of 1.34 along the isotopic chain. This value is close to the average value of the range of factors usually applied to correct the HFB masses [21]. However, this ratio is anything but constant, in particular around $A = 130$. The peak in this region could be due to the fact that the QRPA brings even more correlations than HFB in the limit of low pairing, i.e., when the shell is nearly closed. Caution should then be taken when performing such a correction. Last but not least, the QTDA always overestimates the QRPA value by at least 15%, showing the great imprecision brought by this approximation. Although it dramatically reduces the computation time, the TDA is disqualified for mass parameter calculations and will then not be considered anymore. On a side note, we have performed some calculations for ^{110}Ru (oblate, $\beta \sim -0.2$) and ^{122}Xe (prolate, $\beta \sim 0.3$) in their ground states. The ratios $B_{00}^{\text{QRPA}}/B_{00}^{\text{HFB}}$ for these nuclei are respectively 0.727 and 2.17, which is still in the range of the aforementioned correction factor. Once, again, it shows that this ratio is not to be considered constant and that we will have to deal with the evolution of the factor along constrained deformation in the future.

B. Valence space

We now study the effect of the introduction of a valence space, i.e., a space in which the quasiparticles can be excited.

1. Cutoff on the 2-qp energy

The first limitation resulting from such a valence space is a restriction of the energy of the 2-qp excitations, viz., the sum of the two involved qp energies. Here we suppose that as the 2-qp excitation energy is higher, the importance in the nuclear response is lower, in the QRPA framework. A compromise should exist between a cutoff in 2-qp excitation energy and a reasonable mass parameter value. Figure 2 shows the evolution of B_{00} as a function of the cutoff for all tin isotopes. Cutoff values range between 10 and 100 MeV. Moreover, the QRPA no-cutoff value is considered as our reference calculation. We can first notice that except for some slight differences, all the isotopes behave similarly. Below 50 MeV, the mass parameters are ranging from 1.5 to 11 times higher than their respective converged values. For a cutoff of 50 MeV, we already have a fair approximation of the final mass parameters with less than 10% difference. This difference then shrinks to less than 5% at 80 MeV. If the purpose of the QRPA calculation is only to obtain mass parameters for the 5DCH, then it seems reasonable to use a 50-MeV cutoff. In this case, computation time is divided by a factor of 16 approximately. Whether we should consider 10% or 5% small enough is a question that

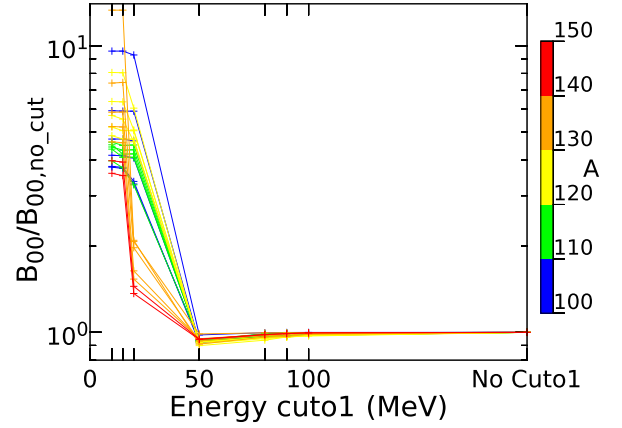


FIG. 2. (Color online) Convergence of B_{00} for $^{100-144}\text{Sn}$ with the cutoff. The results are normalized by the respective no-cutoff values.

would require a separate study evaluating the impact of such a difference on the results of the 5DCH. Due to the similarity of the behavior of the even-even tin isotopes mass parameters, the curves will be plotted for $^{112,120,124}\text{Sn}$ only in the following.

2. Inert core

In a full QRPA calculation, excitations of all nucleons, even the deepest ones, are taken into account. By imposing an inert core, we will only consider the excitations of the nucleons outside the core, those closer to the Fermi level. The nucleons located in the inert core are frozen and do not take part in the excitation process. The present study has been prepared with the following doubly magic cores: ^{40}Ca , ^{48}Ca , ^{56}Ni , ^{70}Ca , and ^{78}Ni (for ^{100}Sn , ^{70}Ca and ^{78}Ni cores are excluded for there would be no valence neutrons). Other doubly magic nuclei would be either too small and thus not sufficiently time-saving or too large to be used for at least one of the lightest tin isotopes.

The evolution of the mass parameter according to the inert core size (from ^{40}Ca to ^{78}Ni) as a function of the cutoff is presented in Fig. 3. Whatever the core is, the values are, as in Fig. 2, stabilized from a 50-MeV cutoff. On the one hand, the two lightest calcium cores give good (^{48}Ca) and even very good (^{40}Ca) approximated values. This can be seen in Fig. 3(d) since in Figs. 3(a)–3(c) their values are indistinguishable from the no-cutoff results. On the other hand, the last calcium (^{70}Ca) and the two nickel cores (^{56}Ni and ^{78}Ni) do not provide sufficiently good results. Therefore, choosing a $^{40,48}\text{Ca}$ core could be a wise choice for these isotopes, allowing us to obtain mass parameters 30% faster. We could even decide to use a 50-MeV cutoff in conjunction with a ^{40}Ca core to compute approximately 30 times faster acceptable mass parameters. However, we have to keep in mind that we praised the 5DCH for its ability to describe both light and heavy nuclei under a common framework, and we need to determine a coherent valence space—which is nucleus dependent—for different nuclei to be consistent.

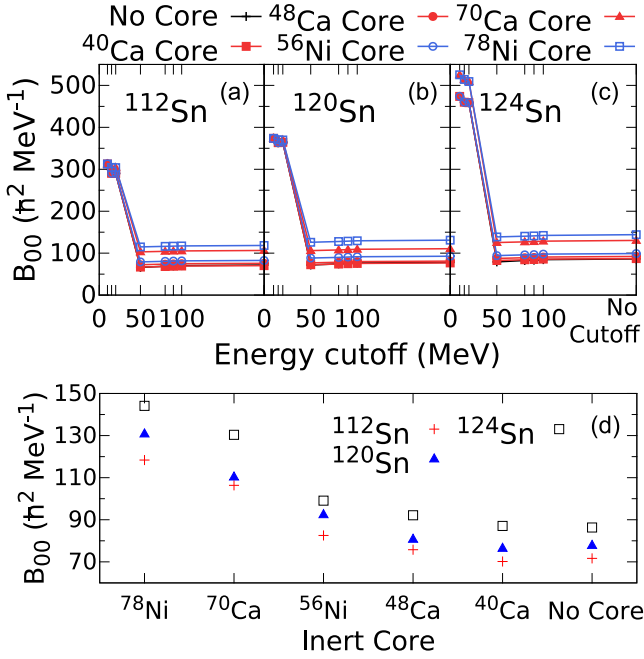


FIG. 3. (Color online) Evolution of B_{00} using Ca cores (filled points) and Ni cores (hollow points) as a function of the cutoff for (a) ^{112}Sn , (b) ^{120}Sn , and (c) ^{124}Sn . (d) Convergence with the core size without any cutoff.

IV. QRPA SPECTRA

Restricting the valence space appears to be an efficient way of saving computation time for the mass parameter calculation, but the robustness of this result and the underlying hypothesis, i.e., the low influence of the high-energy phonons in our mass parameter, have to be assessed. This can be achieved by examining the convergence scheme of QRPA intrinsic values such as the energy spectrum or the transition probabilities.

A. Cutoff on the 2-qp energy

Figure 4 shows the convergence of the 2_1^+ and 3_1^- energies and their reduced transition probabilities with the cutoff. The agreement between theoretical and experimental values of the 2_1^+ for tin isotopes can be found in Ref. [6] and will not be discussed here. Opposite trends are observed for the excited level energy and the associated transition probability of all the isotopes. Unlike mass parameters, the transition energies and probabilities do not reach convergence until a high-energy cutoff value. In order to reach the 10% difference, we need to extend our calculation up to 80 MeV and even 90 or 100 MeV for the 5% difference. For a 50-MeV 2-qp energy cutoff, the mass parameters are converged while the 2_1^+ and 3_1^- energies lie 30% away from the no-cutoff result. Mass parameters and QRPA phonon energies behave quite differently with respect to the 2-qp energy cutoff. Indeed, the high-energy 2-qp excitations appear not take an active part in mass parameters, when it is essential to get satisfactory phonon energies. In Fig. 4 we can also notice that the reduced transition probability is more sensitive to small energy cutoff values than the excited-state energy itself. Then the well-known

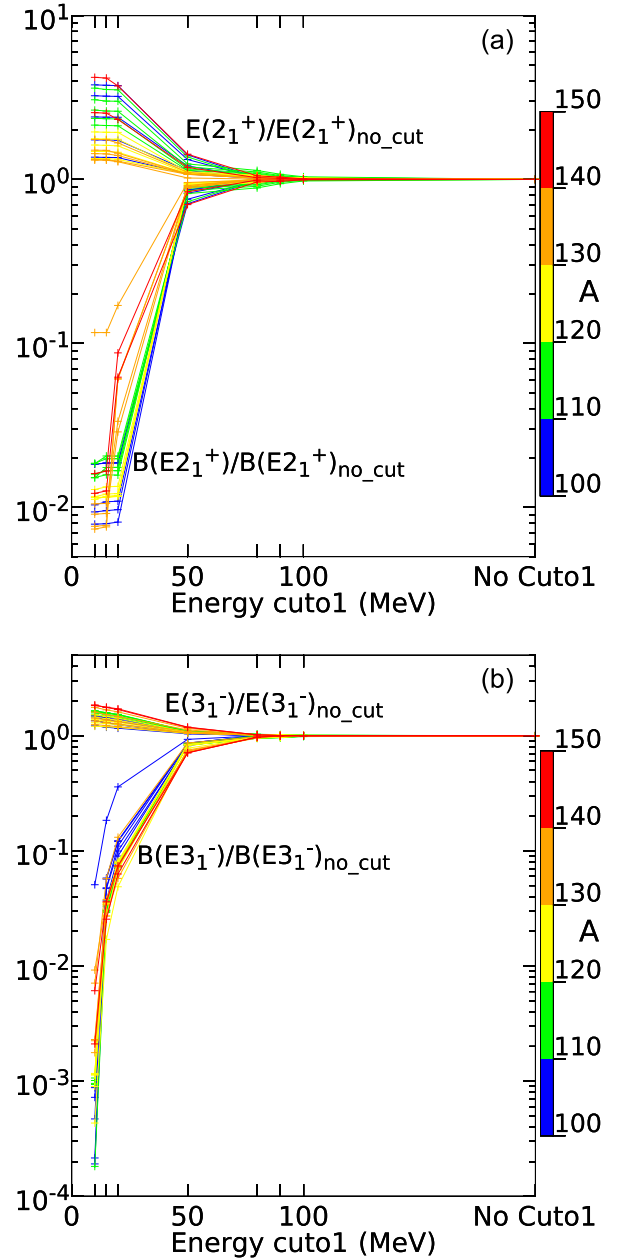


FIG. 4. (Color online) Relative variation of (a) $E(2_1^+)$, $B(E2_1^+, GS \rightarrow 2_1^+)$, $E(3_1^-)$ and (b) $E(3_1^-)$, $B(E3_1^-, GS \rightarrow 3_1^-)$ as a function of the cutoff for $^{100-144}\text{Sn}$.

relation [22]

$$E(2_1^+)B(E2_1^+) \propto ZA^{-1/3} \quad (13)$$

is violated for small-energy cutoff values.

B. Inert core

Let us now study the convergence of QRPA outputs as a function of the inert core size. We have performed calculations with different cores for $^{100-144}\text{Sn}$ but, as observed previously, they all follow a common trend and results for $^{112,120,124}\text{Sn}$ only are reported in Figs. 5 and 6. As for the cutoff study, transition energies and probabilities are much more sensitive

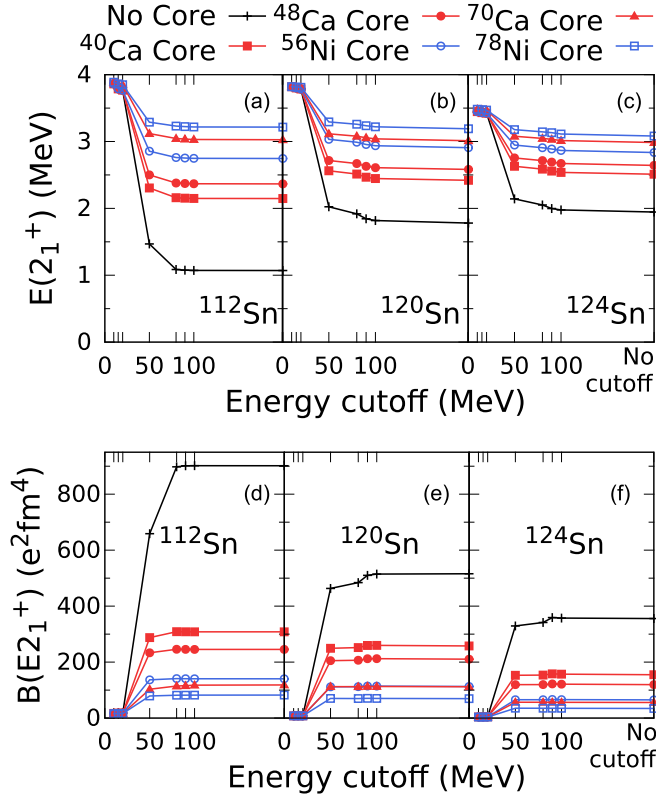


FIG. 5. (Color online) Evolution of $E(2_1^+)$ for (a) ^{112}Sn , (b) ^{120}Sn , (c) ^{124}Sn , and $B(E2_1^+, GS \rightarrow 2_1^+)$ for (d) ^{112}Sn , (e) ^{120}Sn , and (f) ^{124}Sn with the cutoff using different inert cores.

to the introduction of an inert core than mass parameters. None of the cores—even the smallest one of the set presented here—allows us to obtain a satisfying value. Indeed, ^{40}Ca -core calculation cannot reproduce the 2_1^+ properties, the transition probability is at least halved, and the energy is between 30 and 50% too high compared to the full-space calculation. Similar conclusions can be drawn for 3_1^- ; the eigenvalues (energy) converge more rapidly than the associated eigenvectors (X_n and Y_n used to build $B(E\lambda)$). It is worth noting that using an ^{16}O core, though clearly useless to reduce the computation time and thus not presented here, has proven to be extremely close to the no-core calculation.

By exhibiting the weak convergence properties of QRPA intrinsic quantities, this last study confirms the robustness of the QRPA mass parameter calculation with a valence space, including inert cores. Indeed, when imposing an inert core, one blocks high-energy qp excitations from deep qp levels, which play a weak role in the mass parameter value. On the contrary, they are found to play an important role in the excited-state energy and reduced transition probability. Consequently none of the inert cores can provide satisfying values of these quantities. Moreover, Fig. 5 demonstrates that whatever the inert core is, the evolution of $E(2_1^+)$ and $B(E2_1^+)$ as a function of the energy cutoff strongly resembles a convergence process. Nevertheless, this leads to values far from the expected no-core ones. Evaluating the product of $E(2_1^+)$ and $B(E2_1^+)$ could be helpful for choosing an appropriate valence space.

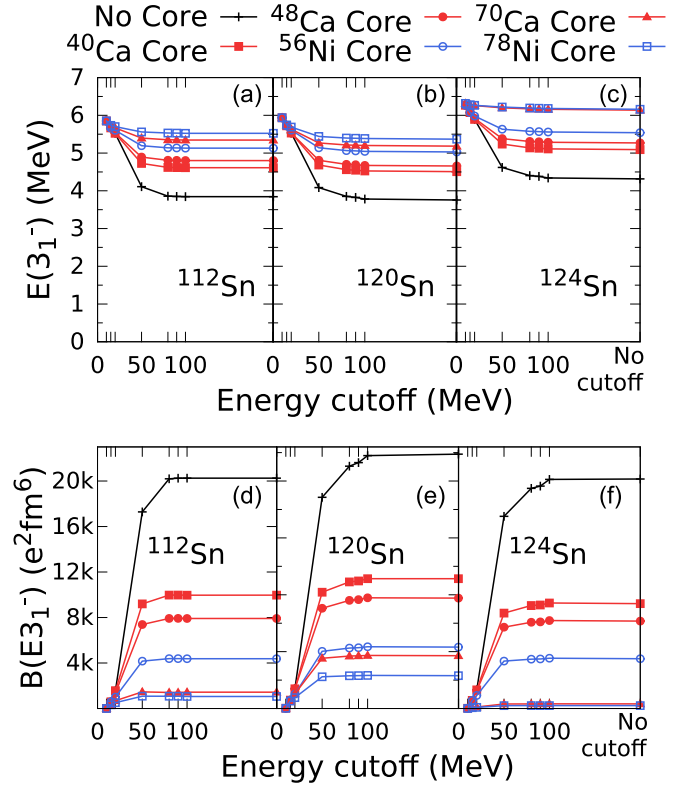


FIG. 6. (Color online) Evolution of $E(3_1^-)$ for (a) ^{112}Sn , (b) ^{120}Sn , (c) ^{124}Sn , and $B(E3_1^-, GS \rightarrow 3_1^-)$ for (d) ^{112}Sn , (e) ^{120}Sn , and (f) ^{124}Sn with the cutoff using different inert cores.

V. CONCLUSION

In this paper, we introduce a valence space for the calculation of even-even tin isotopes vibrational mass parameters in QRPA. The HFB 2-qp excitations entering the QRPA calculations are restricted by an energy cutoff and an inert core which define the valence space. This technique allows us to obtain vibrational mass parameters a la Thouless-Valatin, including more physics than those commonly used in the 5DCH approach. Indeed, using a valence space allows us to save computation time up to a factor of 30 compared to no-valence-space QRPA calculations. The rapidity of the convergence of the so-calculated mass parameter, as a function of the cutoff and the size of the inert core, is coherent with the fact that mass parameters do not require the inclusion of high-energy 2-qp excitations, in contrast with phonon energies; it validates our hypothesis. This convergence property leaves room for obtaining mass parameters in a reasonable computation time for deformed nuclei when the formalism is adapted to the case of constrained deformation far from the minimum of the potential energy surface. It would also allow us to face full (β, γ) mapping, when we are able to deal with triaxial systems in QRPA. The QRPA approach with a valence space that we are developing will contribute to broaden the amount of nuclear phenomena that can be described by the 5DCH, one of our most coherent and predictive tools for nuclear dynamics up to now.

Additionally, in this framework, we were able to show that phonon transition energies and reduced probabilities exhibit weak convergence properties. In particular, even with the small ^{40}Ca inert core, the 2_1^+ and 3_1^- energies are far from the no-core values. Thus in QRPA, caution should be taken when considering the calculation of intrinsic quantities (state energies, reduced transition probabilities) with a valence space. This result was expected as it is known that one should not use a universal effective interaction (like the Gogny force) when dealing with unreasonably small valence spaces. It is

worth noting that the convergence of intrinsic observables towards experimental values are of false appearance and thus misleading.

ACKNOWLEDGMENTS

F.L. acknowledges Marc Dupuis for his advice and the stimulating discussions while writing this paper and the DAM Ile-de-France for granting access to the TGCC supercomputers.

-
- [1] T. R. Rodríguez and J. L. Egido, *Phys. Rev. C* **81**, 064323 (2010).
 - [2] M. Bender and P.-H. Heenen, *Phys. Rev. C* **78**, 024309 (2008).
 - [3] B. Bally, B. Avez, M. Bender, and P. H. Heenen, *Phys. Rev. Lett.* **113**, 162501 (2014).
 - [4] J.-P. Delaroche, M. Girod, J. Libert, H. Goutte, S. Hilaire, S. Péru, N. Pillet, and G. F. Bertsch, *Phys. Rev. C* **81**, 014303 (2010).
 - [5] G. F. Bertsch, M. Girod, S. Hilaire, J.-P. Delaroche, H. Goutte, and S. Péru, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 032502 (2007).
 - [6] S. Péru and M. Martini, *Eur. Phys. J. A* **50**, 88 (2014).
 - [7] B. Mohammed-Azizi, *Electronic J. Theor. Phys.* **9**, 143 (2012).
 - [8] E. Kh. Yuldashbaeva, J. Libert, P. Quentin, and M. Girod, *Phys. Lett. B* **461**, 1 (1999).
 - [9] T. Nakatsukasa, T. Inakura, and K. Yabana, *Phys. Rev. C* **76**, 024318 (2007).
 - [10] J. Toivanen, B. G. Carlsson, J. Dobaczewski, K. Mizuyama, R. R. Rodríguez-Guzmán, P. Toivanen, and P. Veselý, *Phys. Rev. C* **81**, 034312 (2010).
 - [11] N. Hinohara, K. Sato, T. Nakatsukasa, M. Matsuo, and K. Matsuyanagi, *Phys. Rev. C* **82**, 064313 (2010).
 - [12] K. Yoshida and N. Hinohara, *Phys. Rev. C* **83**, 061302 (2011).
 - [13] K. Yoshida and N. V. Giai, *Phys. Rev. C* **78**, 064316 (2008).
 - [14] S. Péru, G. Gosselin, M. Martini, M. Dupuis, S. Hilaire, and J.-C. Devaux, *Phys. Rev. C* **83**, 014314 (2011).
 - [15] D. Vautherin, *Phys. Lett. B* **69**, 393 (1977).
 - [16] N. N. Bogoliubov, *Nuovo Cimento* **7**, 794 (1958).
 - [17] M. K. Pal, D. Zawischa, and J. Speth, *Z. Phys. A* **272**, 387 (1975).
 - [18] S. Goriely, S. Hilaire, M. Girod, and S. Péru, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 242501 (2009).
 - [19] S. Hilaire and M. Girod, *Eur. Phys. J. A* **33**, 237 (2007).
 - [20] S. Péru and H. Goutte, *Phys. Rev. C* **77**, 044313 (2008).
 - [21] J. Libert, J.-P. Delaroche, M. Girod, H. Goutte, S. Hilaire, S. Péru, N. Pillet, and G. F. Bertsch, *J. Phys.: Conf. Ser.* **205**, 012007 (2010).
 - [22] P. Ring and P. Schuck, *The Nuclear Many-Body Problem* (Springer-Verlag, New York, 1980), p. 15.

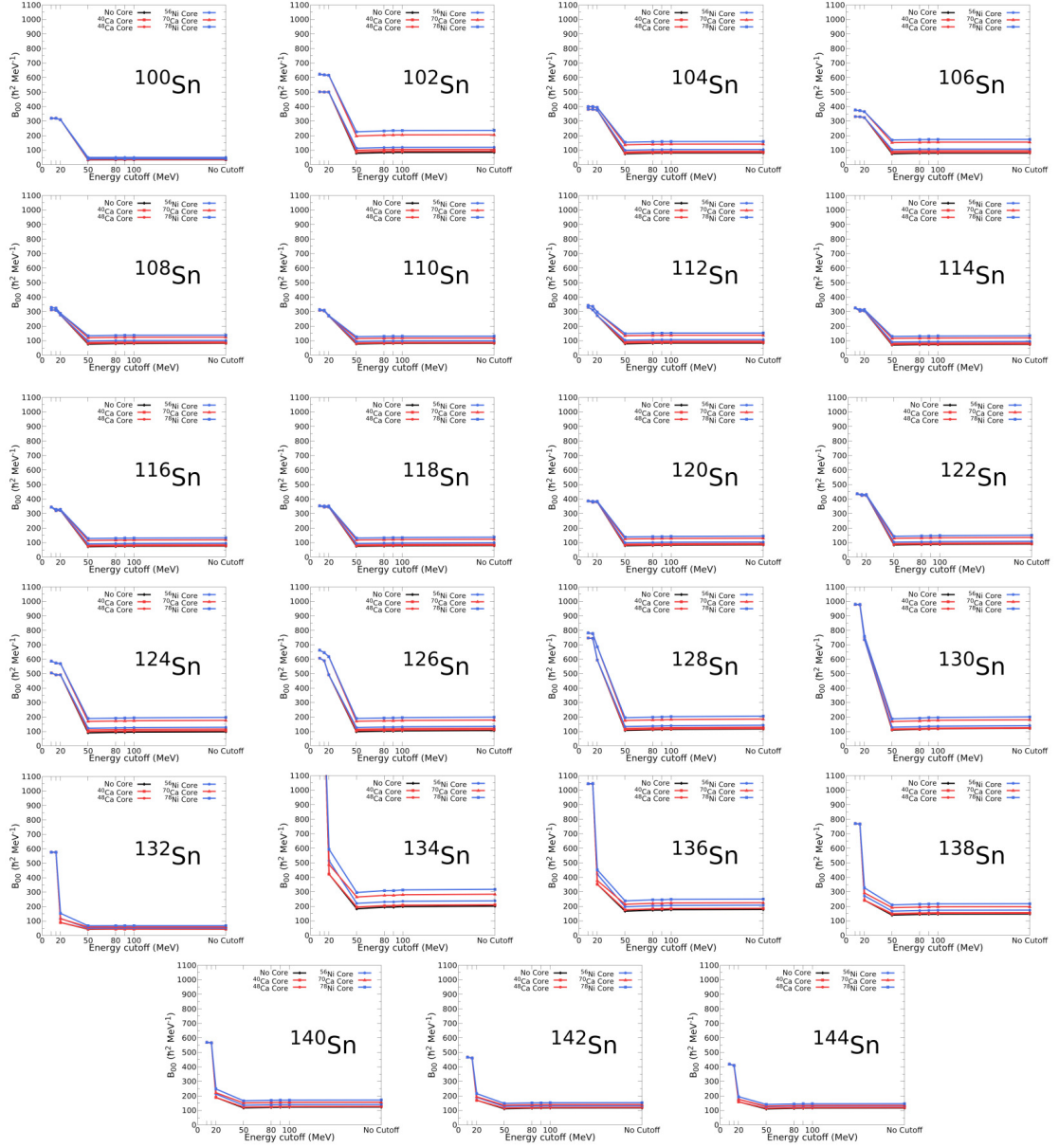


FIGURE 2-5 – Paramètre de masse B_{00} au point sphérique dans les étains pairs-pairs entre ^{100}Sn et ^{144}Sn en fonction de la troncature en énergie des paires de quasiparticules et de la taille du cœur inerte.

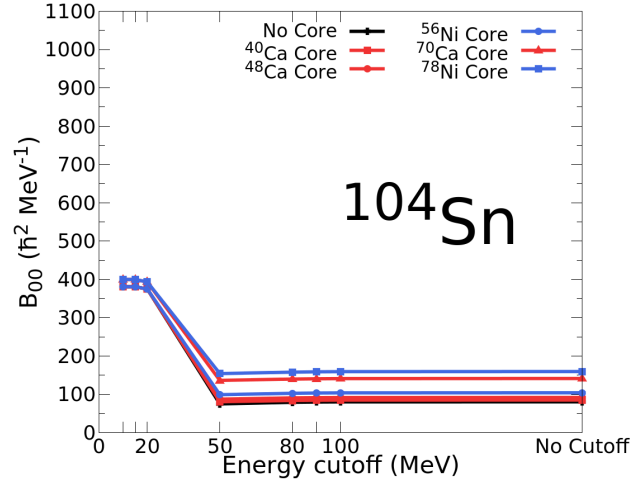


FIGURE 2-6 – Paramètre de masse B_{00} au point sphérique dans le ^{104}Sn en fonction de la troncature en énergie des paires de quasiparticules et de la taille du cœur inerte.

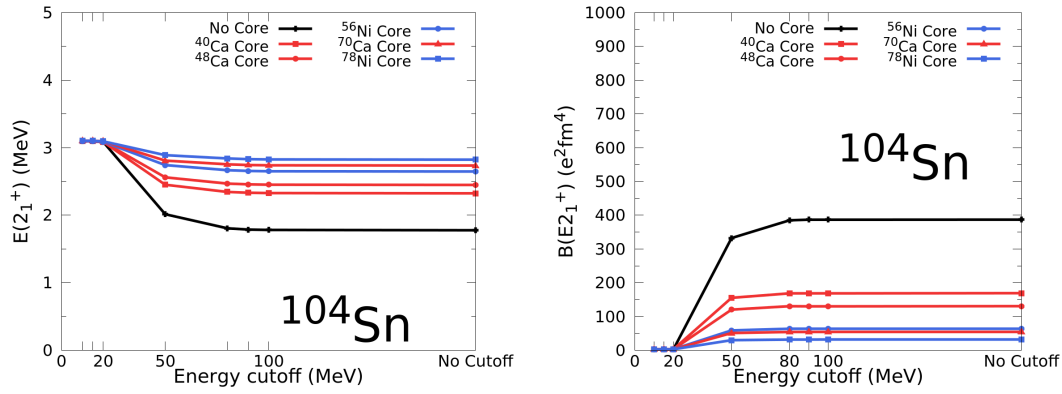


FIGURE 2-7 – Impact de la troncature en énergie des paires de quasiparticules et de la taille du cœur inerte dans le ^{104}Sn . À gauche : évolution de l'énergie du premier état excité 2^+ . À droite : probabilité de transition fondamental $\rightarrow 2_1^+$.

2.4.4 Impact du terme central de l'interaction sur les paramètres de masse

Pour calculer des paramètres de masse, nous avons besoin d'effectuer plusieurs calculs en différents points de déformation triaxiale. Avant de faire ces calculs à l'aide du code triaxial, restreint pour le moment au seul terme central comme nous le verrons au chapitre 4, nous cherchons à évaluer l'importance jouée par ce terme

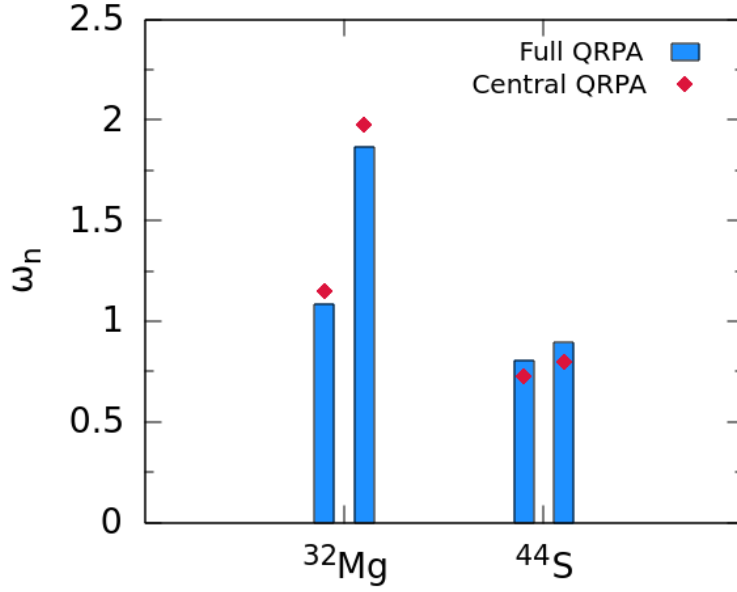


FIGURE 2-8 – Première valeurs propres obtenues par la QRPA avec l’interaction complète (barres bleues), et le terme central uniquement (losanges rouges).

de l’interaction de Gogny dans la valeur du paramètre de masse, à la manière du travail effectué dans [PBB05] pour différentes combinaisons de termes manquants.

Pour ces calculs, nous avons décidé d’utiliser la totalité de l’interaction de Gogny au niveau HFB. Les calculs sont effectués au minimum HFB dans chaque cas. Ensuite, nous calculons directement les paramètres de masse, puis nous lançons le calcul QRPA, une fois avec l’interaction complète, une autre fois avec le terme central uniquement. Mentionnons également que le ^{32}Mg possède son minimum HFB à $\beta = 0$ et que celui du ^{44}S se situe à $\beta = -0.25$ [PGB00].

Tout d’abord, nous pouvons voir dans la figure 2-8 l’effet d’une telle restriction sur les premières valeurs propres QRPA (énergies de phonons ω_n).

Il est intéressant de constater qu’en commençant par un calcul HFB avec l’interaction complète, et poursuivre avec un calcul QRPA ne comprenant que la partie centrale fournit d’ores et déjà des résultats satisfaisants (environ 5% d’écart pour le ^{32}Mg et 10% pour le ^{44}S) comparativement au calcul complet. Les valeurs propres

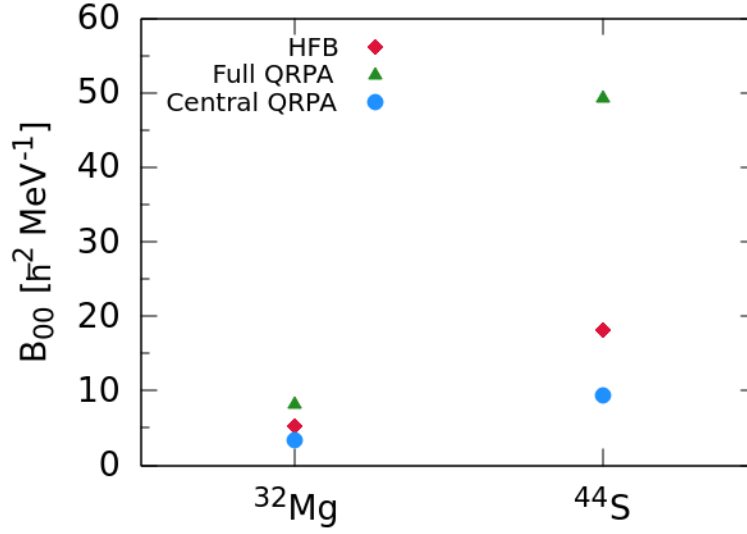


FIGURE 2-9 – Paramètre de masse vibrationnel B_{00} pour le ^{32}Mg et le ^{44}S . Les valeurs ont été calculées par HFB (losanges rouges) et par la QRPA, avec l'interaction complète (triangles verts) ou uniquement le terme central (points bleus).

ne semblent pas vraiment affectées par cette restriction.

Nous présentons maintenant des résultats pour le paramètre de masse B_{00} du ^{32}Mg et du ^{44}S dans les figures 2-9 et 2-10. Nous voyons immédiatement que le terme central de l'interaction effective de Gogny joue un rôle important pour le paramètre de masse. La figure 2-10 met en avant le fait qu'il peut contribuer à hauteur de 20% seulement, jusqu'à plus de 40% (la plage de valeurs est peut-être encore plus large pour d'autres noyaux). Sa contribution au paramètre de masse est cruciale, mais clairement insuffisante pour que ce dernier soit exploité en l'absence des autres termes. Malheureusement, il est impossible d'évaluer l'ordre de grandeur la valeur complète à partir de celle restreinte au seul terme central, contrairement à ce que l'on observe pour les valeurs propres. Toutefois, nous verrons dans la partie 4.1.6 de nouveaux résultats mettant en jeu le terme central pour des déformations triaxiales, afin de pousser un peu plus loin l'analyse de l'impact de ce terme de l'interaction et de tester le code triaxial.

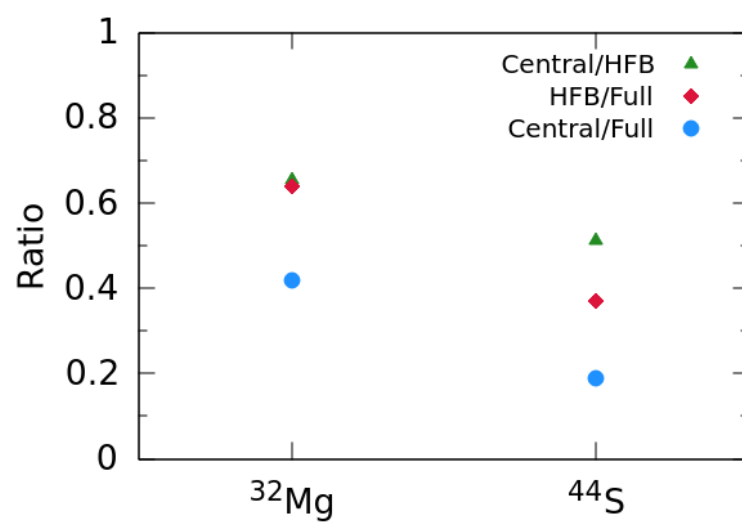


FIGURE 2-10 – Rapports des différents paramètres de masse présentés dans la figure 2-9.

Chapitre 3

Nouvelles implémentations numériques

Dans ce chapitre, je vais présenter mes contributions au code de calcul QRPA axial. Les modifications entreprises m’ont permis de me familiariser avec le modèle à différentes étapes, à savoir le calcul d’observables, comme traité dans la section 3.1, ou la sélection des paires de qp et le cœur du calcul, avec une intervention au niveau même de l’interaction, comme nous le verrons dans la partie 3.2.

3.1 Opérateurs de transitions multipolaires

Ici, on détaille dans un premier temps le calcul analytique des opérateurs de transitions électriques, puis une méthode originale, que j’ai développée, faisant intervenir le calcul matriciel. Cette formulation est particulièrement adaptée à la programmation avec des tableaux.

3.1.1 Calcul analytique des opérateurs

On utilisera la formulation des opérateurs de transition multipolaires électriques tels qu'ils sont définis dans [CTDL] :

$$\hat{Q}_{\lambda\mu} = \sqrt{\frac{4\pi}{2\lambda+1}} r^\lambda Y_{\lambda\mu}. \quad (3.1)$$

En symétrie axiale, les harmoniques sphériques étant des fonctions constituées des fonctions trigonométriques sinus et cosinus sous la forme de $\sin\theta$ et $\cos\theta$ ainsi que d'exponentielles sous la forme $e^{i\varphi}$, on reprend la notation précédemment utilisée :

$$z = r \cos\theta, \quad (3.2)$$

$$r_\perp = r \sin\theta. \quad (3.3)$$

Cela permet d'exprimer facilement les moments multipolaires en fonction de 3 opérateurs élémentaires z , $r_\perp^2$ et $r_\perp e^{i\varphi}$ à des puissances variées, comme on peut s'en convaincre en se reportant à l'annexe C.

3.1.1.1 Action des opérateurs sur les états quantiques¹

Comme cela a été dit précédemment, il convient de dissocier l'action des 3 opérateurs z , $r_\perp^2$ et $r_\perp e^{i\varphi}$, étant donné que tout opérateur de transition $\hat{Q}_{\lambda\mu}$ s'exprime selon un ou plusieurs produits de puissances de ces opérateurs $(z)^k (r_\perp^2)^p (r_\perp e^{i\varphi})^q$. Il suffirait donc de déterminer l'action d'une puissance quelconque de chacune de ces opérateurs pour pouvoir obtenir facilement les opérateurs de transitions multipolaires.

Dans les calculs qui suivent, on omettra l'argument des polynômes de Hermite

1. Dans cette partie, l'équivalence entre les représentations 'ket' et fonction sera simplement symbolisée par le signe égal.

et de Laguerre pour alléger l'écriture. On notera donc ² :

$$H_{n_z} = H_{n_z}(z\sqrt{\alpha}),$$

$$L_{n_\perp}^{|m|} = L_{n_\perp}^{|m|}(\beta r_\perp^2).$$

Action de z : L'opérateur z n'agit que sur la partie axiale des états, en influant uniquement sur le nombre quantique n_z :

$$z|n_z\rangle = \frac{1}{\sqrt{\alpha}} z\sqrt{\alpha} |n_z\rangle \quad (3.4)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{\alpha}} z\sqrt{\alpha} \left\{ \sqrt[4]{\frac{\alpha}{\pi}} \sqrt{\frac{1}{2^{n_z} n_z!}} e^{-\frac{\alpha z^2}{2}} H_{n_z} \right\} \quad (3.5)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{\alpha}} \left\{ \sqrt[4]{\frac{\alpha}{\pi}} \sqrt{\frac{1}{2^{n_z} n_z!}} e^{-\frac{\alpha z^2}{2}} z\sqrt{\alpha} H_{n_z} \right\} \quad (3.6)$$

À l'aide de la relation (1.40), on peut réécrire l'égalité sous la forme :

$$z|n_z\rangle = \frac{1}{\sqrt{\alpha}} \left\{ \sqrt[4]{\frac{\alpha}{\pi}} \sqrt{\frac{1}{2^{n_z} n_z!}} e^{-\frac{\alpha z^2}{2}} \left[\frac{1}{2} H_{n_z+1} + n_z H_{n_z-1} \right] \right\} \quad (3.7)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{\alpha}} \left\{ \sqrt[4]{\frac{\alpha}{\pi}} \frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{2^{n_z} n_z!}} e^{-\frac{\alpha z^2}{2}} H_{n_z+1} + \sqrt[4]{\frac{\alpha}{\pi}} n_z \sqrt{\frac{1}{2^{n_z} n_z!}} e^{-\frac{\alpha z^2}{2}} H_{n_z-1} \right\} \quad (3.8)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{\alpha}} \left\{ \sqrt[4]{\frac{\alpha}{\pi}} \sqrt{\frac{n_z+1}{2}} \sqrt{\frac{1}{2^{n_z+1} (n_z+1)!}} e^{-\frac{\alpha z^2}{2}} H_{n_z+1} \right. \\ \left. + \sqrt[4]{\frac{\alpha}{\pi}} \sqrt{\frac{n_z}{2}} \sqrt{\frac{1}{2^{n_z-1} (n_z-1)!}} e^{-\frac{\alpha z^2}{2}} H_{n_z-1} \right\} \quad (3.9)$$

On obtient finalement la décomposition suivante :

$$z|n_z\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\alpha}} \left\{ \sqrt{n_z+1} |n_z+1\rangle + \sqrt{n_z} |n_z-1\rangle \right\} \quad (3.10)$$

2. On rappelle qu'ici, β n'est pas la coordonnée associée à la déformation.

L'opérateur z fait passer d'un état de n_z donné vers les deux états ayant un n_z immédiatement supérieur et inférieur sans modifier $n_{\perp}$ ou m .

Action de $r_{\perp}^2$: L'opérateur $r_{\perp}^2$ agit, lui, uniquement sur le nombre quantique $n_{\perp}$:

$$r_{\perp}^2 |n_{\perp}, m\rangle = \frac{1}{\beta} \beta r_{\perp}^2 |n_{\perp}, m\rangle \quad (3.11)$$

$$= \frac{1}{\beta} \beta r_{\perp}^2 \left\{ \sqrt{\frac{\beta}{\pi}} \sqrt{\frac{n_{\perp}!}{(n_{\perp} + |m|)!}} e^{-\frac{\beta r_{\perp}^2}{2}} (\sqrt{\beta} r_{\perp})^{|m|} L_{n_{\perp}}^{|m|} e^{im\phi} \right\} \quad (3.12)$$

$$= \frac{1}{\beta} \left\{ \sqrt{\frac{\beta}{\pi}} \sqrt{\frac{n_{\perp}!}{(n_{\perp} + |m|)!}} e^{-\frac{\beta r_{\perp}^2}{2}} (\sqrt{\beta} r_{\perp})^{|m|} \beta r_{\perp}^2 L_{n_{\perp}}^{|m|} e^{im\phi} \right\} \quad (3.13)$$

On utilise la relation (1.42) pour poursuivre le calcul :

$$r_{\perp}^2 |n_{\perp}, m\rangle = \frac{1}{\beta} \left\{ \sqrt{\frac{\beta}{\pi}} \sqrt{\frac{n_{\perp}!}{(n_{\perp} + |m|)!}} e^{-\frac{\beta r_{\perp}^2}{2}} (\sqrt{\beta} r_{\perp})^{|m|} \left[(n_{\perp} + |m|) L_{n_{\perp}}^{|m|-1} - (n_{\perp} + 1) L_{n_{\perp}+1}^{|m|-1} \right] e^{im\phi} \right\} \quad (3.14)$$

La formule (1.43) nous permet de retrouver des polynômes de degré $|m|$:

$$r_{\perp}^2 |n_{\perp}, m\rangle = \frac{1}{\beta} \left\{ \sqrt{\frac{\beta}{\pi}} \sqrt{\frac{n_{\perp}!}{(n_{\perp} + |m|)!}} e^{-\frac{\beta r_{\perp}^2}{2}} (\sqrt{\beta} r_{\perp})^{|m|} \left[(n_{\perp} + |m|) \left(L_{n_{\perp}}^{|m|} - L_{n_{\perp}-1}^{|m|} \right) - (n_{\perp} + 1) \left(L_{n_{\perp}+1}^{|m|} - L_{n_{\perp}}^{|m|} \right) \right] e^{im\phi} \right\} \quad (3.15)$$

Il reste à simplifier l'expression trouvée :

$$r_{\perp}^2 |n_{\perp}, m\rangle = \frac{1}{\beta} \left\{ \sqrt{\frac{\beta}{\pi}} (2n_{\perp} + |m| + 1) \sqrt{\frac{n_{\perp}!}{(n_{\perp} + |m|)!}} e^{-\frac{\beta r_{\perp}^2}{2}} (\sqrt{\beta} r_{\perp})^{|m|} L_{n_{\perp}}^{|m|} e^{im\phi} \right. \quad (3.16)$$

$$- \sqrt{\frac{\beta}{\pi}} (n_{\perp} + |m|) \sqrt{\frac{n_{\perp}!}{(n_{\perp} + |m|)!}} e^{-\frac{\beta r_{\perp}^2}{2}} (\sqrt{\beta} r_{\perp})^{|m|} L_{n_{\perp}-1}^{|m|} e^{im\phi} \\ \left. - \sqrt{\frac{\beta}{\pi}} (n_{\perp} + 1) \sqrt{\frac{n_{\perp}!}{(n_{\perp} + |m|)!}} e^{-\frac{\beta r_{\perp}^2}{2}} (\sqrt{\beta} r_{\perp})^{|m|} L_{n_{\perp}+1}^{|m|} e^{im\phi} \right\}$$

$$= \frac{1}{\beta} \left\{ \sqrt{\frac{\beta}{\pi}} (2n_{\perp} + |m| + 1) \sqrt{\frac{n_{\perp}!}{(n_{\perp} + |m|)!}} e^{-\frac{\beta r_{\perp}^2}{2}} (\sqrt{\beta} r_{\perp})^{|m|} L_{n_{\perp}}^{|m|} e^{im\phi} \right. \quad (3.17)$$

$$- \sqrt{\frac{\beta}{\pi}} \sqrt{n_{\perp}(n_{\perp} + |m|)} \sqrt{\frac{(n_{\perp} - 1)!}{(n_{\perp} - 1 + |m|)!}} e^{-\frac{\beta r_{\perp}^2}{2}} (\sqrt{\beta} r_{\perp})^{|m|} L_{n_{\perp}-1}^{|m|} e^{im\phi} \\ \left. - \sqrt{\frac{\beta}{\pi}} \sqrt{(n_{\perp} + 1)(n_{\perp} + 1 + |m|)} \sqrt{\frac{(n_{\perp} + 1)!}{(n_{\perp} + 1 + |m|)!}} e^{-\frac{\beta r_{\perp}^2}{2}} (\sqrt{\beta} r_{\perp})^{|m|} L_{n_{\perp}+1}^{|m|} e^{im\phi} \right\}$$

Finalement, la décomposition issue de l'action de $r_{\perp}^2$ sur un état quantique $|n_{\perp}, m\rangle$ est :

$$r_{\perp}^2 |n_{\perp}, m\rangle = \frac{1}{\beta} \left\{ (2n_{\perp} + |m| + 1) |n_{\perp}, m\rangle - \sqrt{n_{\perp}(n_{\perp} + |m|)} |n_{\perp} - 1, m\rangle \right. \quad (3.18) \\ \left. - \sqrt{(n_{\perp} + 1)(n_{\perp} + 1 + |m|)} |n_{\perp} + 1, m\rangle \right\}$$

L'opérateur $r_{\perp}^2$ envoie un état de $n_{\perp}$ donné vers les deux états ayant un $n_{\perp}$ immédiatement supérieur et inférieur mais également sur lui-même, et ce, sans modifier m ou n_z .

Action de $r_{\perp}e^{i\varphi}$: L'opérateur $r_{\perp}e^{i\varphi}$ agit, quant à lui, à la fois sur $n_{\perp}$ et sur m :

$$r_{\perp}e^{i\varphi}|n_{\perp}, m\rangle = \frac{1}{\sqrt{\beta}}\sqrt{\beta}r_{\perp}e^{i\varphi}|n_{\perp}, m\rangle \quad (3.19)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{\beta}}\sqrt{\beta}r_{\perp}e^{i\varphi} \left\{ \sqrt{\frac{\beta}{\pi}} \sqrt{\frac{n_{\perp}!}{(n_{\perp} + |m|)!}} e^{-\frac{\beta r_{\perp}^2}{2}} (\sqrt{\beta}r_{\perp})^{|m|} L_{n_{\perp}}^{|m|} e^{im\phi} \right\} \quad (3.20)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{\beta}} \left\{ \sqrt{\frac{\beta}{\pi}} \sqrt{\frac{n_{\perp}!}{(n_{\perp} + |m|)!}} e^{-\frac{\beta r_{\perp}^2}{2}} (\sqrt{\beta}r_{\perp})^{|m|+1} L_{n_{\perp}}^{|m|} e^{i(m+1)\phi} \right\} \quad (3.21)$$

Deux cas de figure se présentent :

$$i) \ m \geq 0, |m+1| = |m| + 1,$$

$$ii) \ m \leq -1, |m+1| = |m| - 1 \text{ donc } |m| + 1 = |m+1| + 2.$$

i) $m \geq 0$

$$r_{\perp}e^{i\varphi}|n_{\perp}, m\rangle = \frac{1}{\sqrt{\beta}} \left\{ \sqrt{\frac{\beta}{\pi}} \sqrt{\frac{n_{\perp}!}{(n_{\perp} + |m|)!}} e^{-\frac{\beta r_{\perp}^2}{2}} (\sqrt{\beta}r_{\perp})^{|m+1|} L_{n_{\perp}}^{|m|} e^{i(m+1)\phi} \right\} \quad (3.22)$$

On utilise la relation (1.43) pour obtenir des polynômes de degré $|m+1|$:

$$r_{\perp}e^{i\varphi}|n_{\perp}, m\rangle = \frac{1}{\sqrt{\beta}} \left\{ \sqrt{\frac{\beta}{\pi}} \sqrt{\frac{n_{\perp}!}{(n_{\perp} + |m|)!}} e^{-\frac{\beta r_{\perp}^2}{2}} (\sqrt{\beta}r_{\perp})^{|m+1|} \left(L_{n_{\perp}}^{|m+1|} - L_{n_{\perp}-1}^{|m+1|} \right) e^{i(m+1)\phi} \right\} \quad (3.23)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{\beta}} \left\{ \sqrt{\frac{\beta}{\pi}} \sqrt{\frac{n_{\perp}!}{(n_{\perp} + |m+1|)!}} \sqrt{(n_{\perp} + |m+1|)} e^{-\frac{\beta r_{\perp}^2}{2}} (\sqrt{\beta}r_{\perp})^{|m+1|} L_{n_{\perp}}^{|m+1|} e^{i(m+1)\phi} \right. \quad (3.24)$$

$$\left. - \sqrt{\frac{\beta}{\pi}} \sqrt{\frac{(n_{\perp}-1)!}{(n_{\perp} + |m|)!}} \sqrt{n_{\perp}} e^{-\frac{\beta r_{\perp}^2}{2}} (\sqrt{\beta}r_{\perp})^{|m+1|} L_{n_{\perp}-1}^{|m+1|} e^{i(m+1)\phi} \right\}$$

Ce qui amène à l'équation suivante, valable pour $m \geq 0$:

$$r_{\perp} e^{i\varphi} |n_{\perp}, m\rangle = \frac{1}{\sqrt{\beta}} \left\{ \sqrt{n_{\perp} + |m + 1|} |n_{\perp}, m + 1\rangle - \sqrt{n_{\perp}} |n_{\perp} - 1, m + 1\rangle \right\} \quad (3.25)$$

ii) $m \leq -1$

$$r_{\perp} e^{i\varphi} |n_{\perp}, m\rangle = \frac{1}{\sqrt{\beta}} \left\{ \sqrt{\frac{\beta}{\pi}} \sqrt{\frac{n_{\perp}!}{(n_{\perp} + |m|)!}} e^{-\frac{\beta r_{\perp}^2}{2}} (\sqrt{\beta} r_{\perp})^{|m+1|} (\beta r_{\perp}^2) L_{n_{\perp}}^{|m|} e^{i(m+1)\phi} \right\} \quad (3.26)$$

On utilise encore une fois la relation (1.42) pour obtenir le degré voulu :

$$r_{\perp} e^{i\varphi} |n_{\perp}, m\rangle = \frac{1}{\sqrt{\beta}} \left\{ \sqrt{\frac{\beta}{\pi}} \sqrt{\frac{n_{\perp}!}{(n_{\perp} + |m|)!}} e^{-\frac{\beta r_{\perp}^2}{2}} (\sqrt{\beta} r_{\perp})^{|m+1|} [(n_{\perp} + |m|) L_{n_{\perp}}^{|m|-1} \right. \quad (3.27)$$

$$\left. - (n_{\perp} + 1) L_{n_{\perp}+1}^{|m|-1}] e^{i(m+1)\phi} \right\}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{\beta}} \left\{ \sqrt{\frac{\beta}{\pi}} \sqrt{\frac{n_{\perp}!}{(n_{\perp} + |m| - 1)!}} \frac{n_{\perp} + |m|}{\sqrt{n_{\perp} + |m|}} e^{-\frac{\beta r_{\perp}^2}{2}} (\sqrt{\beta} r_{\perp})^{|m+1|} L_{n_{\perp}}^{|m+1|} e^{i(m+1)\phi} \right. \quad (3.28)$$

$$\left. - \sqrt{\frac{\beta}{\pi}} \sqrt{\frac{(n_{\perp} + 1)!}{(n_{\perp} + 1 + |m| - 1)!}} \sqrt{n_{\perp} + 1} e^{-\frac{\beta r_{\perp}^2}{2}} (\sqrt{\beta} r_{\perp})^{|m+1|} L_{n_{\perp}+1}^{|m+1|} e^{i(m+1)\phi} \right\}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{\beta}} \left\{ \sqrt{\frac{\beta}{\pi}} \sqrt{\frac{n_{\perp}!}{(n_{\perp} + |m + 1|)!}} \sqrt{n_{\perp} + |m|} e^{-\frac{\beta r_{\perp}^2}{2}} (\sqrt{\beta} r_{\perp})^{|m+1|} L_{n_{\perp}}^{|m+1|} e^{i(m+1)\phi} \right. \quad (3.29)$$

$$\left. - \sqrt{\frac{\beta}{\pi}} \sqrt{\frac{(n_{\perp} + 1)!}{(n_{\perp} + |m|)!}} \sqrt{n_{\perp} + 1} e^{-\frac{\beta r_{\perp}^2}{2}} (\sqrt{\beta} r_{\perp})^{|m+1|} L_{n_{\perp}+1}^{|m+1|} e^{i(m+1)\phi} \right\}$$

On arrive à l'expression en notation de Dirac pour $m \leq -1$:

$$r_{\perp} e^{i\varphi} |n_{\perp}, m\rangle = \frac{1}{\sqrt{\beta}} \left\{ \sqrt{(n_{\perp} + |m|)} |n_{\perp}, m+1\rangle - \sqrt{n_{\perp} + 1} |n_{\perp} + 1, m+1\rangle \right\} \quad (3.30)$$

Une fois ces calculs faits pour l'ordre 1, on concède assez rapidement qu'il serait très fastidieux de procéder de la même façon pour les puissances supérieures. Pour cela, on doit établir des formules généralisant les formules (3.10), (3.18), (3.25) et (3.30) permettant d'obtenir une décomposition des différents états sur la base des polynômes orthogonaux à partir des formules de récurrence de base.

3.1.1.2 Récurrence des opérateurs

Étant donné que les opérateurs $r_{\perp}^2$ et $r_{\perp} e^{i\varphi}$ agissent tous les deux sur le nombre quantique $n_{\perp}$, on choisit de regrouper leur action sur un état quantique sous la forme $(\beta r_{\perp}^2)^p (\sqrt{\beta} r_{\perp} e^{i\phi})^q$ où p et q sont des entiers naturels quelconques.

Les formules (1.42) et (1.43) peuvent être généralisées sous la forme :

$$(\beta r_{\perp}^2)^k L_n^{|m|} = \sum_{i=0}^k (-1)^i C_k^i \frac{(n + |m|)!}{(n + |m| - k + i)!} \frac{(n + i)!}{n!} L_{n+i}^{|m|-k}, \quad (3.31)$$

$$L_n^{|m|} = \sum_{i=0}^l (-1)^i C_l^i L_{n-i}^{|m|+l}. \quad (3.32)$$

Grâce aux formules (3.31) et (3.32), on peut établir la formule analytique de décomposition des états due à l'action des opérateurs $\beta r_{\perp}^2$ et $\sqrt{\beta} r_{\perp} e^{i\phi}$ agissant respectivement uniquement sur $n_{\perp}$ pour le premier et sur $n_{\perp}$ et m pour le second, à des puissances quelconques :

$$(\beta r_{\perp}^2)^p (\sqrt{\beta} r_{\perp} e^{i\phi})^q |n_{\perp}, m, n_z\rangle =$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{j=0}^p \sum_{k=0}^{p+q} (-1)^{j+k} C_p^j C_{p+q}^k \sqrt{\frac{(n_{\perp} + |m|)!(n_{\perp} + j)!}{n_{\perp}!(n_{\perp} + j - k + |m + q|)!}} \\
&\quad \times \sqrt{\frac{(n_{\perp} + j)!}{(n_{\perp} + j - k)!}} |n_{\perp} + j - k, m + q, n_z\rangle
\end{aligned} \tag{3.33}$$

Pour $m \geq 0$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{j=0}^{|m|+p} \sum_{k=0}^{|m|+p+q} (-1)^{j+k} C_{|m|+p}^j C_{|m|+p+q}^k \sqrt{\frac{(n_{\perp} + |m|)!(n_{\perp} + j - k + |m + q|)!}{n_{\perp}!(n_{\perp} + j - k)!}} \\
&\quad \times \frac{(n_{\perp} + j)!}{(n_{\perp} + j - p)!} |n_{\perp} + j - k, m + q, n_z\rangle
\end{aligned} \tag{3.34}$$

Pour $m < 0$ et $|m| < q$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{j=0}^p \sum_{k=0}^{p+q} (-1)^{j+k} C_{p+q}^j C_p^k \sqrt{\frac{(n_{\perp} + |m|)!(n_{\perp} + j - k + |m + q|)!}{n_{\perp}!(n_{\perp} + j - k)!}} \\
&\quad \times \frac{(n_{\perp} + j)!}{(n_{\perp} + j - |m + q| - p)!} |n_{\perp} + j - k, m + q, n_z\rangle
\end{aligned} \tag{3.35}$$

Pour $m < 0$ et $|m| \geq q$

Malheureusement, trouver de telles formules de récurrence généralisées s'avère être une tâche extrêmement ardue pour l'action de l'opérateur z sur les polynômes de Hermite. Par conséquent, dans la partie suivante, nous décidons de passer en représentation matricielle afin de solutionner le problème.

3.1.2 Formulation matricielle

Pour généraliser l'action de l'opérateur z à une puissance quelconque sur les polynômes de Hermite, on utilise une représentation matricielle.

3.1.2.1 Expression des matrices associées

J'ai choisi de résoudre le problème par l'algèbre, en considérant l'action de l'opérateur à la puissance 1 sur H_n sous forme d'une matrice creuse de taille $2k+1$:

$$M_z = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2} & & & & \\ n+k & 0 & \frac{1}{2} & & & \\ & n+k-1 & 0 & \frac{1}{2} & & \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & & 0 & \frac{1}{2} \\ & & & & n-k+2 & 0 \\ & & & & & n-k+1 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.36)$$

Cette matrice agit sur l'équivalent de H_n en notation matricielle, à savoir le vecteur de dimension $2k+1$ dans la base des polynômes de Hermite :

$$V_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.37)$$

La première ligne correspond au polynôme H_{n+k} , et l'on décrémente les indices de 1 en 1 jusqu'à la ligne $2k+1$ qui correspond à H_{n-k} . L'équivalent de l'équation

(1.40) s'écrit alors :

$$MV_0 = V_1, \text{ avec } V_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \frac{1}{2} \\ 0 \\ n \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.38)$$

On peut vérifier que l'on retrouve bien la récurrence de base :

$$zH_n(z) = \frac{1}{2}H_{n+1}(z) + nH_{n-1}(z). \quad (3.39)$$

On en déduit aisément l'action de z à la puissance k :

$$M^k V_0 = V_k, \text{ avec } V_k = \begin{pmatrix} \alpha_{n+k} \\ \vdots \\ \alpha_n \\ \vdots \\ \alpha_{n-k} \end{pmatrix} \quad (3.40)$$

Les coefficients α_{n+i} sont entièrement déterminés dès que l'on a calculé la puissance k -ième de M . On peut donc à présent intégrer le calcul de cette puissance dans le code afin d'obtenir, en interne, la décomposition selon les n_z .

Un raisonnement semblable peut être appliqué pour les opérateurs $r_\perp^2$ et $r_\perp e^{i\phi}$, avec toutefois une grande différence puisque ces opérateurs agissent tous deux sur le nombre quantique $n_\perp$ et ils dépendent de la valeur de m .

$$M_{r_{\perp}^2} = \begin{pmatrix} |m| + 1 & -\sqrt{|m| + 1} & & & & \\ -\sqrt{|m| + 1} & |m| + 3 & -\sqrt{2(|m| + 2)} & & & \\ & -\sqrt{2(|m| + 2)} & & & & \\ & & \ddots & & & \\ & & & \ddots & & \\ & & & & \ddots & \\ & & & & & -\sqrt{N'(N' + |m|)} \\ & & & & -\sqrt{N'(N' + |m|)} & N' + |m| \end{pmatrix}, \quad (3.41)$$

avec $N' = \frac{N_0}{2} - 1$.

Attention, pour $r_{\perp}e^{i\phi}$, il ne faut pas oublier que l'opérateur agit également sur m , ce qui induit une difficulté supplémentaire, puisque lorsqu'il est appliqué sur un état avec le nombre quantique m , il le fait passer à un état ayant pour nombre quantique $m + 1$. Cela est particulièrement important lorsque l'on cherche une puissance de $r_{\perp}e^{i\phi}$.

$$M_{r_{\perp}^2}^{(m)} = \begin{pmatrix} \sqrt{|m|+1} & -\sqrt{1} & & & & \\ & \sqrt{|m|+2} & -\sqrt{2} & & & \\ & & & \ddots & \ddots & \\ & & & & & -\sqrt{N_0} \\ & & & & & \sqrt{|m|+N_0+1} \end{pmatrix}. \quad (3.42)$$

Ici, l'exposant (m) ne doit pas être compris comme une puissance mais comme un indice nous renseignant sur la valeur de m considérée. Pour être tout à fait complet, il faut préciser que cette matrice est valable pour des valeurs de $m \geq 0$. Pour obtenir les matrices associées aux valeurs de m négatives, on peut utiliser la formule suivante faisant intervenir la transposée de $M_{r_{\perp} e^{i\phi}}$:

$$M_{r_{\perp} e^{i\phi}}^{(-|m|)} = M_{r_{\perp} e^{i\phi}}^{(|m|-1)\top}. \quad (3.43)$$

Ces trois matrices suffisent à calculer tous les opérateurs qui nous intéressent.

La figure 3-1 fournit une représentation schématique visuelle de l'action des opérateurs de transitions $\hat{Q}_{\lambda\mu}$ (et donc des matrices sous-jacentes).

En partant d'un état *pur* défini par trois nombres quantiques (ici $n_{\perp}$, m et n_z) et placé dans un repère orthonormé, on obtient, suite à l'action de l'opérateur, une dispersion autour de cet état initial dans le cube d'états quantiques. La complexité de cette dispersion dépend de l'ordre de l'opérateur.

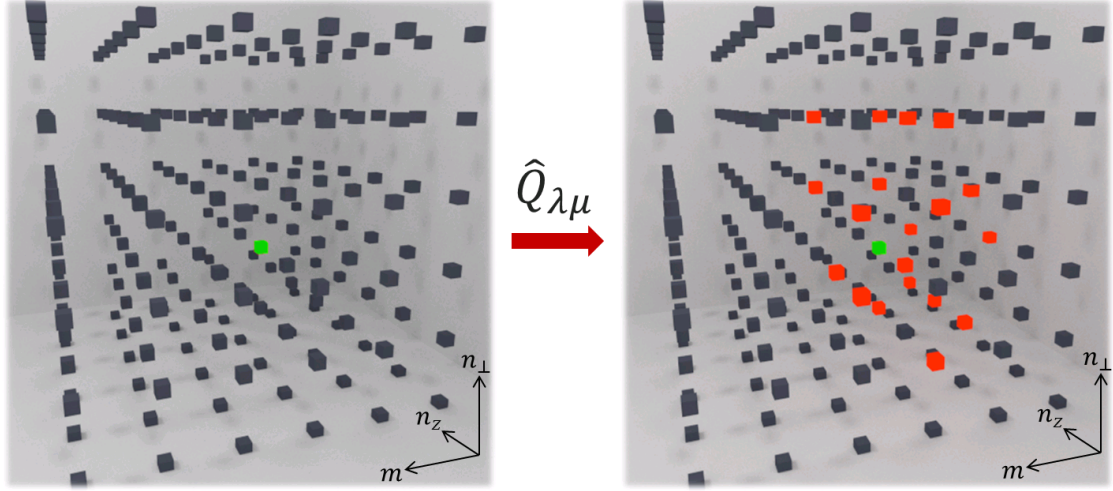


FIGURE 3-1 – Représentation schématique de la dispersion due à l'action d'un opérateur $\hat{Q}_{\lambda\mu}$ sur un état quantique donné.

3.1.2.2 Écriture des nouveaux opérateurs

En prenant en compte la nouvelle façon d'écrire les opérateurs élémentaires, on peut réécrire les opérateurs de transitions multipolaires. On ne fera pas ici la liste de tous les opérateurs, mais le lecteur intéressé pourra se reporter à l'annexe C.2 qui sert de formulaire.

3.1.3 Validation des opérateurs

Le code de calcul dans lequel on implémente les évaluations des moments hexadécapolaires et au-delà est programmé en langage FORTRAN et repose sur l'utilisation de *subroutines* - des fonctions - pour chacun des moments (entre autres ...). On parcourt les états possibles dans le cube d'états quantiques par l'intermédiaire de boucles sur les nombres quantiques ($n_{\perp}$, m et n_z) dont les limites sont imposées par le choix de la taille de base, comme montré au 1.4.3.3.

Une fois les opérateurs de transitions d'ordre supérieurs programmés, il est nécessaire de les valider pour vérifier qu'ils donnent les résultats attendus. Pour cela,

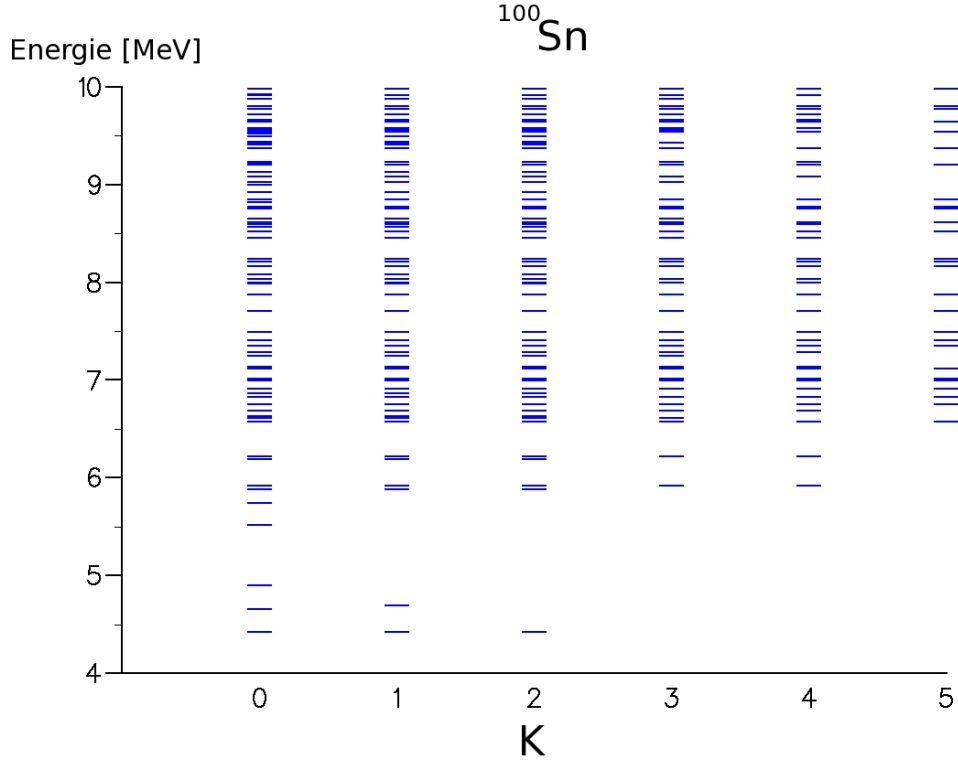


FIGURE 3-2 – Dégénérescence des états dans le ^{100}Sn .

on profite du fait que les noyaux sphériques présentent une dégénérescence des différents ordres. Ainsi, le calcul de tous les $\hat{Q}_{4\mu}$ doit produire les mêmes valeurs quel que soit μ . Étant donné que le $\hat{Q}_{40}$ était déjà programmé, il suffit de choisir un noyau sphérique pour cette étude. On choisit le ^{100}Sn , noyau doublement magique, et on lance le calcul pour des valeurs de moments K allant de 0 à 5. Les premiers niveaux d'excitation en dessous de 10 MeV sont représentés sur la figure 3-2.

Le nombre quantique K étant la projection du moment angulaire total J sur l'axe (Oz) , seuls les états ayant un spin J supérieur ou égal à K sont présents dans le spectre obtenu par la résolution des équations QRPA pour une valeur de K donnée. Quand on compare un spectre obtenu pour une valeur K à celui obtenu pour la valeur $K + 1$, les états de multipolarité $J < K + 1$ disparaissent : ces états ont donc une multipolarité K . On peut alors définir la multipolarité de tous les

états en notant les différences à chaque pas. Le tableau 3.1 regroupe les niveaux d'énergie du bas du spectre du ^{100}Sn et les valeurs de probabilités de transitions associées.

Energie [MeV]	B(E4), $\hat{Q}_{40}$ [$e^2 fm^8$]	B(E4), $\hat{Q}_{43}$ [$e^2 fm^8$]	B(E4), $\hat{Q}_{44}$ [$e^2 fm^8$]
5,931	$1,62051.10^6$	$1,62051.10^6$	$1,62051.10^6$
5,890	$8,90211.10^{-11}$	absent	absent
5,749	$6,51140.10^{-16}$	absent	absent
5,531	$1,29480.10^{-15}$	absent	absent
4,909	$1,50745.10^{-14}$	absent	absent
4,669	$1,46738.10^{-19}$	absent	absent
4,431	$9,15832.10^{-13}$	absent	absent

TABLE 3.1 – Bas du spectre de ^{100}Sn pour différentes valeurs de K .

Les niveaux dont la probabilité de transition est significative sont identiques (jusqu'à la douzième décimale dans le pire des cas), quelle que soit la valeur de K . La programmation des moments hexadécapolaires est ainsi validée. La même procédure a permis de valider la cohérence des opérateurs $\hat{Q}_{\lambda\mu}$ jusqu'à $\lambda = 8$. Un calcul des mêmes probabilités, utilisant les densités de transitions [Mar], fournit des valeurs identiques, ce qui a permis de valider les deux approches. La méthode intégrale possède l'avantage d'être relativement simple à implémenter mais son temps de calcul est proportionnel au nombre d'états intrinsèques considérés, au nombre de multipoles calculés, à la taille du maillage de la densité 2D initiale ainsi qu'à la taille du maillage des densités de transitions finales. Pour un noyau traité en base d'OH de taille 12, en ne prenant en compte que les états sous 40 MeV, pour toutes la valeurs K de 0 à 8, il faut environ 2h40 de calcul. Avec la méthode matricielle, quelques minutes suffisent même en prenant les états au-dessus de 40 MeV.

3.1.4 Études des fonctions de force γ pour le processus r

Dans le domaine de l'astrophysique nucléaire, le processus r (r signifiant rapide) est un modèle de nucléosynthèse lié à la capture neutronique par des noyaux dans

des conditions typiques d'astrophysique (haute température et densité neutronique importante) et explique la production de noyaux lourds en partant de noyaux plus légers. Les études présentées dans la suite visent à améliorer notre compréhension de ce processus.

3.1.4.1 Étude des transitions électriques $E1$

Le travail exposé dans la partie précédente a permis l'étude systématique des transitions de type $E1$ dans les 412 noyaux pairs-pairs, les résultats pour les noyaux impairs étant interpolés à partir de ceux-ci. La fonction de force γ résultante est d'une grande utilité astrophysique, puisqu'elle permet de remonter aux sections efficaces (n, γ) et (γ, n) . Ces sections efficaces entrent en jeu dans la détermination du processus r , invoqué de la formation de certains noyaux dans l'Univers. La programmation unifiée m'a conduit à établir un standard de fichier de sortie qui facilite une certaine automatisation par la mise en place de scripts, dans le but d'analyser les données produites en masse. A chaque multipolarité correspond un fichier recensant les niveaux d'énergie ainsi que diverses propriétés telles que les probabilités de transitions. Cette étude a été publiée dans la revue *Physical Review C*.

Large-scale deformed quasiparticle random-phase approximation calculations of the γ -ray strength function using the Gogny force

M. Martini,¹ S. Péru,² S. Hilaire,² S. Goriely,³ and F. Lechaftois²

¹*ESNT, CEA-Saclay, DSM, IRFU, Service de Physique Nucléaire, F-91191 Gif-sur-Yvette Cedex, France*

²*CEA, DAM, DIF, F-91297 Arpaçon, France*

³*Institut d'Astronomie et d'Astrophysique, Université Libre de Bruxelles, CP-226, B-1050 Brussels, Belgium*

(Received 27 January 2016; revised manuscript received 28 April 2016; published 6 July 2016)

Valuable theoretical predictions of nuclear dipole excitations in the whole chart are of great interest for different nuclear applications, including in particular nuclear astrophysics. Here we present large-scale calculations of the $E1$ γ -ray strength function obtained in the framework of the axially symmetric deformed quasiparticle random-phase approximation based on the finite-range Gogny force. This approach is applied to even-even nuclei, the strength function for odd nuclei being derived by interpolation. The convergence with respect to the adopted number of harmonic oscillator shells and the cutoff energy introduced in the 2-quasiparticle (2- qp) excitation space is analyzed. The calculations performed with two different Gogny interactions, namely D1S and D1M, are compared. A systematic energy shift of the $E1$ strength is found for D1M relative to D1S, leading to a lower energy centroid and a smaller energy-weighted sum rule for D1M. When comparing with experimental photoabsorption data, the Gogny-QRPA predictions are found to overestimate the giant dipole energy by typically ~ 2 MeV. Despite the microscopic nature of our self-consistent Hartree-Fock-Bogoliubov plus QRPA calculation, some phenomenological corrections need to be included to take into account the effects beyond the standard 2- qp QRPA excitations and the coupling between the single-particle and low-lying collective phonon degrees of freedom. For this purpose, three prescriptions of folding procedure are considered and adjusted to reproduce experimental photoabsorption data at best. All of them are shown to lead to somewhat similar predictions of the $E1$ strength, both at low energies and for exotic neutron-rich nuclei. Predictions of γ -ray strength functions and Maxwellian-averaged neutron capture rates for the whole Sn isotopic chain are also discussed and compared with previous theoretical calculations.

DOI: [10.1103/PhysRevC.94.014304](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.94.014304)

I. INTRODUCTION

About half of the nuclei with $A > 60$ observed in nature are formed by the rapid neutron-capture process (r-process) occurring in explosive stellar events [1]. The r-process is expected in environments with high neutron density ($N_n > 10^{20} \text{ cm}^{-3}$). Successive neutron captures proceed into neutron-rich regions well off the β -stability valley forming exotic nuclei that cannot be produced and therefore studied in the laboratory. When the temperature or the neutron density required for the r-process are low enough to break the (n, γ) - (γ, n) equilibrium, the r-abundance distribution depends directly on the neutron capture rates of the so-produced exotic neutron-rich nuclei [2]. The neutron capture rates are commonly evaluated within the framework of the statistical model of Hauser-Feshbach, although the direct capture contribution plays an important role for very exotic nuclei [3]. The fundamental assumption of the Hauser-Feshbach model is that the capture goes through the intermediary formation of a compound nucleus in thermodynamic equilibrium. In this approach, the Maxwellian-averaged (n, γ) rate at temperatures of relevance in r-process environments strongly depends on the electromagnetic interaction, i.e., the photon de-excitation probability. The well-known challenge of understanding the r-process abundances thus requires reliable extrapolations of the $E1$ -strength function out towards the neutron-drip line.

Large-scale calculations of $E1$ γ -ray strength functions are usually performed on the basis of the phenomenological

Lorentzian model [4]. The reliability of the γ -ray strength predictions can thus be greatly improved by the use of microscopic models. Indeed, provided satisfactory reproduction of available experimental data, the more microscopic the underlying theory, the greater the confidence in the extrapolations out towards the experimentally unreachable regions. Microscopic approaches are rarely used for practical applications. First, the time cost is often prohibitive for large-scale calculations. Second, the fine tuning required to reproduce accurately a large experimental data set is very delicate, in addition to being time consuming. A prominent exception is represented by Refs. [5,6] where a complete set of γ -ray strength functions was derived from mean field plus quasiparticle random-phase approximation (QRPA) calculations. In Refs. [5,6], zero-range Skyrme forces were considered and phenomenological corrections applied to properly describe the splitting of the giant dipole resonance (GDR) in deformed nuclei as well as the damping of the collective motion.

The present study aims to go beyond the former approximation providing the axially symmetric-deformed QRPA approach based on Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB) calculations using the finite-range Gogny interaction in a fully consistent way. Contrary to the calculations in which radial wave functions are discretized on a mesh, single-particle wave functions are here expanded on an optimized harmonic oscillator (HO) basis. The present approach is specially suited for open-shell nuclei, where pairing correlations are included without any additional parameters. Another asset is

an adequate treatment of the deformation at each step of the calculation. More precisely the intrinsic deformation of the nucleus ground state is predicted by the HFB calculations as the minimum of the potential energy surface. Then the QRPA phonons are oscillations around this minimum, spherical or not. This treatment significantly improves the description of the nuclear structure property, hence the γ -ray strength function predictions. It was first applied to study giant resonances in Si and Mg isotopes [7]. Dipole excitations in Ne isotopes and $N = 16$ isotones [8] as well as electromagnetic excitations of the heavy deformed ^{238}U [9] have been obtained with an optimized version of the numerical code, opening the way to large-scale calculations. This powerful tool was generalized to treat also charge exchange excitations which are relevant for the β decay of experimentally inaccessible nuclei [10]. In the present paper, we test the predictive power of the aforementioned approach by applying it to a large set of even-even nuclei to compare with available experimental data on photoabsorption [4], the $E1$ γ -strength function of odd nuclei being obtained through an interpolation procedure involving neighboring even-even nuclei.

The paper is organized as follows. In Sec. II, the axially symmetric-deformed HFB+QRPA formalism is described in its standard form and possible extensions are sketched. In the same spirit as Ref. [11], the impact of the size of the finite HO basis including cutoff effects are analyzed in Sec. III adding discussion on the choice of the interaction parameter sets. This convergence analysis sets a protocol for large-scale calculations whose results are presented in Sec. IV. First, the impact on deformation of the γ -strength function is illustrated. Second, the comparison with photoabsorption data [4] is shown. Third, models are introduced to obtain the continuous strength functions starting from the discrete QRPA strength distributions $B(E1)$ using or not microscopic input. The final $E1$ strength functions as well as the corresponding Hauser-Feshbach astrophysical reaction rates are finally estimated for a large set of exotic neutron-rich nuclei and compared with other predictions. Conclusions are drawn in Sec. V.

II. THE THEORETICAL MODEL

A. Standard HFB+QRPA approach

We summarize here the formalism of the consistent QRPA approach based on axially symmetric-deformed HFB equations solved in a finite HO basis. For more details we refer the reader to Refs. [7,12]. With rotational invariance along the Z axis and time reversal symmetry, the eigenstates of the HO basis are fully identified by three spatial quantum numbers m , $n_\perp$, and n_z plus the spinor σ . For each HO state, the projection of total angular momentum onto the symmetry axis is $k = m + \sigma_z$ and the parity is $\pi = (-)^{|m|+n_z}$. Imposing here a same HO pulsation in Z and perpendicular directions, the energy quantum number of each state is given by $N = |m| + 2n_\perp + n_z$. The upper limit $N_0 \geq N$ of a finite basis gives the number of involved major shells $N_{sh} = N_0 + 1$, namely the size of the basis. Usually in HFB N_0 is chosen according to the rule that the number of HO states is 8 times the maximum of proton or neutron occupied states.

In the present calculation the HO pulsation is adjusted for each nucleus at each deformation and for each number of major shells to minimize the HFB binding energy. Solving the HFB equations in the HO basis leads to the diagonalization of a Hamiltonian matrix: eigenvalues and eigenvectors are, respectively, Bogoliubov quasiparticle (qp) excitation energies and u and v components of the Bogoliubov transformation. As a consequence the positive energy continuum is discretized. The first-order excitations for even-even nuclei are given by two-quasiparticle ($2qp$) excitations. QRPA phonons are linear combinations of these $2qp$ excitations. According to the symmetries imposed, the projection K of the angular momentum J on the symmetry axis and the parity Π are good quantum numbers for the phonons. Consequently, QRPA calculations can be performed separately for each K^Π set. In this context, phonons are characterized by the excitation operator,

$$\theta_{n,K^\Pi}^+ = \sum_{ij} X_{n,K^\Pi}^{ij} \eta_i^+ \eta_j^+ - (-)^K Y_{n,K^\Pi}^{ij} \eta_j \eta_i, \quad (1)$$

where η^+ and η are the quasiparticle operators, related to the HO particle operators c^+ and c through the u and v Bogoliubov transformation matrices:

$$\eta_i^+ = u_{i\alpha} c_\alpha^+ - v_{i\alpha} c_\alpha. \quad (2)$$

Here and in the following, repeated indices are implicitly summed over; latin and greek letters denote quasiparticle and harmonic oscillator states, respectively. Conservation of symmetries imposes $k_i^{\pi_i} = k_\alpha^{\pi_\alpha}$ in Eq. (2) and that the condition $K = k_i + k_j$ in Eq. (1) and $\Pi = \pi_i \pi_j$ are fulfilled. According to the occupation probabilities, the quasiparticle creation operator η_i^+ is associated with the creation operator of particle type c_p^+ when $u_i^2 \gg v_i^2$, and it corresponds to the annihilation operator of hole type c_h if $u_i^2 \ll v_i^2$. In principle the QRPA calculation can be performed without any cutoff in energy of the $2qp$ states neither in occupation probabilities (v^2) of single quasiparticle states. The amplitudes X and Y of Eq. (1) are solutions of the well-known QRPA matrix equation [13],

$$\begin{pmatrix} A & B \\ B & A \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_{n,K^\Pi} \\ Y_{n,K^\Pi} \end{pmatrix} = \omega_{n,K^\Pi} \begin{pmatrix} X_{n,K^\Pi} \\ -Y_{n,K^\Pi} \end{pmatrix}, \quad (3)$$

where $\omega_{n,K}$ are the energies of the QRPA excited states. To ensure consistency, the same interaction (parameter set of the Gogny force) is used to calculate the A and B matrix elements and the underlined HFB mean field [12]. We consider in the present study the D1S and D1M forces only, whose properties and parameters are summarized in the appendix of Ref. [12]. Once the QRPA matrix is diagonalized, the X and Y amplitudes allow one to calculate the strength for each electromagnetic mode. Here we focus on the dipole [multipolarity $\lambda = 1$, parity $\Pi = (-)$] mode. The isovector dipole excitation operator is

$$\hat{Q}_{1,0} = \sum_i r_i \mathcal{Y}_{1,0}(\theta_i, \phi_i) - \sum_i r_i \mathcal{Y}_{1,0}(\theta_i, \phi_i), \quad (4)$$

where $\mathcal{Y}_{1,0}(\theta_i, \phi_i)$ is a spherical harmonic. This isovector operator does not excite too much the center-of-mass motion

whose nature is essentially isoscalar (more information on center-of-mass spurious states are given in Sec. III A).

The total dipole distribution $B(E1)$ (in $e^2 \text{ fm}^2$) is obtained by summing the contributions of $K^\pi = 0^-$ and twice that of $K^\pi = 1^-$, the $K^\pi = -1^-$ solution being equal to the $K^\pi = 1^-$ one through the conservation of time reversal symmetry. We remind that in the spherical symmetry case, the $K = 0$ and $|K| = 1$ states are degenerate. In deformed nuclei, the dipole strength splits up into two components corresponding to two different angular momentum projections K .

B. Beyond 2-qp excitations

The well-established formalism described above takes into account only 2-qp excitations. Two extensions of the standard (Q)RPA approach have been developed in the past by different groups: the so-called second RPA [14,15] and the particle-vibration coupling [16] or quasiparticle-phonon model [17–19]. In the second RPA calculations the centroid energy of the response function is shifted by a few MeV to lower energies with respect to the standard QRPA values, as shown and discussed in Refs. [20–23]. The interaction between the single-particle and low-lying collective phonon degrees of freedom also shifts the $E1$ strength to lower energies [24–28]. A fragmentation and a broadening of the response also appears within these approaches. To include these effects, the discrete $B(E1)$ distribution is usually folded by a Lorentzian function,

$$L(E, \omega) = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma E^2}{[E^2 - (\omega - \Delta)^2]^2 + \Gamma^2 E^2}, \quad (5)$$

leading to a continuum result for the $E1$ γ -ray strength function $S_{E1}(E)$ (in $e^2 \text{ fm}^2 \text{ MeV}^{-1}$):

$$S_{E1}(E) = \sum_n L(E, \omega_n) B(E1)(\omega_n). \quad (6)$$

In Eq. (5), Γ is the width at half maximum and Δ allows for an energy shift. These quantities could be adjusted on experimental data or should be obtained by the aforementioned beyond (Q)RPA formalism. The generalization of QRPA

would include 4- and 6-qp excitations up to infinity. Increasing the n order of n -qp excitations provides a shifted spectrum closer and closer to the continuum one, especially in the giant resonance region. The energy shift Δ is expected to be related to the density of n -qp states, hence, in a first approximation, to the density of 4-qp states. In the present study this quantity was calculated for dipole excitations. Note that for each K value, the number n_{4qp}^K takes into account only the configurations involved in the dipole excitation. Quantum numbers and occupation probabilities drive the selections of the relevant 4-qp states conserving isospin (τ) and particle number. Once the Wick theorem is applied to a 4-qp excitation operator $\eta_i^+ \eta_j^+ \eta_k^+ \eta_l^+$, only the fully contracted terms $\eta_i^+ \eta_j^+ \eta_k^+ \eta_l^+$, $(-)\eta_i^+ \eta_j^+ \eta_k^+ \eta_l^+$ and $\eta_i^+ \eta_l^+ \eta_j^+ \eta_k^+$ need to be considered. If at least one of the three combinations contains an excitation of type $c_{p\tau}^+ c_{h\tau} c_{p'\tau'}^+ c_{h'\tau'}^+$, this 4-qp excitation could contribute to the count of n_{4qp}^K . Additional constraints arise from the total parity Π and K conservation, $K = k_i + k_j + k_k + k_l = k_p + k_{p'} - k_h - k_{h'}$. These quantities should be equal to those of the QRPA calculation in the 2-qp basis. According to angular momentum algebra the possible k values ($k_p - k_h, k_{p'} - k_{h'}$) should be (0,0), (1,−1) or (−1,1) for $K = 0$, and (1,0), (0,1), (−1,2) or (2,−1) for $K = 1$. The improvement of the folding procedure by the insertion of the n_{4qp}^K quantity will be discussed in Sec. IV C.

III. SENSITIVITY ANALYSIS

For practical large-scale calculations, choices have to be made to limit the computational cost. As previously mentioned, the HFB+QRPA results remain sensitive to the choices made for the calculation. These choices include the number of HO shells used, the energy cutoff ε_c accounted for on the 2-qp state energies, and the set of parameters of the Gogny interaction. We discuss below the impact of these effects on the calculated $E1$ strength function, with an additional view on the possibility to reduce the computational time without reducing the predictive power of the calculations.

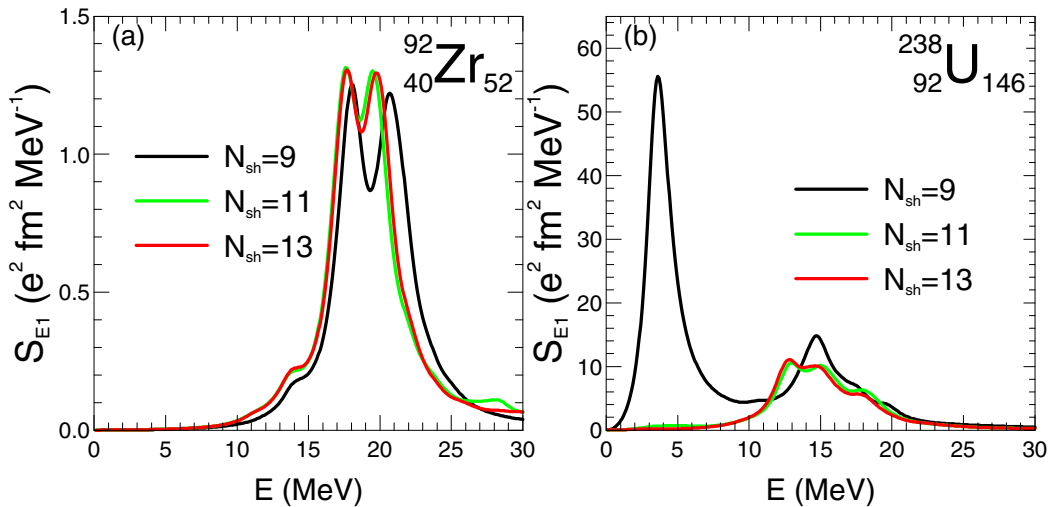


FIG. 1. QRPA $E1$ strength S_{E1} calculated with the D1M Gogny interaction as a function of the excitation energy for different numbers of HO shells without any energy cutoff on the 2-qp state energies.

A. Convergence with respect to the size of the basis

A key aspect to which the QRPA predictions are sensitive is the number of HO shells, N_{sh} , included in the HFB+QRPA calculation. To investigate the impact of N_{sh} on the γ -ray strength function and to verify the convergence, we have performed, using the DIM Gogny interaction [29], QRPA calculations for several odd values of N_{sh} without any energy cutoff on the $2\text{-}qp$ states energies. Thus, in such a situation, whatever the size of the basis is, the center-of-mass spurious state is decoupled to the physical excitation spectrum and easily identified, as shown, for example, in Refs. [8,9,12]. Once the spurious state is identified, it is removed from the QRPA spectra.

The results are plotted in Fig. 1 for two nuclei, namely the spherical ^{92}Zr nucleus and the well deformed actinide ^{238}U using the broadening procedure of Eq. (5) with a width $\Gamma = 2$ MeV and no shift ($\Delta = 0$). As can be observed, the QRPA strengths are shifted towards lower energies when N_{sh} is increased. In Fig. 1(b), we can even observe for $N_{\text{sh}} = 9$ a large strength below 5 MeV which disappears for larger bases. Because the QRPA calculations without cutoff are completely consistent, no spurious states are involved in this $N_{\text{sh}} = 9$ low energy strength which is somewhat unphysical and illustrates that using a too low number of HO shells is inappropriate for heavy nuclei. Another important feature observed in this plot is the convergence of the predictions with increasing N_{sh} . It is well illustrated by the fact that for $N_{\text{sh}} = 11$ and 13, QRPA strengths are very close to each other, as compared to $N_{\text{sh}} = 9$.

Considering the known overestimation of the order of 2 MeV of the energy position of the QRPA $E1$ strength function in ^{238}U [9], it is important to be able to disentangle between model limitations and lack of convergence. We therefore display in Fig. 2 a zoom of the energy peak region to better estimate the peak position as a function of N_{sh} , including also higher N_{sh} values than in Fig. 1, and doing so, to confirm the convergence observed in Fig. 1. However, we now use an energy cutoff $\varepsilon_c = 120$ MeV for ^{92}Zr and 60 MeV for ^{238}U , independently of the adopted N_{sh} value.

TABLE I. Average computation time for a $K^\pi = 0^-$ of one nucleus for several energy cutoff and basis size combinations using 1024 cpus.

N_{sh}	No cut	$\varepsilon_c = 100$ MeV	$\varepsilon_c = 60$ MeV	$\varepsilon_c = 30$ MeV
9	5 min	5 min	4 min	38 s
11	2 h	2 h	1 h	5 min
13	42 h	26 h	6 h	30 min
15	21 d	8 d	30 h	2 h
17	286 d	63 d	7 d	8 h

The choice of a constant cutoff avoids unreasonable computation time for $N_{\text{sh}} = 15$ and 17 and prevents interference between the impact of energy cutoff and basis size. As can be observed in Table I, the computation time, without any energy cutoff is clearly unreasonable as soon as more than 15 shells are used. For $N_{\text{sh}} \geq 15$, the only way to reduce the computation time to an acceptable limit consists in introducing an energy cutoff which, for $N_{\text{sh}} = 17$ is at most 60 MeV if we want to remain within a feasible range. Figure 2 confirms the fact that with $N_{\text{sh}} = 13$ for ^{92}Zr and $N_{\text{sh}} = 15$ for ^{238}U one is very close to converged values as far as the peak positions are concerned. Quantitatively speaking, the change in the peak energies is of the order of 1 MeV, 200 keV, and 100 keV between $N_{\text{sh}} = 9$ and 11, 11 and 13, and 13 and 15 for ^{92}Zr and of the same magnitude for ^{238}U between $N_{\text{sh}} = 11$ and 13, 13 and 15, and 15 and 17, respectively. Comparing Figs. 1(b) and 2(b), one also observes that a cutoff of 60 MeV provides similar results as a calculation without any cutoff for ^{238}U .

B. Role of the $2\text{-}qp$ excitation energy cutoff

As shown in Table I and already discussed above, the energy cutoff is a way to get a compromise between the computational time and convergence of the calculation. This compromise begins to be interesting for $N_{\text{sh}} \geq 13$ and is clearly necessary for $N_{\text{sh}} \geq 15$. We have therefore studied the convergence of

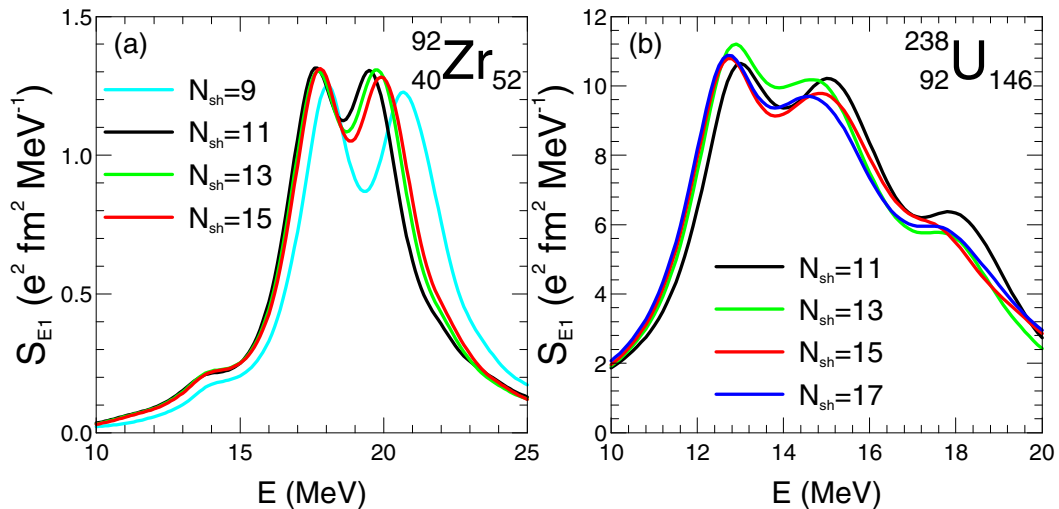


FIG. 2. QRPA $E1$ strength S_{E1} calculated with the DIM Gogny interaction for different numbers of HO shells for (a) ^{92}Zr with an energy cutoff on the $2\text{-}qp$ states energies of $\varepsilon_c = 120$ MeV and (b) for ^{238}U with $\varepsilon_c = 60$ MeV.

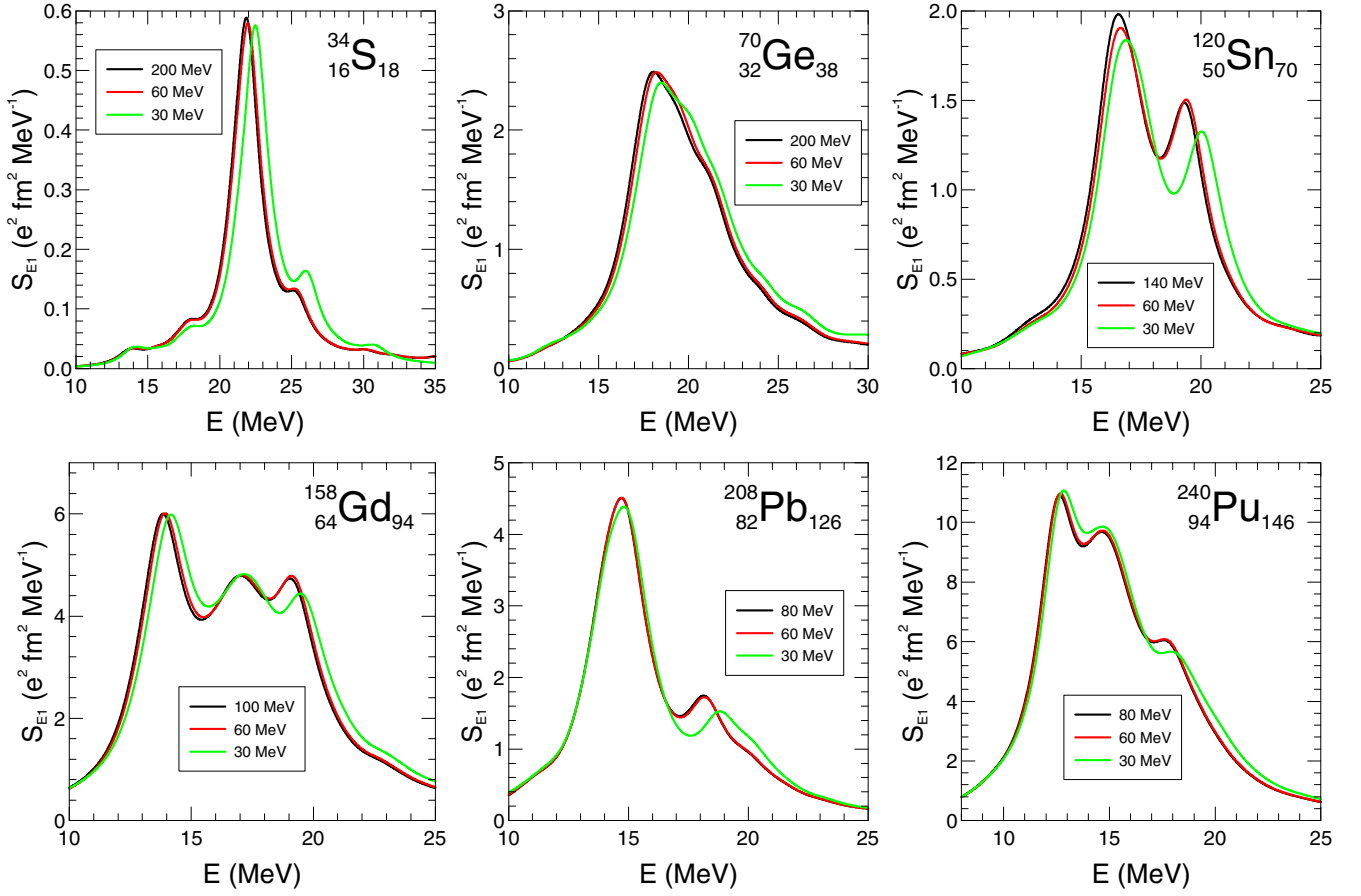


FIG. 3. QRPA $E1$ strength S_{E1} calculated with the DIM Gogny interaction for different cutoff energies for an arbitrary sample of nuclei. The number of HO shells chosen for each nucleus ensures convergence with respect to the conclusions of Sec. III A and is summarized in Table II.

the calculation as a function of the energy cutoff. We have selected both spherical and deformed nuclei as well as light, medium-mass and heavy nuclei to see if the energy cutoff

ensuring an acceptable convergence depends on the number of shells or in other words on the nucleus mass. Typical results are plotted in Fig. 3 for several nuclei both deformed and spherical

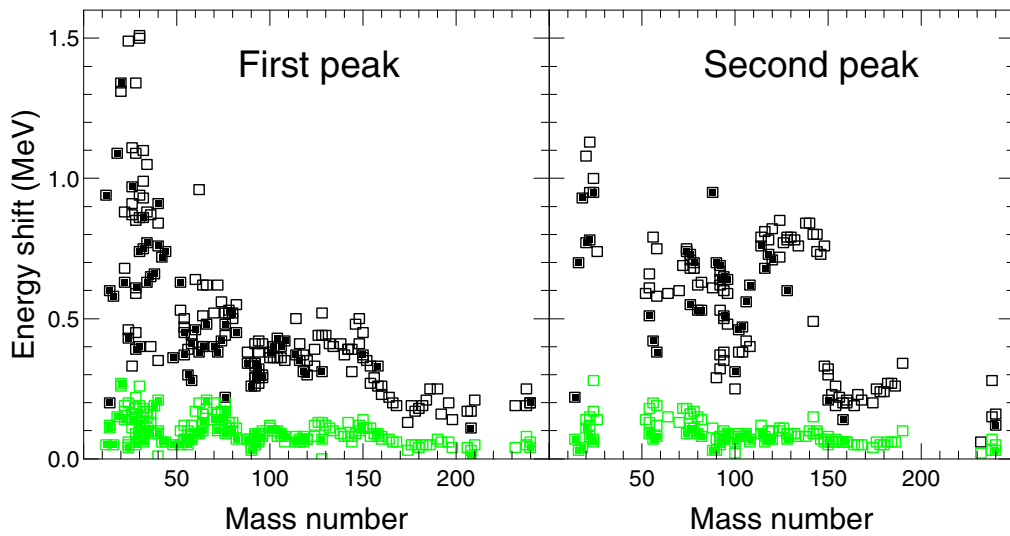


FIG. 4. Energy shifts of the two main peaks of the $B(E1)$ distribution predicted with DIM as a function of the atomic mass for two different values of the cutoff energy (see text for details). Black (respectively, green) squares correspond to a $\varepsilon_c = 30$ MeV (respectively, 60 MeV). The full squares indicate calculations for which N_{sh} values are compatible with Table II.

TABLE II. Adopted number of HO shells as a function of the nucleus.

$\max(N, Z)$	≤ 20	≤ 40	≤ 70	≤ 116	> 116
N_{sh}	9	11	13	15	17

as a function of three energy cutoff values using again the broadening procedure of Eq. (6) with a width $\Gamma = 2$ MeV (and no shift, i.e., $\Delta = 0$). As can be observed, independently of the basis size (N_{sh} increases with the nucleus mass), an energy cutoff $\varepsilon_c = 60$ MeV ensures a satisfactory convergence of the $E1$ strength functions as far as the peak energy is concerned,

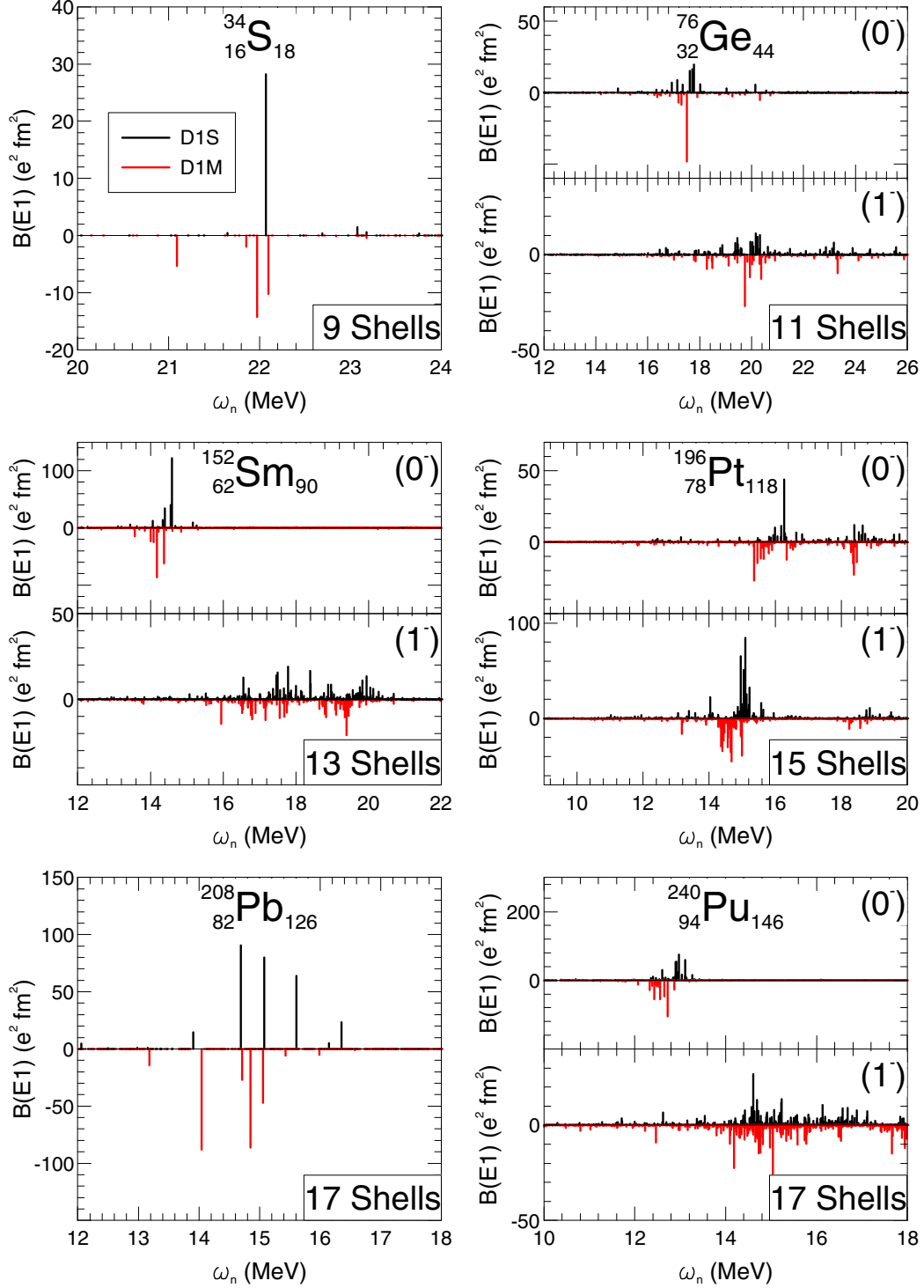


FIG. 5. QRPA $B(E1)$ distributions in the GDR region for a reduced set of nuclei calculated with the D1S and D1M Gogny interactions for identical energy cutoff and basis size. For deformed nuclei (^{76}Ge , ^{152}Sm , ^{196}Pt , and ^{240}Pu) $K^\pi = 0^-$ and $|K|^\pi = 1^-$ contributions are plotted separately. The D1M strengths are multiplied by -1 for clarity.

while a $\varepsilon_c = 30$ MeV is clearly not sufficient although it already provides the main part of the strength when compared to a higher energy cutoff. This feature is confirmed in Fig. 4 where the energy shift of the first and second energy peaks is plotted as a function of the nuclear mass for a large set of nuclei covering the whole mass range of our study. This shift is defined as the difference between the peak energies for a given energy cutoff with respect to the peak energy without any cutoff or with a high enough energy cutoff (80 MeV in the actinide region, for instance) to consider that convergence was reached. It is worth mentioning here that for some nuclei the size of the basis is already the one which will be finally adopted in the present study (see Table II). For these nuclei no major impact of the basis size is observed on the peak energy shifts.

Considering the computational price to pay to include 2- qp states with energies higher than 60 MeV with respect to the gain in the accuracy, it is worth performing QRPA calculations with a cutoff of 60 MeV rather than without any energy cutoff. In this case, the difference in the peaks positions is of the order of 100–200 keV which is acceptable if one keeps in mind the 2-MeV difference between experiment and theory observed in Ref. [9] (see Sec. IV). On the contrary, a 30-MeV cutoff gives rise to unacceptable shifts in the peak positions, with respect to the converged value, of the order of 0.5–1 MeV. The energy shift of the first peak of the 30-MeV cutoff decreases with the mass number following a low $A^{-\alpha}$. Recalling that the empirical mass dependence for the excitation energy of the isovector GDR was found [30] to lie between $A^{-1/3}$ and $A^{-1/6}$, the GDR energy of light nuclei is relatively larger, hence closer to the cutoff, in comparison with those found in heavy nuclei. This explains the large shift between full and low energy cutoff calculations observed in Fig. 4 for light nuclei.

C. Impact of the interaction parameters

The predictions obtained with two different parameter sets of the Gogny interaction, namely D1S and D1M, are now compared, using the 2- qp energy cutoff of 60 MeV as justified above and the same basis size for each nucleus. We first consider a reduced set of nuclei, both spherical and deformed and plot in Fig. 5 the $B(E1)$ distribution obtained with both D1S and D1M interactions. Here we present the $B(E1)$ discrete distribution instead of the folded S_{E1} to investigate possible differences in the strength fragmentation and peaks position from the interaction itself.

As can be observed, both interactions provide comparable results even though D1M seems to provide, systematically, slightly lower energy peaks than D1S, independently of K^π . Focusing on deformed nuclei, one observes that for both interactions, the energy split between $K = 0^-$ and $|K| = 1^-$ states, related to the intrinsic deformation of the HFB ground state, follows an opposite hierarchy for prolate (^{152}Sm) and oblate (^{196}Pt) shapes, a result similar to what was already discussed in Ref. [7] for a different set of nuclei and also found systematically with a Skyrme interaction [31].

To further investigate the tendency of D1M to yield lower centroid energies than D1S, we extend our study to a larger set of nuclei. However, to limit computation time, lower N_{sh}

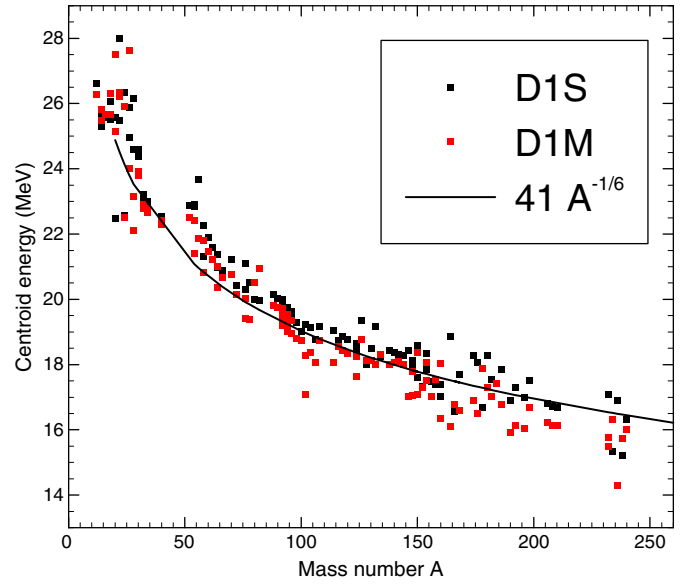


FIG. 6. Energies of the centroid of the QRPA $B(E1)$ distributions calculated with D1S and D1M Gogny interactions for all the nuclei considered in this work. The full line represents the fit of the points.

values than those of Table II are used. We plot in Fig. 6 the centroid energies defined for each nucleus by

$$C = \frac{\sum_n \omega_n B(E1)(\omega_n)}{\sum_n B(E1)(\omega_n)}, \quad (7)$$

where ω_n are the discrete energies of the QRPA states solution of Eq. (3) and $B(E1)(\omega_n)$ the corresponding $B(E1)$ distributions.

As can be observed, the tendency to obtain lower energy peaks with D1M (Fig. 5) is confirmed and is a somewhat general feature of our results. This shift is of the order of a few hundred keV, along the whole mass range. Moreover, we clearly observe that both interactions provide similar qualitative behavior with respect to the mass dependence of the energy peak positions. This behavior can be fitted, for example, by the law $E = 41A^{-1/6}$ MeV, a nuclear mass dependence compatible with the empirical [30] and theoretical [32] behavior of the GDR energies.

The $E1$ energy-weighted sum rules (EWSR) expressed in Thomas-Reiche-Kuhn (TRK) units are plotted in Fig. 7 as a function of the mass number. The two parameter sets D1M and D1S of the Gogny interaction provide similar trends, also close to the one shown in Ref. [11] obtained for a set of closed-shell nuclei with D1. The few hundred keV shift of the centroid energy explains the decrease of the D1M EWSR with respect to D1S.

D. Practical choices for large-scale calculation

Both the 2- qp energy cutoff and the number of major shells are optimized to reach convergence in the predictions. For the study of giant resonances, the computational price to pay to obtain full convergence using the highest N_{sh} value together without any energy cutoff is clearly not worth if compared to

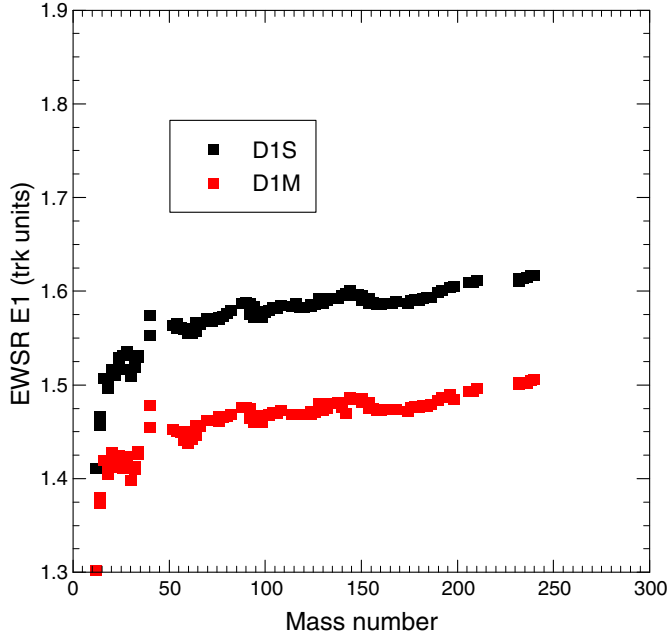


FIG. 7. $E1$ EWSR in TRK units ($14.8 \frac{NZ}{A} e^2 \text{ fm}^2 \text{ MeV}$) calculated in QRPA with D1S and D1M Gogny interactions for all the nuclei considered in this work.

the results obtained with an appropriate energy cutoff and a reasonable N_{sh} value.

This is illustrated in Fig. 8, where the energies of the centroid of the predicted QRPA strengths are plotted as a function of the number of shells used in the calculation for a few nuclei with a fixed energy cutoff of 60 MeV. As can be observed, the centroid energies converge with increasing N_{sh} values, and are only significantly different from that obtained with a highest N_{sh} when the number of shells is clearly unreasonably low given the mass of the nucleus considered (nine shells for ^{152}Sm , ^{196}Pt or ^{240}Pu , for instance). We have therefore decided to adopt for all the calculations that will be

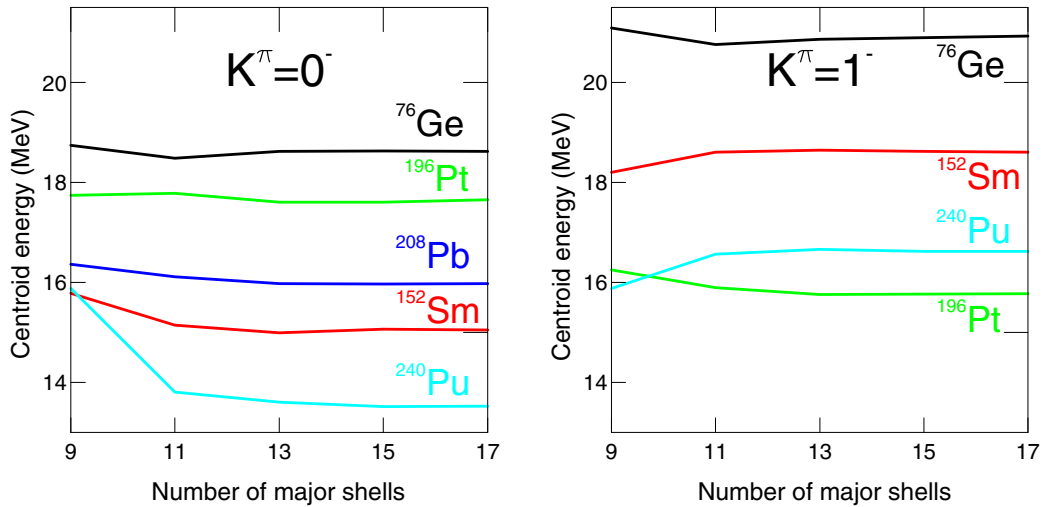


FIG. 8. Energy centroid of the QRPA $B(E1)$ distributions calculated with D1M as a function of the number of shells using a global 60-MeV energy cutoff for a sample of oblate (^{196}Pt), spherical (^{208}Pb), and prolate (^{76}Ge , ^{152}Sm , ^{240}Pu) nuclei.

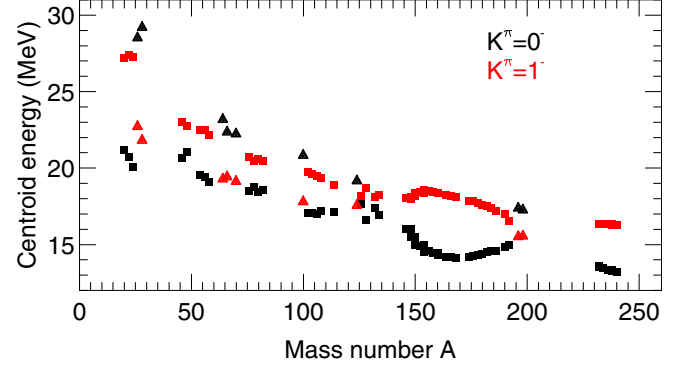


FIG. 9. Centroid energies of the $K^\pi = 0^-$ and 1^- components for all the deformed nuclei considered in this work. The squares correspond to prolate nuclei and the triangles to oblate ones.

discussed from now on a cutoff energy of 60 MeV and the N_{sh} values, as summarized in Table II. It is worth mentioning that $N_{\text{sh}} = 17$ have been used for a somewhat limited number of nuclei. For more systematic studies in the heavy mass regions it would be possible to decrease this value to $N_{\text{sh}} = 15$ without losing too much in terms of quality of the predictions.

IV. RESULTS AND COMPARISONS WITH DATA

A. Impact of the deformation

As already discussed in Refs. [7,33–37], for deformed nuclei the GDR splits in two energy components because of the split between the $K = 0$ and $K = \pm 1$ states. It was noticed [7] that this split follows an opposite hierarchy for prolate and oblate shapes. This feature which was illustrated by few isolated prolate (^{76}Ge , ^{152}Sm , ^{240}Pu) and oblate (^{196}Pt) nuclei in Fig. 5, is now investigated more systematically. For this purpose, we plot in Fig. 9 the centroid energies for each K angular momentum projection for all the deformed even-even nuclei considered in this work. As can be observed the centroid energies of the $K^\pi = 0^-$ components are systematically lower

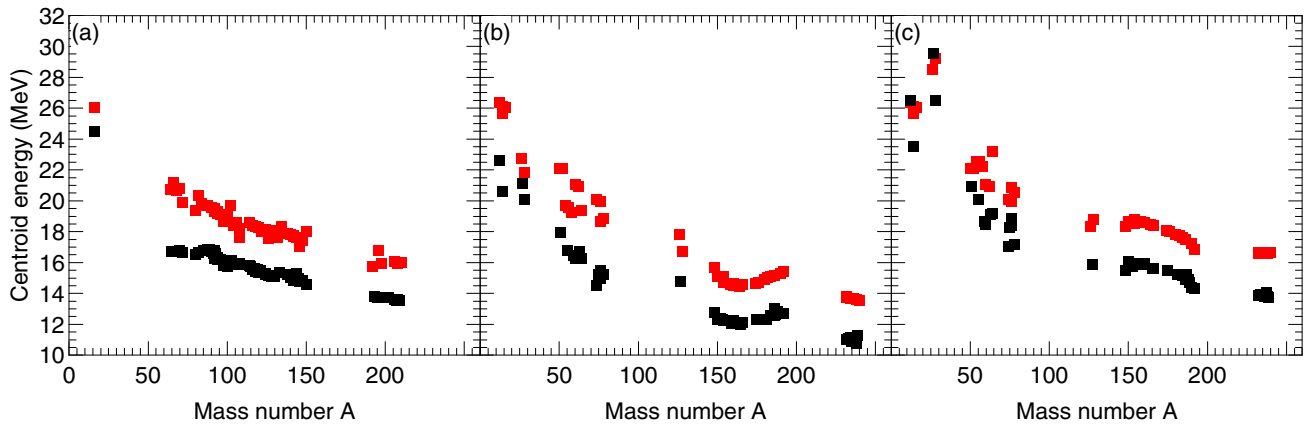


FIG. 10. Comparison of the QRPA centroid energies (red) with the peak energies compiled in the RIPL library (black). (a) Nuclei for which a single Lorentzian is recommended. (b) and (c) Lowest (b) and highest (c) peak energies for the nuclei for which two Lorentzians are recommended.

than those of the $K^\pi = 1^-$ components for prolate nuclei and the other way around for oblate nuclei. Above the $A=150$ mass region, the large difference of energy between $K^\pi = 0^-$ and $K^\pi = 1^-$ centroids is related to the large intrinsic deformation of the rare earth nuclei (see, for example, Fig. 1 of Ref. [38]). In contrast in the $A=130$ mass region, the centroid energies of the $K^\pi = 0^-$ and $K^\pi = 1^-$ components are close to each other. In such a situation, the experimental strength might not show the typical double hump pattern usually associated with a deformed nucleus. Let us notice that similar K hierarchy was also obtained for quadrupole resonances [7,31].

B. Comparison with experimental photoabsorption data

The axially symmetric-deformed HFB+QRPA method is now applied to provide γ -ray strength function for all nuclei for which photoabsorption data have been analyzed and compiled in the IAEA RIPL library [4]. In this compilation, a large part of the nuclei are not even-even, so that they cannot be, strictly speaking, compared with our theoretical predictions limited here to even-even nuclei. For odd-mass (respectively, odd-odd) nuclei, experimental data are associated with theoretical calculations performed for the 2 (respectively, 4) neighboring even-even nuclei. The analysis in the RIPL library consisted in fitting experimental photoabsorption data with one Lorentzian function or two if necessary. We therefore use two methods to analyze our predictions. When a single Lorentzian is recommended in RIPL, we compare its peak energy with the centroid of the total strength, obtained by summing the $K^\pi = 0^-$ and $|K|^\pi = 1^-$ components if the nucleus is theoretically predicted to be deformed. When two Lorentzian functions are recommended in RIPL, we compare the energy of the lowest (respectively, highest) peak with the centroid of the $K^\pi = 0^-$ (respectively, $|K|^\pi = 1^-$) component for nuclei theoretically predicted to be prolate and with the centroid of the $|K|^\pi = 1^-$ (respectively, $K^\pi = 0^-$) component for nuclei theoretically predicted to be oblate, following the conclusions reached in Sec. IV A. (Keeping in mind that for HFB predicted spherical nuclei the K centroids are degenerated).

The comparisons are shown in Fig. 10. As can be observed, our predictions display a qualitatively good mass dependence

compared to experimental data, but with a systematic overestimate of the order of 2 MeV. As already mentioned in Sec. II, this shift already observed in Ref. [9] is expected because our QRPA calculations do not account for the effects related to qp configurations involving more than 2- qp states or to the phonon coupling. Nevertheless, the mass dependence of the centroid energy follows particularly well the experimental trend, a feature particularly striking in the rare earth region. This systematic overestimation can be removed by a global (~ 2 MeV) shift of the states involved in the response. Furthermore a systematic ~ 2 MeV downward energy shift should reduce the D1M EWSRs (around ~ 1.5 TRK units) to reach the experimental values which rarely exceed 1.3 TRK units.

C. Models for folded strength functions

The QRPA provides a somewhat satisfactory description of the GDR centroid and the fraction of the EWSR exhausted by the $E1$ mode. However, the GDR is known experimentally to have a relatively large width and therefore a finite lifetime and for a proper description of experimental data, it is necessary to go beyond the QRPA scheme. Different microscopic theories (such as second RPA and particle-phonon coupling) explain the location and width of the GDR. For the sake of simplicity and applicability to a large number of nuclei of astrophysical interest, we restrict ourselves to the semiempirical broadening of the GDR already introduced in Sec. II B. Such a broadening is obtained by folding the QRPA $B(E1)$ distribution by a normalized Lorentzian function, as given by Eqs. (5) and (6) where both the width Γ and energy shift Δ can be adjusted on experimental data. Because of the phenomenological character of such an approach, three different prescriptions are adopted to estimate Δ and Γ . In the first model (hereafter referred to as Model 0), both parameters are assumed to be independent of the energy and identical for all nuclei. More precisely, the values of $\Delta = 2$ MeV and $\Gamma = 2.5$ MeV are chosen to globally reproduce experimental photoabsorption data. For the other two models, another strategy is adopted, the energy shift and the width Γ is adjusted on each photoabsorption

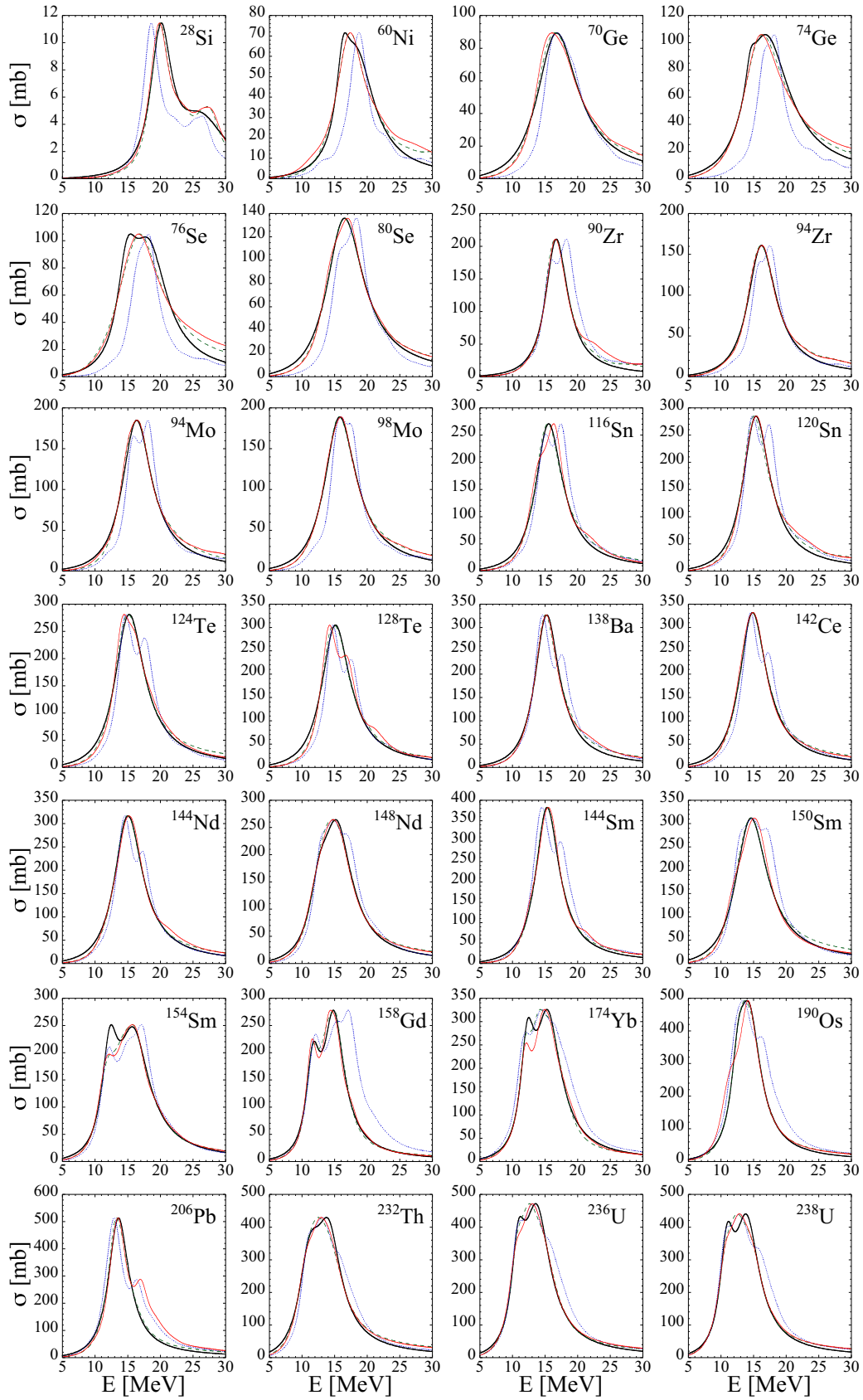


FIG. 11. Comparison for 28 nuclei between the experimental photoabsorption cross section [4] (black solid line) and the fits corresponding to Model 0 (dotted blue line), Model 1 (green dashed line), and Model 2 (red solid line). The experimental cross section around the GDR is represented by one or two parametrized Lorentzian functions, as traditionally done [4].

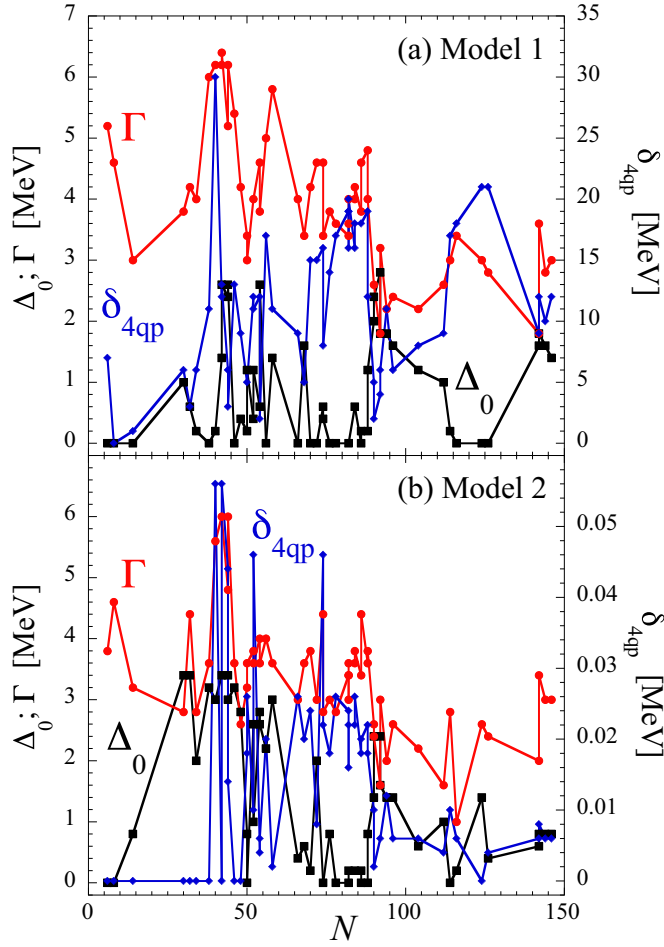


FIG. 12. Values of the three parameters Δ_0 (squares), Γ (circles), and δ_{4qp} (diamonds) adjusted on experimental photoabsorption cross sections as a function of the neutron number of the corresponding nucleus for Models 1 (upper panel) and 2 (lower panel).

cross section available experimentally; in addition, the energy shift is this time taken energy dependent following the simple relation $\Delta(\omega) = \Delta_0 + \Delta_{4qp}(\omega)$, where Δ_0 is a constant shift from the coupling between qp states and phonons and the quantity $\Delta_{4qp}(\omega)$ is an extra shift which empirically describes the effect of complex configurations and for this reason is taken to be proportional to the number of 4- qp states, $n_{4qp}^K(\omega)$, as defined in Sec. II A. The latter correction therefore varies with the excitation energy ω and obviously depends on the nucleus considered. Two different prescriptions are considered to estimate this extra energy shift. The first approximation (hereafter referred to as Model 1) assumes that $\Delta_{4qp}^K = \delta_{4qp} \times n_{4qp}^K(\omega)/n_{4qp}^K(\omega = 30 \text{ MeV})$ where δ_{4qp} is a parameter adjusted on experimental photoabsorption cross sections. In this model, Δ_{4qp}^K is arbitrarily normalized to the n_{4qp}^K value at $\omega = 30 \text{ MeV}$. The second approximation (Model 2) takes into account the number of 4- qp states relative to the number of 2- qp states at the excitation energy ω and reads $\Delta_{4qp}^K = \delta_{4qp} \times n_{4qp}^K(\omega)/n_{2qp}^K(\omega)$.

In Fig. 11, QRPA photoabsorption cross sections are compared with experimental data [4] for a sample of 28 even-even nuclei. Note that experimental cross sections are represented by parametrized Lorentzian functions in the vicinity of the GDR, i.e., cross sections at the energies significantly lower or larger than the GDR centroid should not be considered. As seen in Fig. 11, constant energy shift and width (Model 0) globally reproduce experimental data, in particular the low-energy tail of the cross section, though the width tends to be too low for light and medium- A nuclei. A split peak above the GDR is also present in the QRPA strength of some spherical nuclei, though not observed experimentally. As stressed, for example, in Refs. [26,39] it is expected that the fragmentation is somewhat reduced by the coupling of the RPA modes to 2p-2h states and equivalently by the coupling of the QRPA modes to 4- qp states. The introduction of an energy-dependent shift proportional to the number of 4- qp states is seen to cure this deficient pattern,

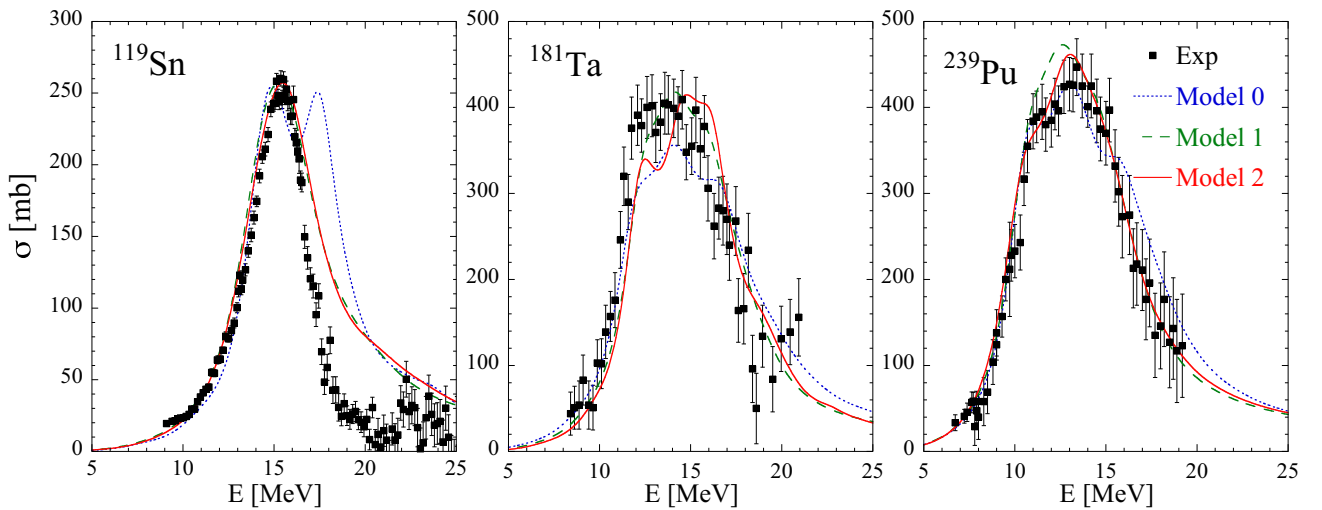


FIG. 13. Comparison between experimental photoabsorption (or photoneutron) cross sections [41–44] (squares) and the QRPA ones obtained from the interpolated strengths corresponding to Model 0 (dotted line), Model 1 (dashed line), and Model 2 (solid line) for three odd- A nuclei.

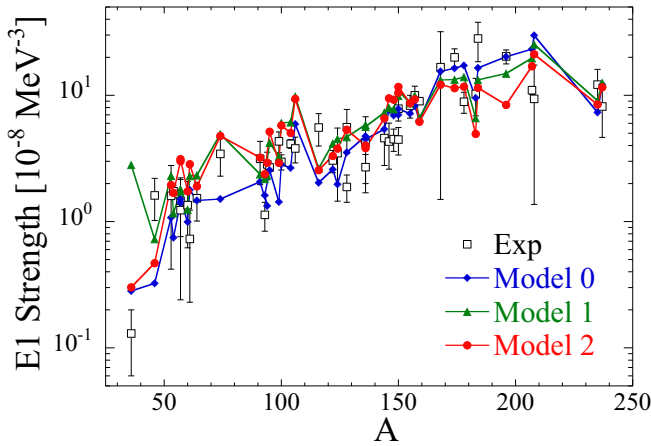


FIG. 14. Comparison of the QRPA low-energy $E1$ -strength functions with the experimental compilation [4] including resolved-resonance and thermal-capture measurements, as well as photonuclear data for nuclei from ^{36}Cl up to ^{239}U at energies ranging from 4 to 8 MeV.

the second peak being shifted into the low energy one. For this reason, Models 1 and 2 much better describe experimental data than Model 0. Because each parameter was adjusted for each nucleus to optimize the GDR properties, excellent agreement could be obtained for both spherical and deformed nuclei in most cases. The corresponding parameters Δ_0 , Γ , and δ_{4qp} adjusted for each photoabsorption cross section available experimentally for even-even nuclei are plotted in Fig. 12.

In addition to the phenomenological corrections, questions still arise (i) for experimentally unknown nuclei for which values of the Δ_0 , Γ , and δ_{4qp} parameters need to be assigned and (ii) for the odd- A and odd-odd nuclei for which no HFB+QRPA calculations can be consistently performed nowadays with the same accuracy. As it appears in Fig. 12 the adjustment of the Δ_0 , Γ , and δ_{4qp} parameters is clearly nucleus dependent without any evident N or A behavior.

Furthermore the choice of the normalization of the $4qp$ -state densities $[n_{4qp}^K(\omega)/n_{4qp}^K(\omega = 30 \text{ MeV})]$ for Model 1 and $[n_{4qp}^K(\omega)/n_{2qp}^K(\omega)]$ for Model 2] leads to different constant shift values Δ_0 , reflecting the limitation of the present strategy in the introduction of ingredients going beyond QRPA formalisms. It also allows us to test the sensitivity of our predictions with respect to different prescriptions for this phenomenological procedure. For experimentally unknown nuclei, the use of a smooth function fitting globally the N or A dependencies would inevitably give rise to somewhat larger uncertainties. Then an interpolation procedure is followed to estimate in Models 1 and 2 the parameter values when they cannot be tuned on experimental GDR data. Because the GDR width is known to be shell dependent [2], hence essentially a function of the neutron number, the interpolation is performed as a function of the neutron number N .

Concerning the odd- A and odd-odd nuclei, the $B(E1)$ distributions have not been calculated yet. To estimate their strength S_{E1} , we have designed an interpolation procedure using the QRPA predictions of the even-even nuclei based on the relative smooth variation of GDR between neighboring nuclei [40]. The procedure consists in determining the energy dependence of the strength of an odd nucleus from a geometrical mean of the neighboring even-even nuclei and normalizing the strength to the interpolated EWSR. For example, for an odd neutron number N in a even Z chain: $S_{E1}(Z, N) \propto \sqrt{S_{E1}(Z, N-1) \times S_{E1}(Z, N+1)}$. This procedure was tested and found to give satisfactory results as shown in Fig. 13 for three odd- A nuclei.

D. Low-lying strength

Up to now we have discussed the QRPA results focusing on the GDR region. It is well known that the knowledge of the low-energy part of the γ strength is crucial for the photonuclear reaction description. This part of the energy spectrum is also provided by our QRPA approach. In Fig. 14 the predictions are compared with the compilation of experimental $E1$ strength functions at energies ranging from 4 to 8 MeV [4]

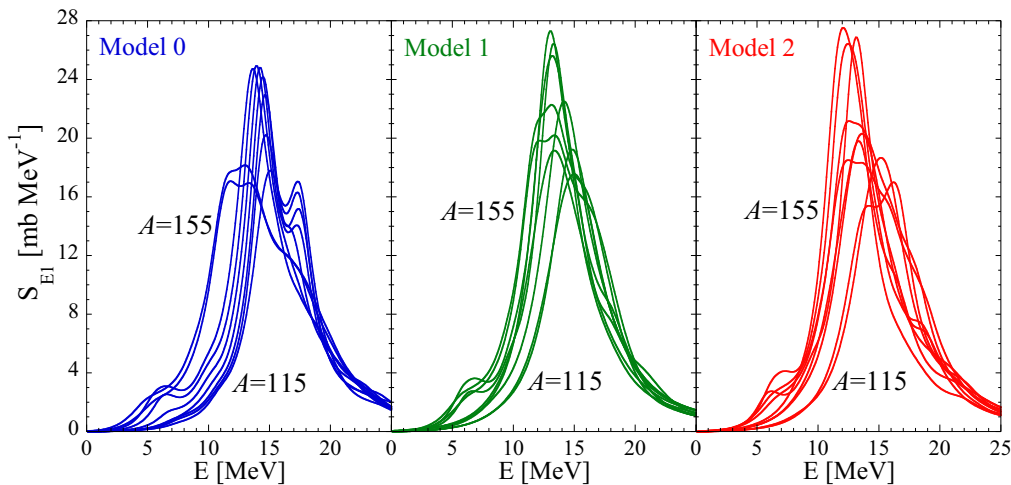


FIG. 15. Comparison between the $E1$ strength functions for Sn isotopes (from $A = 115$ to 155 by steps of $\Delta A = 5$) obtained with the three prescriptions used to correct the HFB+QRPA model based on the DIM force.

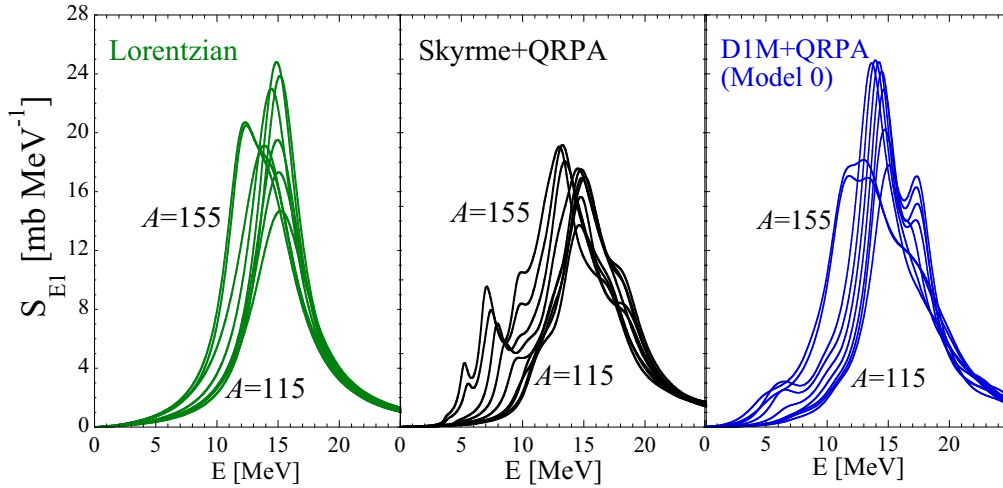


FIG. 16. Comparison between the $E1$ strength functions for Sn isotopes (from $A = 115$ to 155 by steps of $\Delta A = 5$) obtained with the Lorentzian model [4] (left panel), the microscopic QRPA calculation based on the Skyrme force [6] (central panel), and the present QRPA calculation with the D1M Gogny force (Model 0) (right panel).

for nuclei from ^{36}Cl up to ^{239}U . The data set includes resolved-resonance measurements, thermal-capture measurements, and photonuclear data. In some cases the original experimental values need to be corrected, typically for nonstatistical effects, so that only values recommended in Ref. [4] are considered in Fig. 14. The three models considered here reproduce well the trend of the strength with respect to the mass number and globally agree, within the error bars, with the low-energy $E1$ strength.

The rms deviation on the 44 theoretical to experimental ratios amounts to $f_{\text{rms}} = 1.78, 2.02$, and 1.84 for Models 0, 1, and 2, respectively. This degree of accuracy is similar to the one found with the previous Skyrme-HFB plus QRPA calculation [5,6].

E. Application to exotic neutron-rich nuclei

The theoretical approach presented here is based on microscopic QRPA calculations but it contains some phenomenological ingredients needed to reproduce reaction observables. The question of the predictive power of such an approach naturally arises when dealing with exotic nuclei. Figure 15 shows the $E1$ γ -ray strength functions for $^{115-155}\text{Sn}$ isotopes obtained with our three models (see Sec. IV C). Although the GDR predictions could be different, the appearance of some extra strength around 5 MeV for Sn isotopes above the $N = 82$ shell closure is independent of the folding prescriptions. This low-lying strength is, however, quite different from the one predicted by other models, as shown in Fig. 16 where the generalized Lorentzian (GLO) [4] and the Skyrme-HFB+QRPA [6] results are compared to the D1M-HFB+QRPA Model 0. For such exotic neutron-rich nuclei, the Skyrme-HFB plus QRPA calculation [6] predicts pygmy resonances more enhanced than the Gogny ones, while the GLO approach cannot predict by definition any additional strength at low energy. Nevertheless for nuclei close to the valley of β stability the microscopic $E1$ strength functions look somewhat similar to the phenomenological Lorentzian.

The differences illustrated in Figs. 15 and 16 between the various γ -ray strength predictions for nuclei far from the valley of stability may also have a significant impact on the predicted neutron-capture cross section of astrophysical interest. To investigate this point, the Maxwellian-averaged neutron capture rate are calculated with the TALYS code [45–48] using the γ -ray strength obtained with the three prescribed D1M+QRPA models as well as with the GLO [4] and Skyrme-HFB+QRPA models [6]. Note that, for consistency, in the present calculation of the radiative neutron capture rates, the D1M masses [29] and the HFB plus combinatorial nuclear level densities based on the D1M single-particle and pairing properties [49] are adopted. Figure 17 shows the Maxwellian-averaged neutron capture rate of the Sn isotopes for Models 1

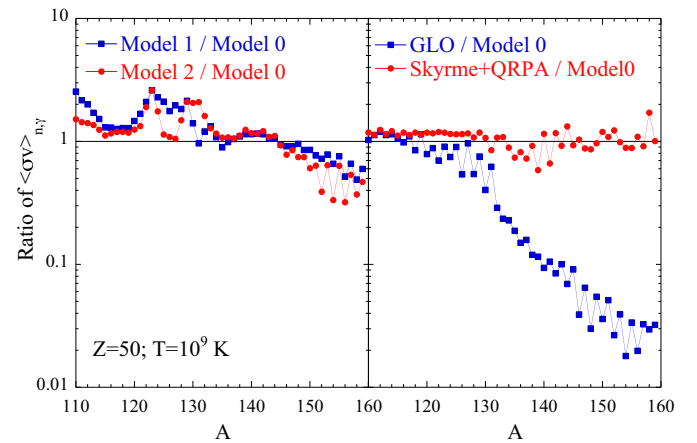


FIG. 17. (Left panel) Ratio of the Maxwellian-averaged radiative neutron capture rate (at a temperature of 10^9 K) for the Sn isotopes obtained with the three present D1M+QRPA models. (Right panel) Same where the neutron capture rate with Model 0 of the D1M+QRPA strength is compared with the one obtained with the GLO model (squares) [4] and to the one predicted with the Skyrme-HFB+QRPA model based on the BSk7 force (circles) [6].

and 2 (left panel) and GLO and Skyrme-HFB+QRPA (right panel) with respect to the Model 0 predictions used as a reference. As can be seen on the left panel of Fig. 17, the three prescriptions used to fold the original D1M+QRPA strength predict radiative neutron capture rates within a factor of 2, even for the most exotic nuclei. Similarly, the reaction rates obtained using the D1M+QRPA strengths agree somewhat well with those based on the Skyrme-HFB plus QRPA along the whole isotopic chain. This similarity can be explained by the somewhat same strength predicted at low energies below the GDR, although the Gogny calculation predicts a strength spread on a much wider energy range. However, for exotic neutron-rich Sn isotopes our present QRPA γ -ray strength is seen to give rise to reaction rates that can be about 30 times larger than those obtained with the GLO model.

V. CONCLUSIONS

Large-scale calculations of $E1$ γ -ray strength functions for even-even nuclei have been undertaken within the axially symmetric-deformed HFB+QRPA approach in a fully consistent way using the finite-range Gogny interaction. The convergence of the numerical calculation was analyzed with respect to the size of the basis (number of HO shells) and the 2 - qp excitation energy. This analysis allowed one to establish practical choices for large-scale calculations optimizing both the minimization of the computational cost and the convergence. Predictions obtained for two parameter sets of the Gogny interaction, namely D1S and D1M, have been compared and shown to give rise to a similar global behavior. Nevertheless, the D1M $E1$ strength is found to be systematically shifted, leading to lower centroid energy and a smaller EWSR in comparison with D1S.

The role of the intrinsic deformation was systematically investigated. The split between $K=0$ and $|K|=1$ total angular momentum projections for deformed nuclei as well as their opposite hierarchy for prolate and oblate shapes was confirmed in the whole nuclear chart. Large deformations give rise to a double peak structure while small deformations lead to a split too small to be disentangled.

We have calculated the $E1$ γ -ray strength for all even-even nuclei for which photoabsorption data exist. The comparison between QRPA and measured cross sections revealed a systematic energy shift of about ~ 2 MeV of the Gogny-QRPA strength with respect to experimental data. This energy shift

(of ~ 2 MeV) induces that the theoretical values of the EWSR obtained for all the nuclei studied in the present work are systematically larger than the experimental ones. Three prescriptions have been proposed to cure this discrepancy. They correspond to a folding procedure of the $B(E1)$ discrete distribution on the basis of a Lorentzian function, which not only shifts the $E1$ strength down by more or less 2 MeV but also widen the distribution, as experimentally observed in photoabsorption cross sections. Such a folding is also needed to produce S_{E1} strength functions as inputs in reaction models (e.g., TALYS code). Two of these prescriptions fit the experimental photoabsorption data by adjusting the width and energy shift parameters of the Lorentzian, taking into account the density of dipole 4 - qp excitations. This microscopic ingredient allows us to investigate effects beyond the standard QRPA description involving only 2 - qp excitations. The three prescriptions are found to give a satisfactory description of experimental data and are shown to provide globally similar $E1$ strength. In particular the neutron capture rates of astrophysical interest do not differ by more than a factor of 2 for the three prescriptions, even far away from the valley of β stability.

Further improvements of the present approach can be envisioned. First, the interpolation procedure for odd nuclei can be replaced by a fully microscopic QRPA calculation of odd systems. Second, the folding procedure can be improved by including microscopically the particle-phonon coupling. Third, dynamic deformations can be considered when differing from the HFB one (see, e.g., Fig. 3 of Ref. [50]). The present encouraging results, in parallel to those obtained for nuclear masses [29] and nuclear level densities [49], will allow us to include such microscopic ingredients (obtained on the basis of one unique Gogny interaction) into cross sections calculations. We believe that working along such a path is a way, in the future, to improve cross-section evaluations and predictions on the basis of reliable and accurate microscopic inputs.

ACKNOWLEDGMENTS

We acknowledge PRACE for awarding us access to resource CURIE based in France at TGCC-CEA. S.G. acknowledges the support of the FRS-FNRS and M.M. of the “Espace de Structure et de réactions Nucléaire Théorique” (ESNT, <http://esnt.cea.fr>) at CEA. We also wish to thank Isabelle Deloncle for stimulating discussions and her constructive comments.

-
- [1] M. Arnould, S. Goriely, and K. Takahashi, *Phys. Rep.* **450**, 97 (2007).
 - [2] S. Goriely, *Phys. Lett. B* **436**, 10 (1998).
 - [3] Y. Xu, S. Goriely, A. J. Koning, and S. Hilaire, *Phys. Rev. C* **90**, 024604 (2014).
 - [4] R. Capote *et al.*, *Nucl. Data Sheets* **110**, 3107 (2009).
 - [5] S. Goriely and E. Khan, *Nucl. Phys. A* **706**, 217 (2002).
 - [6] S. Goriely, E. Khan, and M. Samyn, *Nucl. Phys. A* **739**, 331 (2004).
 - [7] S. Péru and H. Goutte, *Phys. Rev. C* **77**, 044313 (2008).
 - [8] M. Martini, S. Péru, and M. Dupuis, *Phys. Rev. C* **83**, 034309 (2011).
 - [9] S. Péru, G. Gosselin, M. Martini, M. Dupuis, S. Hilaire, and J.-C. Devaux, *Phys. Rev. C* **83**, 014314 (2011).
 - [10] M. Martini, S. Péru, and S. Goriely, *Phys. Rev. C* **89**, 044306 (2014).
 - [11] J. Decharge and L. Sips, *Nucl. Phys. A* **407**, 1 (1983).
 - [12] S. Péru and M. Martini, *Eur. Phys. J. A* **50**, 88 (2014).
 - [13] P. Ring and P. Schuck, *The Nuclear Many-Body Problem* (Springer, New York, 1920).

- [14] C. Yannouleas, M. Dworzecka, and J. J. Griffin, *Nucl. Phys. A* **397**, 239 (1983).
- [15] C. Yannouleas, *Phys. Rev. C* **35**, 1159 (1987).
- [16] G. F. Bertsch, P. F. Bortignon, and R. A. Broglia, *Rev. Mod. Phys.* **55**, 287 (1983).
- [17] V. G. Soloviev, *Theory of Complex Nuclei* (Pergamon Press, Oxford, 1976).
- [18] V. G. Soloviev, Ch. Stoyanov, and V. V. Voronov, *Nucl. Phys. A* **304**, 503 (1978).
- [19] N. Tsoneva and H. Lenske, *Phys. Rev. C* **77**, 024321 (2008).
- [20] P. Papakonstantinou and R. Roth, *Phys. Lett. B* **671**, 356 (2009).
- [21] D. Gambacurta, M. Grasso, and F. Catara, *Phys. Rev. C* **84**, 034301 (2011).
- [22] D. Gambacurta, M. Grasso, V. De Donno, G. Co', and F. Catara, *Phys. Rev. C* **86**, 021304 (2012).
- [23] D. Gambacurta, F. Catara, M. Grasso, M. Sambataro, M. V. Andrés, and E. G. Lanza, *Phys. Rev. C* **93**, 024309 (2016).
- [24] G. Colo and P. F. Bortignon, *Nucl. Phys. A* **696**, 427 (2001).
- [25] S. Kamekazhiev, J. Speth, and G. Tertychny, *Phys. Rep.* **393**, 1 (2004).
- [26] D. Sarchi, P. F. Bortignon, and G. Colo, *Phys. Lett. B* **601**, 27 (2004).
- [27] A. Avdeenkov, S. Goriely, S. Kamekazhiev, and S. Krewald, *Phys. Rev. C* **83**, 064316 (2011).
- [28] O. Achakovskiy, A. Avdeenkov, S. Goriely, S. Kamekazhiev, and S. Krewald, *Phys. Rev. C* **91**, 034620 (2015).
- [29] S. Goriely, S. Hilaire, M. Girod, and S. Péru, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 242501 (2009).
- [30] B. L. Berman and S. C. Fultz, *Rev. Mod. Phys.* **47**, 713 (1975).
- [31] G. Scamps and D. Lacroix, *Phys. Rev. C* **89**, 034314 (2014).
- [32] P. Van Isacker, M. A. Nagarajan, and D. D. Warner, *Phys. Rev. C* **45**, R13 (1992).
- [33] K. Yoshida and N. V. Giai, *Phys. Rev. C* **78**, 014305 (2008).
- [34] W. Kleinig, V. O. Nesterenko, J. Kvasil, P.-G. Reinhard, and P. Vesely, *Phys. Rev. C* **78**, 044313 (2008).
- [35] D. Pena Arteaga and P. Ring, *Phys. Rev. C* **77**, 034317 (2008).
- [36] D. Pena Arteaga, E. Khan, and P. Ring, *Phys. Rev. C* **79**, 034311 (2009).
- [37] C. Losa, A. Pastore, T. Dossing, E. Vigezzi, and R. A. Broglia, *Phys. Rev. C* **81**, 064307 (2010).
- [38] S. Hilaire and M. Girod, *Eur. Phys. J. A* **33**, 237 (2007).
- [39] S. Peru, J. F. Berger, and P. F. Bortignon, *Eur. Phys. J. A* **26**, 25 (2005).
- [40] IAEA-Tecdoc-1178 (International Atomic Energy Agency, Vienna, 2000).
- [41] S. C. Fultz, B. L. Berman, J. T. Caldwell, R. L. Bramblett, and M. A. Kelly, *Phys. Rev.* **186**, 1255 (1969).
- [42] G. M. Gurevich, L. E. Lazareva, V. M. Mazur, S. Yu. Merkulov, G. V. Solodukhov, and V. A. Tyutin, *Nucl. Phys. A* **351**, 257 (1981).
- [43] M. A. P. V. De Moraes and M. F. Cesar, *Physica Scripta* **47**, 519 (1993).
- [44] G. M. Gurevich, L. E. Lazareva, V. M. Mazur, G. V. Solodukhov, and B. A. Tulupov, *Nucl. Phys. A* **273**, 326 (1976).
- [45] S. Hilaire, A. J. Koning, and S. Goriely, *J. Korean Phys. Soc.* **59**, 767 (2011).
- [46] S. Goriely, S. Hilaire, and A. J. Koning, *Astron. Astrophys.* **487**, 767 (2008).
- [47] A. J. Koning, S. Hilaire, and M. C. Duijvestijn, *Proceedings of the International Conference on Nuclear Data for Science and Technology*, edited by O. Bersillon *et al.* (EDP Sciences, 2008), p. 211.
- [48] A. J. Koning and D. Rochman, *Nucl. Data Sheets* **113**, 2841 (2012).
- [49] S. Hilaire, M. Girod, S. Goriely, and A. J. Koning, *Phys. Rev. C* **86**, 064317 (2012).
- [50] J. P. Delaroche, M. Girod, J. Libert, H. Goutte, S. Hilaire, S. Péru, N. Pillet, and G. F. Bertsch, *Phys. Rev. C* **81**, 014303 (2010).

3.1.4.2 Étude des transitions magnétiques $M1$

Un second article, écrit dans le même esprit de calculs systématiques que celui qui vient d'être présenté, a été publié lui aussi dans la revue *Physical Review C*. Dans cette étude, on s'intéresse cette fois-ci au rôle de la réponse magnétique dipolaire $M1$, qui est celle de plus grande importance après la réponse $E1$. L'obtention de la réponse magnétique est rendue possible par la programmation des opérateurs de transitions magnétiques évoqués dans la partie 1.5.2.4. Cet opérateur, bien que plus complexe que l'opérateur électrique, répond à des formules relativement proches. Le travail effectué concernant la généralisation du formalisme des opérateurs électriques a pu être transposé assez facilement aux opérateurs magnétiques. Avant cette implémentation, seuls les noyaux sphériques pouvaient être étudiés. L'uniformisation des opérateurs a permis d'étendre le calcul aux noyaux déformés. Encore une fois, les résultats ont été stockés dans des fichiers de sorties au format standardisé mis au point au moment de l'étude précédente.

Gogny-Hartree-Fock-Bogolyubov plus quasiparticle random-phase approximation predictions of the $M1$ strength function and its impact on radiative neutron capture cross section

S. Goriely,¹ S. Hilaire,² S. Péru,² M. Martini,³ I. Deloncle,^{2,4} and F. Lechaftois²

¹*Institut d'Astronomie et d'Astrophysique, Université Libre de Bruxelles, CP-226, 1050 Brussels, Belgium*

²*CEA, DAM, DIF, F-91297 Arpajon, France*

³*ESNT, CEA, IRFU, Service de Physique Nucléaire, Université de Paris-Saclay, F-91191 Gif-sur-Yvette, France*

⁴*CSNSM, CNRS and Université Paris-Sud, F-91405 Orsay Campus, France*

(Received 26 July 2016; published 7 October 2016)

Valuable theoretical predictions of nuclear dipole excitations in the whole chart are of great interest for different nuclear applications, including in particular nuclear astrophysics. Here we extend our large-scale calculations of the $E1$ γ -ray strength function, obtained in the framework of the axially-symmetric-deformed quasiparticle random phase approximation (QRPA) based on the finite-range D1M Gogny force, to the calculation of the $M1$ strength function. We compare our QRPA prediction of the $M1$ strength with available experimental data and show that a relatively good agreement is obtained provided the strength is shifted globally by about 2 MeV and increased by an empirical factor of 2. Predictions of the $M1$ strength function for spherical and deformed nuclei within the valley of β stability as well as in the neutron-rich region are discussed. Its impact on the radiative neutron capture cross section is also analyzed.

DOI: [10.1103/PhysRevC.94.044306](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.94.044306)

I. INTRODUCTION

Radiative neutron capture cross sections play a key role in almost all nuclear applications. Despite a huge effort to measure such radiative neutron capture cross sections, theoretical predictions are required to fill the gaps, both for nuclei for which measurements are not feasible at the present time, in particular for unstable targets, and for energies that cannot be reached in the laboratory. Some applications, such as nuclear astrophysics, also require the determination of radiative neutron capture cross sections for a large number of exotic neutron-rich nuclei [1]. In this case, large-scale calculations on the basis of sound and accurate models need to be performed to ensure a reliable extrapolation far away from the experimentally known region.

The neutron capture rates are commonly evaluated within the framework of the statistical model of Hauser-Feshbach, although the direct capture contribution plays an important role for very exotic nuclei [2]. The fundamental assumption of the Hauser-Feshbach model is that the capture goes through the intermediary formation of a compound nucleus in thermodynamic equilibrium. In this approach, the (n, γ) cross section strongly depends on the electromagnetic interaction, i.e., the photon deexcitation probability. In turn, it is well known that the photon strength function is dominated by the electric dipole contribution. The various multipolarities of the γ -ray strength function are traditionally modeled by the phenomenological Lorentzian approximation or some of its energy-dependent variants [3]. The reliability of the γ -ray strength predictions can, however, be greatly improved by the use of microscopic or semimicroscopic models. Indeed, provided satisfactory reproduction of available experimental data, the more microscopic the underlying theory, the greater the confidence in the extrapolations out towards the experimentally unreachable regions. Microscopic approaches are rarely used for practical applications essentially for two reasons. First, the time cost is

often prohibitive for large-scale calculations. Second, the fine tuning required to reproduce accurately a large experimental data set is very delicate, in addition to being time consuming. A prominent exception is represented by Refs. [4–6] where a complete set of γ -ray strength functions was derived from mean field plus quasiparticle random-phase approximation (QRPA) calculations. In Refs. [4,5], zero-range Skyrme forces were considered and phenomenological corrections applied to properly describe the splitting of the giant dipole resonance in deformed nuclei as well as the damping of the collective motion.

Recently, axially-symmetric-deformed QRPA calculations based on Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB) calculations using the finite-range Gogny interaction have been shown to provide rather satisfactory predictions of the $E1$ strength [6]. Such calculations have been used to estimate the corresponding radiative neutron capture cross sections. However, the contribution of the other multipolarities is still calculated on the basis of standard Lorentzian-type functionals that have been parametrized on the few experimental data available. Among those, the $M1$ strength is known to dominate after the $E1$ contribution. The magnetic dipole response is known experimentally to include two major components, namely (i) an orbital component at low excitation energies, typically around 3 MeV, which in deformed nuclei is called the scissors mode [7], and (ii) a spin-flip component around 8 MeV which includes the largest fraction of the $M1$ strength. The scissors mode in deformed nuclei is interpreted as neutrons and protons vibrating with a small angle with respect to each other in a scissors-like motion, while the higher energy component describes a resonance-like structure made of proton and neutron spin-flip excitations. Theoretical as well as experimental insights on the magnetic dipole excitations in nuclei can be found in the review paper of Ref. [8].

In the present paper, we complement our previous study of the $E1$ strength [6], as well as of the charge exchange

Gamow-Teller strength [9], by estimating the magnetic dipole $M1$ strength within exactly the same HFB+QRPA framework on the basis of the same D1M interaction [10]. QRPA calculations of the $M1$ strength have been performed in the past (see, e.g., Refs. [11–14]). The present calculations has, however, the specificity to have been applied to a large number of nuclei, to be based on the finite-range Gogny interaction, and, most of all, to be axially-symmetric deformed. The latter property consequently allows us to estimate also the scissors component of the $M1$ strength. Due to the scarcity of experimental data in the giant resonance region, i.e. around 8–9 MeV, the QRPA prediction provides an alternative way with respect to the phenomenological standard Lorentzian (SLO) description of the spin-flip giant resonance mode [3] to estimate the $M1$ contribution for a large set of nuclei. In addition, it is also well known that the low-energy scissors mode for deformed nuclei is not described by the Lorentzian approximation. In this case, a more microscopic model can provide some systematic insight of its amplitude and its impact on the total strength function and consequently on the radiative capture cross section.

The paper is organized as follows. In Sec. II, the axially-symmetric-deformed HFB+QRPA formalism is described in its standard form and the way corrections beyond QRPA are included phenomenologically is detailed. The QRPA prediction of the $M1$ strength function is discussed in Sec. III, including its sensitivity to the size of the finite harmonic oscillator (HO) basis and the cutoff effects. In Sec. IV, we compare our D1M+QRPA prediction of the $M1$ strength with available experimental data, and, in Sec. V, we study the $M1$ strength function in exotic neutron-rich nuclei. The impact of the newly calculated $M1$ strength function on the Hauser-Feshbach estimate of the radiative neutron capture cross section is discussed in Sec. VI. Conclusions are finally drawn in Sec. VII.

II. THE THEORETICAL MODEL

A. Standard HFB+QRPA approach

We summarize here the formalism of the consistent QRPA approach based on axially-symmetric-deformed HFB equations solved in a finite HO basis in cylindrical coordinate. For more details, we refer the reader to Refs. [6,15–17]. In the present calculation, the number of involved major shells is $N_{\text{sh}} = N_0 + 1$ where N_0 is the maximum value of the energy quantum number N . Solving the HFB equations in an HO basis leads to the diagonalization of an Hamiltonian matrix: eigenvalues and eigenvectors are respectively Bogoliubov quasiparticle (qp) excitation energies and u and v components of the Bogoliubov transformation. As a consequence the positive energy continuum is discretized. The first-order excitations for even-even nuclei are given by two-quasiparticle (2-qp) excitations. QRPA phonons are linear combinations of these 2-qp excitations. According to the symmetries imposed, the projection K of the angular momentum J on the symmetry axis and the parity Π are good quantum numbers for the phonons. Consequently, QRPA calculations can be performed separately for each K^Π set. In this context, phonons are

characterized by the excitation operator

$$\theta_{n,K^\Pi}^+ = \sum_{ij} X_{n,K^\Pi}^{ij} \eta_i^+ \eta_j^+ - (-)^K Y_{n,K^\Pi}^{ij} \eta_j \eta_i, \quad (1)$$

where η^+ and η are the qp operators, related to the HO particle operators c^+ and c through the u and v Bogoliubov transformation matrices:

$$\eta_i^+ = u_{i\alpha} c_\alpha^+ - v_{i\alpha} c_\alpha. \quad (2)$$

Here and in the following, repeated indices are implicitly summed over; latin and greek letters denote qp and harmonic oscillator states, respectively. In principle QRPA calculation can be performed without any cut-off in energy of the 2-qp states neither in occupation probabilities (v^2) of single-qp states. The amplitudes X and Y of Eq. (1) are solutions of the well-known QRPA matrix equation [18]

$$\begin{pmatrix} A & B \\ B & A \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_{n,K^\Pi} \\ Y_{n,K^\Pi} \end{pmatrix} = \omega_{n,K^\Pi} \begin{pmatrix} X_{n,K^\Pi} \\ -Y_{n,K^\Pi} \end{pmatrix}, \quad (3)$$

where $\omega_{n,K}$ are the energies of the QRPA excited states. To ensure consistency, the same interaction (parameter set of the Gogny force) is used to calculate the A and B matrix elements and the underlined HFB mean field [16]. In the present study, we consider the D1M [10] Gogny force only. Once the QRPA matrix is diagonalized, the X and Y amplitudes allow to calculate the strength for each electromagnetic mode. Here, we focus on the magnetic dipole (multipolarity $\lambda = 1$, parity $\Pi = +$) mode. The corresponding excitation operator is

$$\hat{T}_{1,K} = \mu_N \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sum_i^A (g_l^{(i)} (l_K)_i + g_s^{(i)} (s_K)_i), \quad (4)$$

where μ_N is the Bohr magneton and g_l and g_s the orbital and spin gyromagnetic factors for which we take the free-nucleon values, i.e.,

$$\begin{aligned} g_l^{(i)} &= 1, & g_s^{(i)} &= 5.586 & \text{for protons,} \\ g_l^{(i)} &= 0, & g_s^{(i)} &= -3.826 & \text{for neutrons.} \end{aligned}$$

Note that no quenching is applied to the g_s factor. We remind here of the correspondence $\{0, 1, -1\} \leftrightarrow \{z, +, -\}$ between the K values and the components of the spin and angular momentum operators.

The total magnetic distribution $B(M1)$ (in μ_N^2) is obtained by summing the contributions of $K^\Pi = 0^+$ and twice that of $K^\Pi = 1^+$, the $K^\Pi = -1^+$ solution being equal to the $K^\Pi = 1^+$ one through the conservation of time reversal symmetry. We remind that in the spherical symmetry case, the $K = 0$ and $|K| = 1$ states are degenerate. In deformed nuclei, the strength splits up into two components corresponding to two different angular momentum projection K values.

B. Beyond the QRPA description

The well established formalism described above takes into account only 2-qp excitations. Meson-exchange currents and Δ -isobar excitations effects [19] are not included in the present approach. Furthermore, more complex excitations than the simple 2-qp ones are not taken into account. As discussed in

Ref. [20], multiparticle multihole effects increase significantly the orbital part of the magnetic transition operator. The interaction between the single-particle and low-lying collective phonon degrees of freedom [21] leads to a fragmentation and broadening of the response and to a dynamical redistribution of the transition strength by shifting part of the strength. To include all the aforementioned ingredients beyond the 2-qp excitations in a phenomenological way, the discrete QRPA $B(M1)$ distribution is folded by a Lorentzian function

$$L(E, \omega) = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma E^2}{[E^2 - (\omega - \Delta)^2]^2 + \Gamma^2 E^2}, \quad (5)$$

leading to a continuous $M1$ strength function

$$S_{M1}(E) = f_{\text{corr}} \times \sum_n L(E, \omega_n) B(M1)(\omega_n). \quad (6)$$

Then, the $M1$ strength function f_{M1} (in MeV^{-3}) can be deduced from S_{M1} by applying the conversion factor of 0.044 (e.g., [22]).

In Eq. (5), Γ is the width at half maximum and Δ allows for an energy shift. For the $E1$ strength function, these quantities have been adjusted on experimental photoabsorption data. In the present study, similar corrections are applied to the $M1$ resonance, at least in the zero-order approximation (the so-called Model 0 in Ref. [6]). For the $M1$ component, we adopt a similar shift of $\Delta = 2$ MeV for the spin-flip resonance; however, such a shift at and above the centroid energy of 10 MeV can hardly be applied to the $M1$ strength at the lowest energies, in particular to the scissors mode in deformed nuclei. A study of our QRPA predictions of the low-energy vibrational states shows that the first experimental energies [23] are overestimated by typically 500 keV. For this reason, we apply in the present study an energy shift of $\Delta = 0.5$ MeV for $E \leq 0.5$ MeV and $\Delta = 2$ MeV for $E \geq 10$ MeV, and for $0.5 \leq E \leq 10$ MeV, the energy shift Δ is interpolated linearly between these two values. This shift describes in a very approximate way the energy-dependent effects beyond the standard 2-qp QRPA excitations and the coupling between the single-particle and low-lying collective phonon degrees of freedom. This approximation represents a simplified version of Models 1 or 2 in Ref. [6], where the energy-dependence was assumed to be proportional to the density of four quasiparticles.

As far as the broadening is concerned, in order to keep some structure inherent to the QRPA calculation, we adopt a width $\Gamma = 0.5$ MeV. Indeed, considering a larger width of 2.5 MeV, as used in Model 0 of Ref. [6] and required to reproduce the dominant $E1$ component of the giant resonance properties seen in photoabsorption data, would inevitably wipe out most of the structure, in particular at low energies where a non-negligible part of the strength is located, especially for deformed nuclei.

Finally, the correction factor of $f_{\text{corr}} = 2$ is applied in Eq. (6) to reproduce at best measured $M1$ strengths, as discussed in Sec. IV. Note that the $B(M1)$ distributions have not been calculated for odd- A and odd-odd nuclei. To estimate their $M1$ strength, we have used the same interpolation procedure as the one used for the $E1$ strength (see Ref. [6] for more details).

III. THE QRPA PREDICTION OF THE $M1$ STRENGTH FUNCTION

The HFB+QRPA calculations remain sensitive to the number of HO shells used and the energy cutoff E_c accounted for on the 2-qp state energies. Below we discuss the impact of these effects on the calculated $M1$ strength function, keeping in mind the feasibility of such calculations regarding computational constraints.

A. Sensitivity analysis

A key ingredient of any QRPA calculation concerns the number of HO shells, N_{sh} , included, as well as the cutoff energy E_c on the 2-qp states energies. In order to investigate the impact of N_{sh} on the γ -ray strength function and to verify the convergence, we have performed QRPA calculations for several odd values of N_{sh} and different energy cutoffs. The results are shown in Fig. 1 where the QRPA strength is widened by a Lorentzian function Eq. (5) of width of $\Gamma = 0.5$ MeV, no shift being applied ($\Delta = 0$). It can be seen that the $M1$ strength distribution remains rather insensitive to the cutoff energy, only the high-energy spin-flip resonance may be shifted upward by a few hundred keV if a small energy cutoff of 60 MeV is adopted. Similarly, the $M1$ strength function is not too much affected by the size of the HO basis. A low value of N_{sh} is seen to affect the high-energy resonance, but otherwise the strength distribution

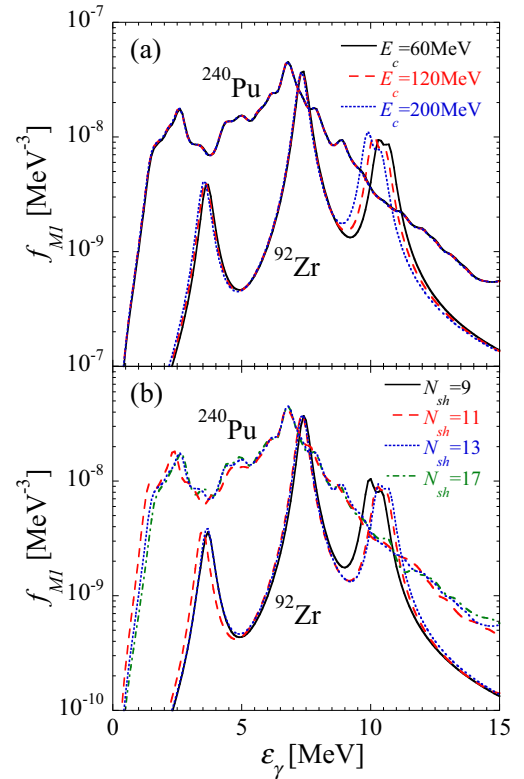


FIG. 1. (a) $M1$ strength f_{M1} for ^{92}Zr and ^{240}Pu for a number of HO shells $N_{\text{sh}} = 13$ and different cutoff energies $E_c = 60, 120$, and 200 MeV. (b) The same as (a) for $E_c = 60$ MeV and different shell numbers $N_{\text{sh}} = 9, 11, 13$, and 17 (the case of $N_{\text{sh}} = 17$ has been calculated in the Pu case only).

remains rather robust with respect to different adopted values of N_{sh} . Clearly the differences shown in Fig. 1 have no impact of any kind on the radiative neutron capture cross section calculated in Sec. VI. For these reasons, most of the $M1$ calculations presented here have been obtained with a basis dimension of $N_{\text{sh}} \geq 11$ and a cutoff energy of $E_c = 60$ MeV (for N and $Z \leq 70$, we adopt $N_{\text{sh}} \geq 9$).

B. The QRPA $M1$ strength

The $B(M1)$ strength has been calculated for about 412 even-even nuclei from O to Pu including the valley of β stability as well as neutron-rich nuclei with $26 \leq Z \leq 70$ and up to around 20 extra neutrons away from the valley of stability (for Sn, the calculation includes isotopes up to the neutron drip line). The corresponding centroid energies and total integrated strengths are shown in Fig. 2. It can be seen that the centroid energy systematically lies between 10 and 12 MeV with some peak structure observed around neutron magic numbers. In such spherical nuclei, no scissors mode is obtained, so that the strength is not brought down to lower energies, as in deformed nuclei. The integrated strength is found to increase significantly as a function of the atomic

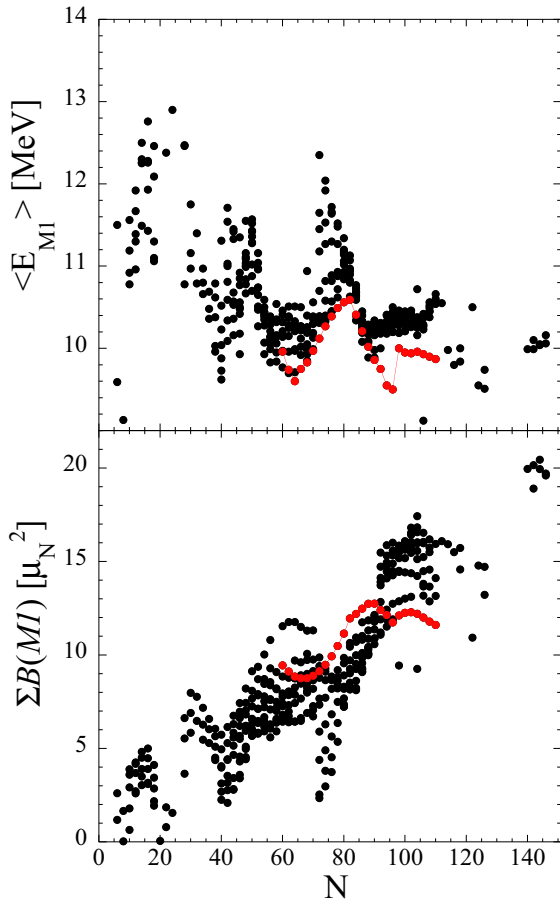


FIG. 2. Centroid $M1$ energy and total $B(M1)$ strength estimated for the 412 even-even nuclei around the valley of stability for which QRPA calculations have been performed. The Sn isotopic chain is shown by the red circles.

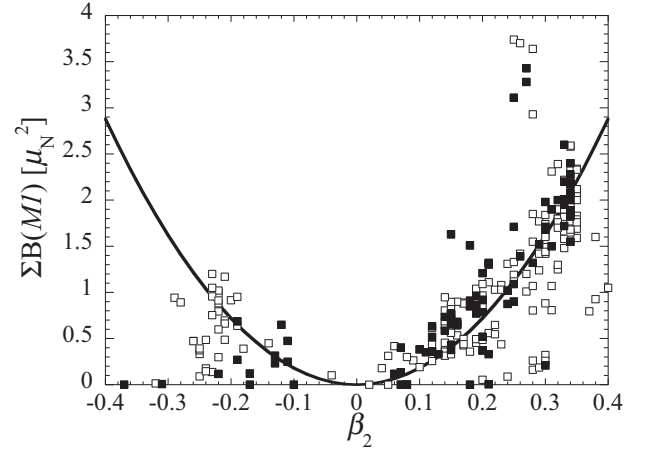


FIG. 3. Total $K = 1^+$ strength below 4.5 MeV as a function of the quadrupole deformation β_2 for the deformed nuclei in our set of 412 even-even nuclei. The full squares correspond to stable nuclei and long-lived actinides, while open squares depict neutron-rich nuclei. The solid curve is the $18\beta_2^2$ function in μ_N^2 units.

mass and the neutron number, although we find that for the Sn isotopic chain it saturates to a rather constant value within the neutron rich region for $N \gtrsim 88$.

In Fig. 3, we show for deformed nuclei the total $K=1^+$ strength obtained below 4.5 MeV as a function of the quadrupole deformation β_2 . The strength of the corresponding scissors mode is found to globally increase as the square of the deformation, as already pointed out in Ref. [8] on the basis of experimental data in the rare earth region. The overall quadratic dependence $18\beta_2^2$ is about twice lower than found experimentally, justifying the need to increase the QRPA strength by a factor f_{corr} of about 2, as discussed in Sec. IV. It should be noted that a strict energy threshold at 4.5 MeV captures most of the strength in the scissors mode but remains an approximation. The actinides with a significant strength above $3\mu_N^2$ are seen not to follow the global trend. A set of nuclei are also characterized with a scissors mode strength about twice smaller; they are, essentially, neutron-rich isotopes of Kr, Te, and Hg. Similarly, some light stable isotopes of Mg and Si do not present any significant low-energy $M1$ strength.

IV. COMPARISON WITH EXPERIMENTAL DATA

In this section, we compare our D1M+QRPA prediction of the $M1$ strength S_{M1} after renormalization by the f_{corr} factor and the energy shift Δ with available experimental data. The first comparison is shown in Fig. 4 for ^{106}Pd and ^{198}Au which represent two cases where the giant $M1$ strength has been derived experimentally from a detailed analysis of the average resonance capture data [24–26]. As can be observed, the strength around the spin-flip resonance mode between 6 and 8 MeV for ^{106}Pd and 4 to 6 MeV for ^{198}Au is relatively well described by the QRPA calculation. In addition to the main strength in this region, some D1M+QRPA $M1$ strength is predicted at low energies, around 3 MeV, corresponding to the scissors mode for the ^{106}Pd deformation of $\beta_2 = 0.19$ found with the D1M interaction. ^{198}Au is predicted to be oblate with a

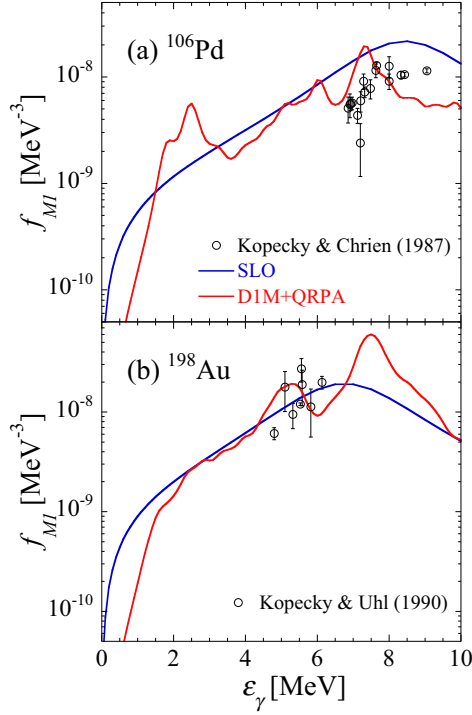


FIG. 4. (a) Comparison between experimental [24,25] and DIM+QRPA $M1$ strength functions for ^{106}Pd . Also shown is the SLO approximation recommended in Ref. [27]. (b) The same for ^{198}Au with experimental data taken from [24,26].

small deformation of $\beta_2 = -0.11$ and its DIM+QRA strength does not show a significant contribution at low energies, but rather around 8 MeV. Keeping in mind that the strength function of this odd-odd nucleus is obtained by interpolation, blocking approximation would further improve its calculation.

We also compare in Fig. 4 the global phenomenological model recommended by the RIPL-1 library [27]. In this case, the $M1$ strength function is assumed to be described by the spin-flip giant resonance mode through a SLO function

$$f_{M1}^{\text{SLO}}(\epsilon_\gamma) = \frac{\sigma_0}{3(\pi\hbar c)^2} \frac{\epsilon_\gamma \Gamma_0^2}{(\epsilon_\gamma^2 - E_0^2)^2 + \epsilon_\gamma^2 \Gamma_0^2} \quad (7)$$

with a global parametrization for the centroid energy and width corresponding to $E_0 = 41A^{-1/3}$ MeV and $\Gamma_0 = 4$ MeV [3] and for a peak cross section such that, at the reference energy of 7 MeV, $f_{M1}^{\text{SLO}} = 1.5810^{-9} A^{0.47}$ MeV $^{-3}$ [27]. Other prescriptions for the amplitude of the $M1$ strength function have been proposed, in particular relating the $E1$ and $M1$ strengths around the same reference energy of 7 MeV through $f_{E1}/f_{M1} = 0.0588A^{0.878}$ [3], but will not be considered in the present study, since it remains sensitive to the adopted $E1$ strength model.

Similarly to Fig. 4, we compare in Fig. 5 the experimental $M1$ photoabsorption cross section of the slightly deformed ^{128}Xe and spherical ^{134}Xe obtained with quasimonoenergetic and linearly polarized γ -ray beams [28] with our DIM+QRPA predictions as well as the SLO prescription [27]. Although the $M1$ cross section in the energy region of the spin-flip resonance is underestimated and rather too broad for ^{128}Xe (resulting

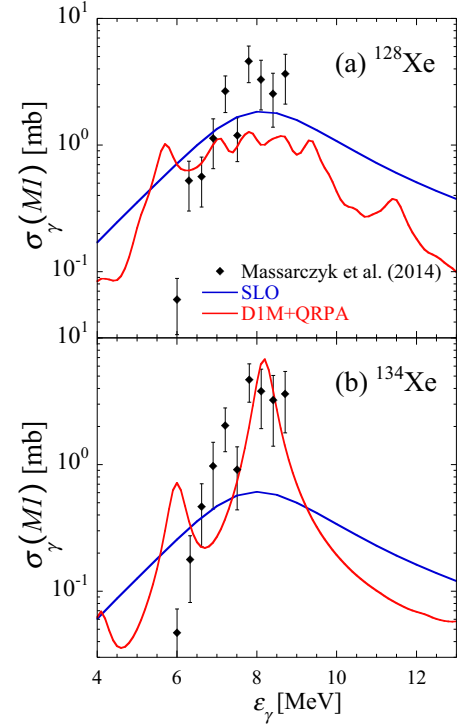


FIG. 5. Same as Fig. 4 for the $M1$ photoabsorption cross section σ_γ of (a) ^{128}Xe and (b) ^{134}Xe . Experimental data are taken from Ref. [28].

essentially from the deformation effects), the overall ^{134}Xe cross section is rather well described, especially in comparison with the SLO approximation. Similar QRPA results were obtained in Ref. [28].

Figure 6 compares the integrated experimental $M1$ strength estimated within a given energy range [29–39] with the one predicted by our DIM+QRPA model. Most of these ranges, especially for rare-earth and actinide nuclei, are located at low energies between typically 2 and 4 MeV and correspond to the scissors mode (they are shown as circles in Fig. 6). The integrated strength measured above $5\mu_N^2$ corresponds to

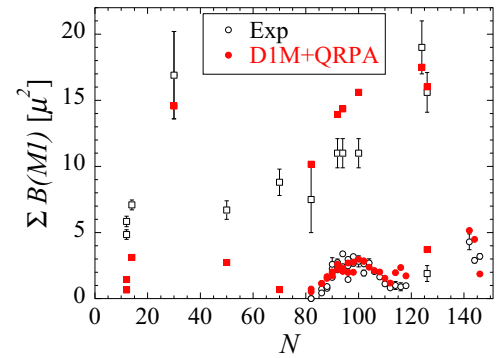


FIG. 6. Comparison between experimental [29–40] (open symbols) and DIM+QRPA (full symbols) values of the integrated strength $\sum B(M1)(\mu_N^2)$ in the well defined energy range given by the measurements. Circles and squares correspond to data below or above 4 MeV, respectively.

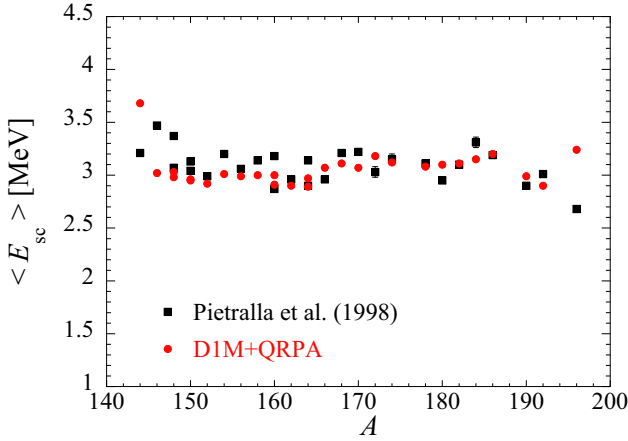


FIG. 7. Comparison between experimental [41] and D1M+QRPA mean excitation energy of the scissors mode.

energy ranges closer to the giant resonance mode above 4 MeV. Globally it can be seen that, with the correction factor of 2 and the 2 MeV shift introduced in the QRPA strength [Eq. (6)], the total strength observed is relatively well described, especially for the scissors mode. Similarly, the excitation of the scissors mode is found to be systematically located around 3 MeV for all rare-earth nuclei for which experimental data is available at low energies [8,41], as shown in Fig. 7. The D1M+QRPA mean energy

$$\langle E_{sc} \rangle = \frac{\int_0^{E_{\max}} E S_{M1}(E) dE}{\int_0^{E_{\max}} S_{M1}(E) dE} \quad (8)$$

illustrated in Fig. 7 is obtained assuming the scissors mode lies below $E_{\max} = 4.5$ MeV, and is seen to reproduce fairly well the constant measured value, provided the energy shift Δ , as described in Sec. II B, is applied.

The need for an energy shift and scaling factor f_{corr} corrections to the D1M+QRPA strength is also confirmed when comparing our $B(M1)$ strength distribution in ^{208}Pb with experimental data between 7 and 9 MeV. We show in Fig. 8 our D1M+QRPA predictions with and without the energy shift

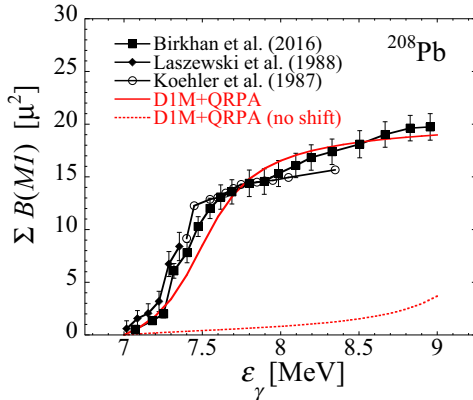


FIG. 8. Comparison between experimental [31,42,43] and D1M+QRPA integrated $M1$ strength in ^{208}Pb between 7 and 9 MeV with (solid line) and without (dashed line) energy shift Δ .

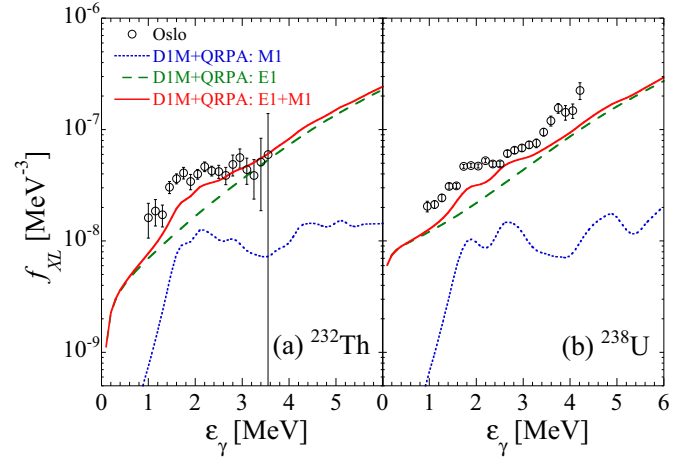


FIG. 9. (a) Comparison between experimental [44] and D1M+QRPA strength for ^{232}Th . The dotted, dashed, and solid lines correspond to the $M1$, $E1$, and total $E1 + M1$ QRPA strengths, respectively. (b) The same for ^{238}U .

Δ and clearly experimental data can only be described when applying the energy shift. The same holds when comparing our predictions with the ^{232}Th and ^{238}U strengths deduced from the Oslo method [44], as illustrated in Fig. 9. However, in this case, the measured data also significantly depends on the dominant $E1$ component which for consistency has been estimated within the same D1M+QRPA approach [6]. Note however that the $E1$ strength in the deexcitation process might be affected by temperature effects and consequently be higher than predicted in the present zero-temperature QRPA case.

Important information on the $M1$ strength is also hidden in the total radiative width $\langle \Gamma_\gamma \rangle$ defined as

$$\langle \Gamma_\gamma \rangle = \frac{D_0}{2\pi} \sum_{X,L,J,\pi} \int_0^{S_n+E_n} T_{XL}(\epsilon_\gamma) \quad (9)$$

$$\times \rho(S_n + E_n - \epsilon_\gamma, J, \pi) d\epsilon_\gamma, \quad (10)$$

where the summation includes all multiplicities (X, L) between all spins J and parities π in the electromagnetic cascade starting at the neutron energy E_n above the neutron separation energy S_n . In Eq. (10), D_0 is the s -wave neutron spacing at S_n and ρ the nuclear level density. Since the total radiative width is sensitive to all multiplicities and to nuclear level densities, it remains also affected by the $M1$ strength below the neutron separation energy. In deformed nuclei, the $M1$ scissors mode may contribute significantly, as already pointed out, e.g., in Ref. [45]. We show in Fig. 10 the total radiative width obtained within the D1M+QRPA approach, including both the $E1$ and $M1$ contributions, together with the experimental compilation [3]. The error bars on the D1M+QRPA predictions are obtained by considering different nuclear level density prescriptions [23,46,47]. While lower $\langle \Gamma_\gamma \rangle$ values are usually predicted for $A \lesssim 160$ nuclei, larger estimates are obtained above. However, globally, the total radiative widths are satisfactorily described despite the large uncertainties stemming from the level densities. The radiative width obtained by omitting totally the contribution of the $M1$

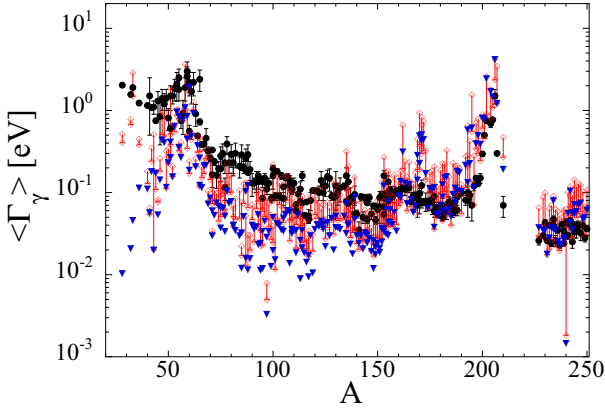


FIG. 10. Comparison between experimental (black dots) [3] and D1M+QRPA estimate of the $\langle \Gamma_\gamma \rangle$ value (open red diamonds) including both the $E1$ and $M1$ contributions. The theoretical uncertainties stem from the use of different nuclear level density prescriptions [23,46,47]. The blue triangles correspond to the predicted $\langle \Gamma_\gamma \rangle$ when omitting the $M1$ mode totally.

mode is also illustrated in Fig. 10 using the combinatorial level density model of Ref. [46]. This calculation illustrates the significant contribution of the $M1$ strength in the $A < 160$ region.

V. EXTRAPOLATION TO NEUTRON-RICH NUCLEI

The $M1$ strength function for the Ni and Sn isotopic chains are shown in Fig. 11. For the spherical Ni and $^{120-144}\text{Sn}$ isotopes, the strength is essentially characterized by two main peaks, one located around 5 MeV and the upper one between 8 and 11 MeV depending on the neutron richness. Such a double peak structure has been confirmed experimentally in the spherical stable ^{58}Ni isotope [40]. Only the doubly magic ^{132}Sn strength is single peaked. A secondary low-energy peak also starts to emerge around 2–3 MeV for the spherical $^{80-84}\text{Ni}$ and $^{136-144}\text{Sn}$ neutron-rich nuclei; such a low-energy strength is not present in spherical nuclei close to the valley of β stability. For the deformed $^{148-160}\text{Sn}$ isotopes, an important strength from the scissors mode is found to be located systematically around 2.5–3 MeV, regardless of the neutron richness. In this case, the strength is essentially distributed between 2.5 and 10 MeV with a four peak structure.

VI. IMPACT ON THE RADIATIVE NEUTRON CAPTURE CROSS SECTION

The Maxwellian-averaged neutron capture cross section (MACS) has been systematically estimated, on the basis of the TALYS code [48–50], for the 1400 nuclei for which the $M1$ and $E1$ strengths have been evaluated within the present D1M+QRPA approach. The absolute $M1$ contribution to the MACS has been obtained by comparing with a similar calculation where the $M1$ component has been totally neglected. The impact of the $M1$ strength is illustrated in Fig. 12. In many nuclei, especially deformed ones where the low-energy scissors mode is present, the $M1$ contribution is found to amount to 20% or more. In light $Z \simeq N \lesssim 18$ nuclei,

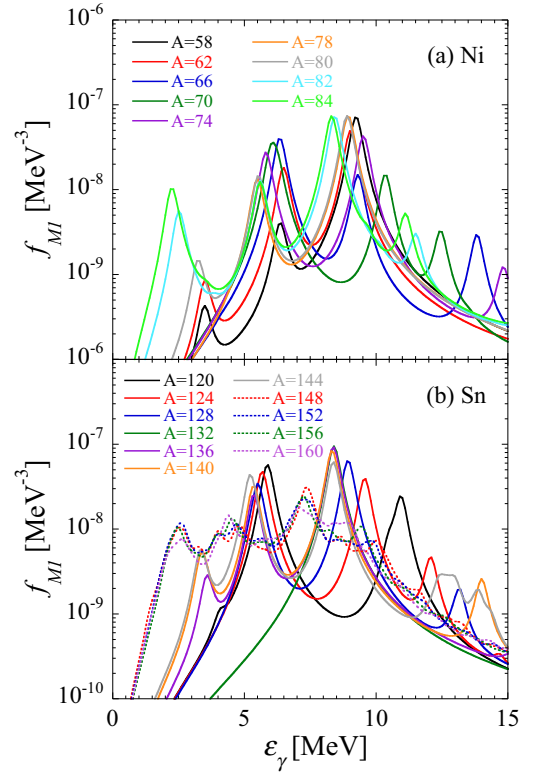


FIG. 11. (a) D1M+QRPA $M1$ strength function in the Ni isotopic chain. (b) The same for the Sn isotopic chain. Spherical nuclei are shown with solid lines and deformed ones with dotted lines.

as well as neutron-rich isotopes of Cr, Mn, or Fe, the $M1$ deexcitation mode is even found to strongly dominate with a contribution larger than 50%. In actinides, it contributes to some 20–30% of the MACS.

So far, most of the radiative capture cross sections have been calculated assuming the $M1$ giant resonance strength is described by a SLO function as the one given in Eq. (7) [3,27].

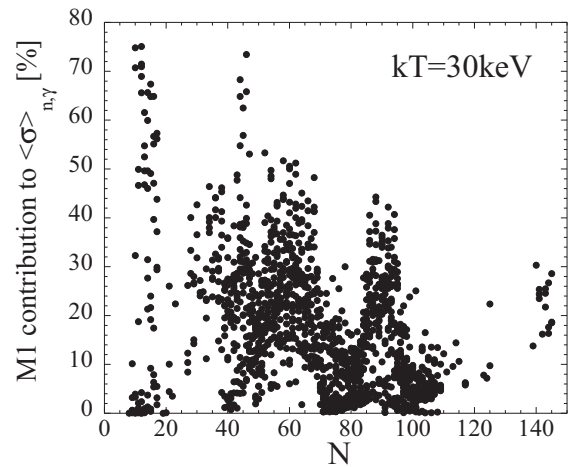


FIG. 12. Contribution (in %) of the D1M+QRPA $M1$ strength function to the total MACS for 1400 nuclei at the energy of $kT = 30\text{ keV}$.

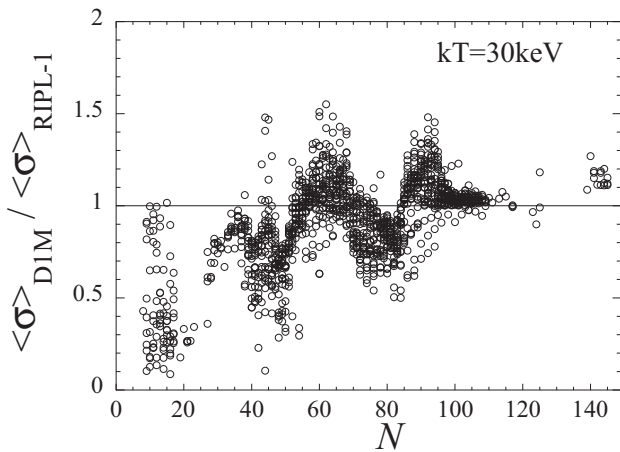


FIG. 13. Ratio of the MACS obtained with the D1M+QRPA $M1$ strength to the one obtained with the RIPL-1 recommendation [Eq. (7)] [27] for the 1400 nuclei at the energy of $kT = 30$ keV.

Such an approximation does not take into account the presence of the scissors mode at low energies in deformed nuclei and remains very schematic concerning the spreading of the strength around the centroid value. The pattern obtained within D1M+QRPA is significantly more complex, as shown in Fig. 11 and may consequently impact the radiative capture cross section. To illustrate such an impact, we show in Fig. 13 the ratio of the 30 keV MACS obtained with the D1M+QRPA $M1$ strength to the one obtained with the RIPL-1 recommendation [Eq. (7)] [27] for the same 1400 nuclei. For light nuclei as well as spherical nuclei in the vicinity of the neutron magic numbers, D1M+QRPA strength gives a lower cross section up to a factor of about 10; this is partially due to the wide broadening of the prescription in Eq. (7) with a width $\Gamma = 4$ MeV to be compared to the adopted value of $\Gamma = 0.5$ MeV which concentrates more strength around the centroid energy for spherical cases. For open shell nuclei a MACS larger by about 50% can be obtained. For actinides, the $M1$ contribution is also found to affect the MACS by about 10–30% through the low-energy scissors mode absent from the SLO description [27].

VII. CONCLUSIONS

Our large-scale calculations of the $E1$ γ -ray strength function in the framework of the axially-symmetric-deformed QRPA based on the finite-range D1M Gogny force has been

extended to the $M1$ mode. This approach is applied to some 412 even-even nuclei, the strength function for odd nuclei being deduced by interpolation. To take into account for missing strength as well as effects beyond the 2-qp excitations, it has been necessary to include an energy shift ranging between 0.5 and 2 MeV as well as an increase of the global strength by a factor of 2. Provided such corrections are applied, our D1M+QRPA $M1$ strength appears to describe relatively well available experimental data. These include measured strengths in the spin-flip giant resonance region as well as integrated strengths at low energies. In particular, it is shown that the D1M+QRPA strength embodied in the scissors mode for deformed nuclei increases quadratically with deformation, is located around 3 MeV and rather well describes experimental data. The total radiative width is also found to be better described when calculated within the QRPA approach, essentially due to a proper description of the low-energy strength stemming from the scissors mode.

The D1M+QRPA $M1$ strength has also been estimated for neutron-rich nuclei far away from the valley of β stability. It is found that the scissors mode in deformed nuclei remains rather unaffected by the neutron richness, in contrast to the spin-flip resonance centroid energy. Some extra low-lying strength is also found to appear in exotic neutron-rich spherical nuclei. The $M1$ contribution to the radiative neutron capture cross section in the keV region can be significant, especially in light and deformed nuclei, but when compared with standard Lorentzian-type prescriptions, the QRPA predictions only affects the radiative neutron capture cross section within roughly 50%. The present QRPA prediction provides an alternative accurate and reliable way to estimate the $M1$ contribution for a large set of nuclei with respect to the phenomenological and approximate Lorentzian-type description of the spin-flip giant resonance mode [3].

ACKNOWLEDGMENTS

We gratefully thank A. Richter for valuable comments, J. Kopecky for providing us with updated ARC data, and T. Kawano and R. Capote for stimulating discussions. We acknowledge PRACE for awarding us access to resource CURIE based in FRANCE at TGCC-CEA. S.G. acknowledges the support of the FRS-FNRS (Belgium) and MM of the “Espace de Structure et de réactions Nucléaire Théorique” at CEA (France). This work was performed within the IAEA CRP on “Updating the Photonuclear data Library and generating a Reference Database for Photon Strength Functions” (F410 32).

-
- [1] M. Arnould, S. Goriely, and K. Takahashi, *Phys. Rep.* **450**, 97 (2007).
 - [2] Y. Xu, S. Goriely, A. J. Koning, and S. Hilaire, *Phys. Rev. C* **90**, 024604 (2014).
 - [3] R. Capote *et al.*, *Nucl. Data Sheets* **110**, 3107 (2009).
 - [4] S. Goriely and E. Khan, *Nucl. Phys. A* **706**, 217 (2002).
 - [5] S. Goriely, E. Khan, and M. Samyn, *Nucl. Phys. A* **739**, 331 (2004).
 - [6] M. Martini, S. Péru, S. Hilaire, S. Goriely, and F. Lechaftois, *Phys. Rev. C* **94**, 014304 (2016).
 - [7] D. Bohle, A. Richter, W. Steffen, A. E. L. Dieperink, N. Lo Iudice, F. Palumbo, and O. Scholten, *Phys. Lett. B* **137**, 27 (1984).
 - [8] K. Heyde, P. von Neumann-Cosel, and A. Richter, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 2365 (2010).
 - [9] M. Martini, S. Péru, and S. Goriely, *Phys. Rev. C* **89**, 044306 (2014).

- [10] S. Goriely, S. Hilaire, M. Girod, and S. Péru, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 242501 (2009).
- [11] D. Zawischa, M. Macfarlane, and J. Speth, *Phys. Rev. C* **42**, 1461 (1990).
- [12] D. Zawischa and J. Speth, *Phys. Lett. B* **252**, 4 (1990).
- [13] P. Sarriguren, E. Moya de Guerra, R. Nojarov, and A. Faessler, *J. Phys. G* **19**, 291 (1993).
- [14] R. R. Hilton, W. Hönenberger, and P. Ring, *Eur. Phys. J. A* **1**, 257 (1998).
- [15] S. Péru and H. Goutte, *Phys. Rev. C* **77**, 044313 (2008).
- [16] S. Péru and M. Martini, *Eur. Phys. J. A* **50**, 88 (2014).
- [17] I. Deloncle, S. Péru, and M. Martini, *Eur. Phys. J. A* (to be published).
- [18] P. Ring and P. Schuck, *The Nuclear Many-Body Problem* (Springer, New York, 1980).
- [19] I. S. Towner and F. C. Khanna, *Nucl. Phys. A* **399**, 334 (1983).
- [20] G. Rusev, N. Tsoneva, F. Donau, S. Frauendorf, R. Schwengner *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 022503 (2013).
- [21] S. P. Kamerdzhiev and V. N. Tkachev, *Phys. Lett. B* **142**, 225 (1984).
- [22] S. Nakayama, T. Yamagata, H. Akimune, Y. Arimoto, H. Daito *et al.*, *Phys. Rev. C* **72**, 041001 (2005).
- [23] S. Hilaire, M. Girod, S. Goriely, and A. J. Koning, *Phys. Rev. C* **86**, 064317 (2012).
- [24] J. Kopecky (private communication).
- [25] J. Kopecky and R. E. Chrien, *Nucl. Phys. A* **468**, 285 (1987).
- [26] J. Kopecky and M. Uhl, *Phys. Rev. C* **41**, 1941 (1990).
- [27] *Handbook for Calculations of Nuclear Reaction Data*, Reference Input Parameter Library, IAEA-Tecdoc-1034 (International Atomic Energy Agency, Vienna, 1998).
- [28] R. Massarczyk, G. Rusev, R. Schwengner, F. Döna, C. Bhatia, M. E. Gooden, J. H. Kelley, A. P. Tonchev, and W. Tornow, *Phys. Rev. C* **90**, 054310 (2014).
- [29] R. M. Laszewski, R. Alarcon, and S. D. Hoblit, *Phys. Rev. Lett.* **59**, 431 (1987).
- [30] R. M. Laszewski, P. Rullhusen, S. D. Hoblit, and S. F. LeBrun, *Phys. Rev. C* **34**, 2013(R) (1986).
- [31] R. M. Laszewski, R. Alarcon, D. S. Dale, and S. D. Hoblit, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 1710 (1988).
- [32] R. Alarcon, R. M. Laszewski, and D. S. Dale, *Phys. Rev. C* **40**, R1097 (1989).
- [33] A. Richter, A. Weiss, O. Häusser, and B. A. Brown, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 2519 (1990).
- [34] D. Frekers *et al.*, *Phys. Lett. B* **244**, 178 (1990).
- [35] N. Pietralla, P. von Brentano, R.-D. Herzberg, U. Kneissl, J. Margraf, H. Maser, H. H. Pitz, and A. Zilges, *Phys. Rev. C* **52**, R2317 (1995).
- [36] C. Lüttge, P. von Neumann-Cosel, F. Neumeyer, C. Rangacharyulu, A. Richter, G. Schrieder, E. Spamer, D. I. Sober, S. K. Matthews, and B. A. Brown, *Phys. Rev. C* **53**, 127 (1996).
- [37] C. Fransen, B. Krischok, O. Beck, J. Besserer, P. von Brentano, T. Eckert, R.-D. Herzberg *et al.*, *Phys. Rev. C* **59**, 2264 (1999).
- [38] A. Linnemann, P. von Brentano, J. Eberth, J. Enders, A. Fitzler, C. Fransen *et al.*, *Phys. Lett. B* **554**, 15 (2003).
- [39] A. S. Adekola, C. T. Angell, S. L. Hammond, A. Hill, C. R. Howell, H. J. Karwowski, J. H. Kelley, and E. Kwan, *Phys. Rev. C* **83**, 034615 (2011).
- [40] W. Mettner, A. Richter, W. Stock, B. C. Metsch, and A. G. M. Van Hees, *Nucl. Phys. A* **473**, 160 (1987).
- [41] N. Pietralla, P. von Brentano, R.-D. Herzberg, U. Kneissl, N. Lo Iudice, H. Maser, H. H. Pitz, and A. Zilges, *Phys. Rev. C* **58**, 184 (1998).
- [42] R. Köhler, J. A. Wartena, H. Weigmann, L. Mewissen, F. Poortmans, J. P. Theobald, and S. Raman, *Phys. Rev. C* **35**, 1646 (1987).
- [43] J. Birkhan, H. Matsubara, P. von Neumann-Cosel, N. Pietralla, V. Yu. Ponomarev, A. Richter, A. Tamii, and J. Wambach, *Phys. Rev. C* **93**, 041302(R) (2016).
- [44] M. Guttormsen, L. A. Bernstein, A. Gorgen, B. Jurado, S. Siem *et al.*, *Phys. Rev. C* **89**, 014302 (2014).
- [45] J. L. Ullmann, T. Kawano, T. A. Bredeweg, A. Couture, R. C. Haight, M. Jandel *et al.*, *Phys. Rev. C* **89**, 034603 (2014).
- [46] S. Goriely, S. Hilaire, and A. J. Koning, *Phys. Rev. C* **78**, 064307 (2008).
- [47] A. J. Koning, S. Hilaire, and S. Goriely, *Nucl. Phys. A* **810**, 13 (2008).
- [48] S. Goriely, S. Hilaire, and A. J. Koning, *Astron. Astrophys.* **487**, 767 (2008).
- [49] A. J. Koning, S. Hilaire, and M. C. Duijvestijn, in *Nuclear Data for Science and Technology*, edited by O. Bersillon *et al.* (EDP Sciences, Les Ulis, France, 2008), p. 211.
- [50] A. J. Koning and D. Rochman, *Nucl. Data Sheets* **113**, 2841 (2012).

3.2 Modification *a posteriori* du champ : cas du terme coulombien

Une autre implémentation numérique a été réalisée dans le code ISAAC. Celle-ci n'a aucun lien avec les opérateurs de transitions multipolaires mais traite le cœur de l'interaction nucléaire. En effet, il a été constaté que le terme coulombien était programmé avec un facteur $\sqrt{\pi}$ non justifié.

Profitant de l'indépendance des termes de l'interaction pour le remplissage de la matrice QRPA, j'ai mis au point une méthode astucieuse de correction des matrices déjà remplies. Tout d'abord, il suffisait de traiter la partie recensant l'interaction des quasiparticules de type proton, seuls éléments subissant l'interaction coulombienne, c'est à dire le bloc $\pi\pi$ dans l'équation suivante³

$$A = \begin{pmatrix} \pi\pi & \pi\nu \\ \nu\pi & \nu\nu \end{pmatrix}. \quad (3.44)$$

Une fois ce bloc protons/protons extrait, une routine a été mise au point. Celle-ci ajoute aux éléments de matrice la valeur $(1 - \sqrt{\pi})V_{coul}$. Cette façon de procéder a permis, avec un surcoût raisonnable, de corriger l'ensemble des matrices déjà calculées, comme ce fut le cas pour les centaines de noyaux traités dans les études ayant mené aux publications [MPG⁺16, GHP⁺16], en évitant de tout recalculer. Cette procédure peut être généralisée pour ajouter ou modifier un terme quelconque de l'interaction, si besoin.

3. L'équation proposées met en jeu la sous-matrice A de la matrice QRPA, il va de soi que B doit être traitée de la même manière.

Chapitre 4

Code QRPA triaxial TAQOS

Dans ce chapitre, je présenterai le développement ainsi que la première utilisation du code TAQOS (TriAxial QRPA On Supercomputers) que j'ai développé durant ma thèse.

4.1 Développement d'un code de calcul QRPA 3D

Comme il a été montré dans la partie 2.4, la QRPA permet d'améliorer la qualité de certains des paramètres d'entrée utilisés dans le 5DCH. Cependant, l'étude présentée dans cette partie, basée sur un code 2D, ne permettait pas de briser la symétrie axiale et donc d'effectuer des calculs en déformation triaxiale. En outre, certains noyaux, comme le ^{64}Ge ou le ^{136}Nd , possèdent un état fondamental déformé de façon triaxiale, à $(\beta = 0.28, \gamma = 26^\circ)$ et $(\beta = 0.2, \gamma = 23^\circ)$ respectivement [phy]. Un code triaxial permettrait donc d'une part, d'obtenir des cartes complètes de paramètres de masse dans tout le plan triaxial et d'autre part, d'accéder à la spectroscopie et aux probabilités de transitions (et donc aux sections efficaces) de tels noyaux.

4.1.1 Formalisme triaxial

4.1.1.1 HFB en symétrie triaxiale

Dans la partie 1.4.3.2, il a été rappelé que la base de l'OH triaxial était formé d'un produit de trois oscillateurs 1D (à base de polynômes de Hermite) indépendants, correspondant aux trois axes du noyau. Bien qu'indépendants, ces trois axes ne sont pas tout à fait identiques quant à leur utilisation.

En effet, à cause de l'effet du renversement du sens du temps sur les états propres de l'oscillateur¹, on recourt à une partie imaginaire dans la description d'une des dimensions. Cette différence de comportement entre les axes impose l'utilisation de deux formules différentes pour l'action de x, y et z sur un état quantique donné :

— d'une part pour x et z

$$x|n_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\alpha_x}} [\sqrt{n_x}|n_x - 1\rangle + \sqrt{n_x + 1}|n_x + 1\rangle] \quad (4.1)$$

$$z|n_z\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\alpha_z}} [\sqrt{n_z}|n_z - 1\rangle + \sqrt{n_z + 1}|n_z + 1\rangle] \quad (4.2)$$

— d'autre part pour y

$$y|n_y\rangle = \frac{i}{\sqrt{2\alpha_y}} [\sqrt{n_y}|n_y - 1\rangle - \sqrt{n_y + 1}|n_y + 1\rangle] . \quad (4.3)$$

Cela a pour conséquence que les formules utilisées pour les moments multipolaires $\hat{Q}_{\lambda\mu}$ sont modifiées. Par exemple,

$$\hat{Q}_{20} = 2z^2 - x^2 - y^2 \quad (4.4)$$

1. Si K est l'opérateur de renversement du sens du temps défini tel que $K|\alpha\rangle = |\bar{\alpha}\rangle$, alors on a $K|\bar{\alpha}\rangle = -|\alpha\rangle$.

fait maintenant intervenir :

$$x^2|n_x\rangle = \frac{1}{2\alpha_x} \left[(2n_x + 1)|n_x\rangle + \sqrt{n_x(n_x - 1)}|n_x - 2\rangle + \sqrt{(n_x + 1)(n_x + 2)}|n_x + 2\rangle \right], \quad (4.5)$$

$$y^2|n_y\rangle = \frac{1}{2\alpha_y} \left[(2n_y + 1)|n_y\rangle - \sqrt{n_y(n_y - 1)}|n_y - 2\rangle - \sqrt{(n_y + 1)(n_y + 2)}|n_y + 2\rangle \right], \quad (4.6)$$

$$z^2|n_z\rangle = \frac{1}{2\alpha_z} \left[(2n_z + 1)|n_z\rangle + \sqrt{n_z(n_z - 1)}|n_z - 2\rangle + \sqrt{(n_z + 1)(n_z + 2)}|n_z + 2\rangle \right]. \quad (4.7)$$

Dans la base de l'OH 1D, les états $|n_z\rangle$ sont proportionnels à des polynômes de Hermite $H_{n_z}(z\sqrt{\alpha_z})$, avec α_z paramètre de l'OH 1D

$$\sqrt[4]{\frac{\alpha_z}{\pi}} e^{-\frac{1}{2}\alpha_z z^2} \sqrt{\frac{1}{2^{n_z} n_z!}} H_{n_z}(z\sqrt{\alpha_z}). \quad (4.8)$$

Dans le cas de l'OH 3D, on définit $R_y(\pi)$ comme une symétrie de rotation d'angle π autour de l'axe y et K comme l'opérateur de renversement du sens du temps. On brise l'équivalence des 3 axes en imposant de vérifier la relation suivante :

$$R_y(\pi)K|\frac{1}{2}\sigma\rangle = |\frac{1}{2}\sigma\rangle. \quad (4.9)$$

Les axes x et z peuvent ainsi se décomposer sur une base de polynômes de Hermite comme vu à l'équation (4.8) alors que l'axe y répond à la formule :

$$(i)^{n_y} \sqrt[4]{\frac{\alpha_y}{\pi}} e^{-\frac{1}{2}\alpha_y y^2} \sqrt{\frac{1}{2^{n_y} n_y!}} H_{n_y}(y\sqrt{\alpha_y}). \quad (4.10)$$

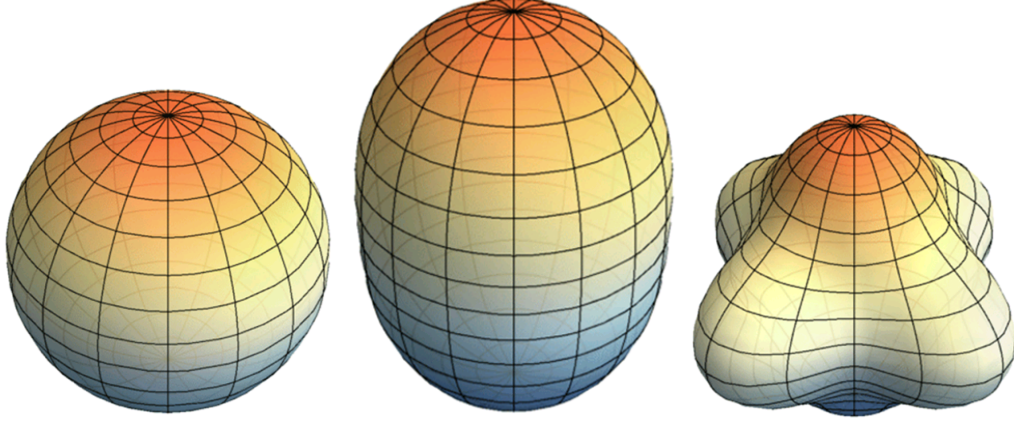


FIGURE 4-1 – Illustration schématique de noyaux dans une forme sphérique, axiale (prolate), et triaxiale.

Cela permet d'exprimer un état quantique $|n_x n_y n_z\rangle$ de la façon suivante :

$$\begin{aligned}
 \langle x y z | n_x n_y n_z \rangle = & \left[\sqrt[4]{\frac{\alpha_x}{\pi}} e^{-\frac{1}{2}\alpha_x x^2} \sqrt{\frac{1}{2^{n_x} n_x!}} H_{n_x}(x\sqrt{\alpha_x}) \right] \\
 & \times \left[(i)^{n_y} \sqrt[4]{\frac{\alpha_y}{\pi}} e^{-\frac{1}{2}\alpha_y y^2} \sqrt{\frac{1}{2^{n_y} n_y!}} H_{n_y}(y\sqrt{\alpha_y}) \right] \\
 & \times \left[\sqrt[4]{\frac{\alpha_z}{\pi}} e^{-\frac{1}{2}\alpha_z z^2} \sqrt{\frac{1}{2^{n_z} n_z!}} H_{n_z}(z\sqrt{\alpha_z}) \right]. \quad (4.11)
 \end{aligned}$$

Le fait d'autoriser le calcul HFB à nous fournir des solutions selon les trois axes permet la description de noyaux triaxiaux, qu'ils soient dans leur état fondamental (minimum d'un calcul HFB triaxial), ou bien qu'on les y contraigne, par un calcul HFB avec contrainte. La figure 4-1 illustre différentes déformations accessibles.

Pour effectuer l'étape HFB, nous avons à notre disposition le code THEOPHIL [GG83]. Nous avons également la possibilité de travailler avec le code HFB3, code HFB de nouvelle génération actuellement développé en interne.

4.1.1.2 QRPA en symétrie triaxiale

La différence majeure de la prise en compte de la triaxialité en QRPA réside dans l'obligation de traiter la totalité de la matrice et interdit *a priori* le découpage

en blocs de spins pratiqué avec le code axial, comme le montre la figure 4-2. Lorsque la matrice QRPA (en fait les matrices A et B qui constituent la matrice QRPA) sont formées de blocs de spins, il est possible d'effectuer plusieurs calculs séparés² afin de réduire la charge calculatoire. On voit sur la figure 4-2 que la matrice A est principalement diagonale (à cause de la présence de l'énergie de paire de quasiparticules sur cette diagonale, dans l'expression de A , voir l'équation (1.65)). Étant donné les faibles valeurs de A et B , on préfère regarder la représentation de ces éléments de matrices en échelle logarithmique comme montré dans les figures 4-2.(c) et 4-2.(d).

Pour le moment, on conserve la parité, ce qui permet d'effectuer un calcul de parité $\Pi = +$ de façon totalement découplée d'un calcul de parité $\Pi = -$. Toutefois, il suffirait d'autoriser la transformation de Bogoliubov (donc au niveau HFB) de ne pas conserver la parité afin de briser celle-ci et d'accéder à un cas encore plus général³.

La conséquence directe est l'augmentation du nombre d'éléments de matrice à calculer, ce qui accroît le coût numérique d'un calcul triaxial de plusieurs ordres de grandeur par rapport à celui d'un calcul conservant la symétrie axiale. Utiliser au mieux la puissance de la programmation parallèle devient encore plus crucial qu'auparavant.

4.1.2 Considérations sur l'évolution de la programmation

Pour utiliser des codes au coût numérique tel que les codes QRPA, il est indispensable d'utiliser au mieux les supercalculateurs. L'architecture classique est basée sur l'utilisation de processeurs inspirés des processeurs des machines domestiques. Ces processeurs sont reliés en très grand nombre (plusieurs dizaines ou centaines de milliers) au sein d'une grande machine, par le biais d'un réseau d'interconnexion. La figure 4-3 donne un aperçu très imagé de la structure d'une telle

2. Et même de ne traiter qu'un seul cas, par exemple $K^\Pi = 0^+$, qui suffit dans certains cas.

3. Avec, par exemple, l'étude d'un noyau dont le fondamental serait octupolaire.

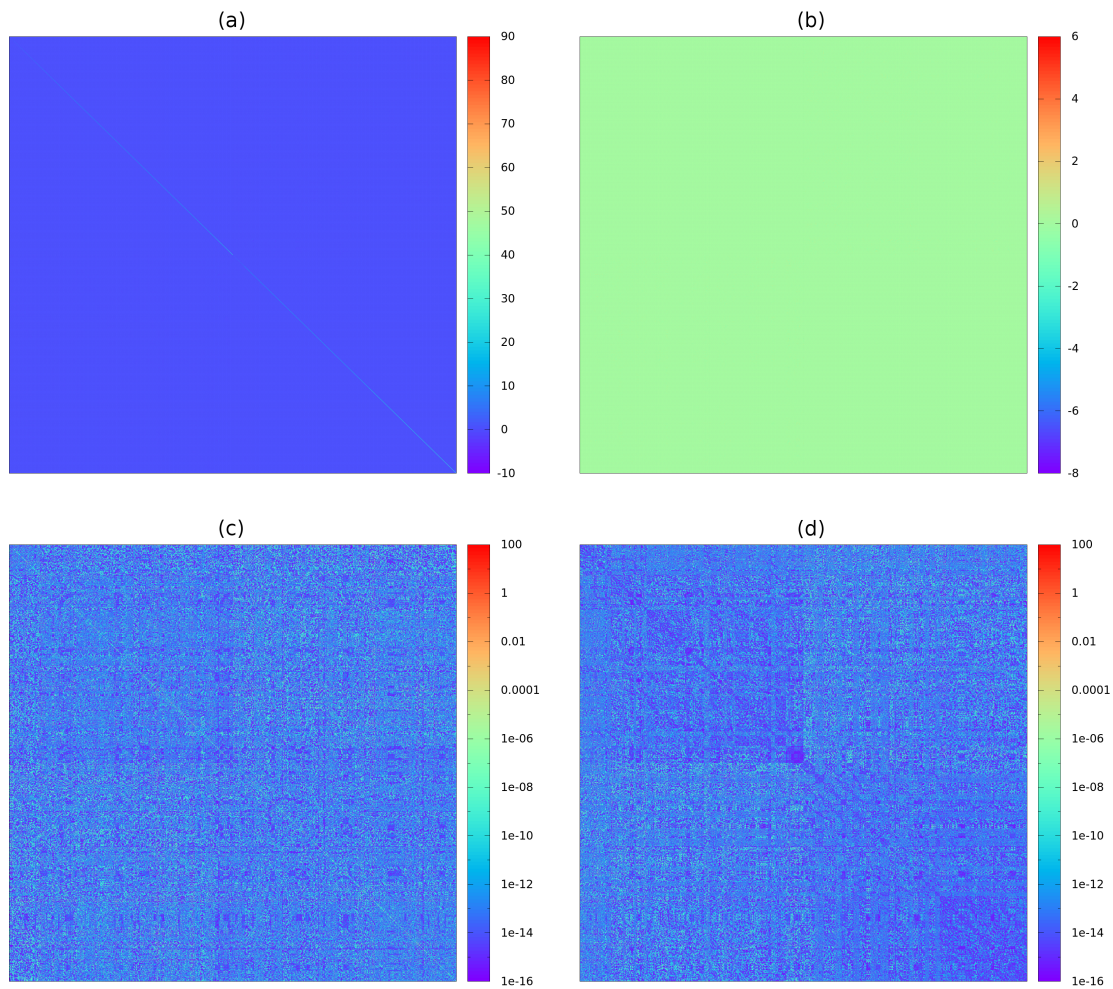


FIGURE 4-2 – Matrices A et B issues d'un calcul triaxial. (a) A et (b) B en échelle linéaire, (c) A et (d) B en échelle logarithmique. Il est très difficile de distinguer la couleur d'un élément de matrice en particulier, puisque les matrices ont quelques milliers de lignes/colonnes, ce qui impliquerait pour tous les voir d'avoir une résolution d'image à l'impression beaucoup plus fine.

machine. Une grande évolution durant les dernières années a consisté en l'accroissement du nombre de cœurs de calcul au sein d'un même processeur. Et alors que les processeurs domestiques restent aujourd'hui cantonnés à 2 ou 4 cœurs par puce, ceux des machines de calcul frôlent la quinzaine. Malgré l'augmentation continue de nos moyens de calculs, certains cas, tels que la QRPA triaxiale, nécessiteraient encore plus de puissance.

Afin d'accroître notre puissance de calcul, plusieurs possibilités s'offrent, en principe, à nous, dont :

- augmenter la puissance individuelle de chaque processeur, par exemple en augmentant la fréquence d'horloge,
- augmenter le nombre de ces processeurs,
- changer d'architecture.

Malheureusement, plusieurs problèmes se présentent. D'une part, avec les technologies actuelles, il n'est pas concevable de créer des processeurs ayant une fréquence d'horloge plus importante. Cette considération est principalement due à des limitations du silicium formant les puces. Les architectures actuelles plafonnent aux alentours de 4GHz.

A l'heure actuelle, les supercalculateurs à notre disposition atteignent une puissance crête de l'ordre du pétaflop (1 million de milliards d'opérations chaque seconde). Dans la route vers la classe exaflopique (1 milliard de milliards d'opération chaque seconde), il a été estimé qu'une machine d'architecture traditionnelle nécessiterait plusieurs centaines de mégawatts de puissance électrique pour fonctionner. Augmenter le nombre de puces rendrait les calculateurs tellement imposants et énergivores, que la consommation annuelle en électricité deviendrait insoutenable, dépassant le prix d'achat de la machine. Cette consommation aurait également un impact écologique important, à l'heure où de nombreuses industries tentent de devenir de plus en plus respectueuses de l'environnement. De plus, augmenter le nombre de processeurs rendrait la communication entre puces de plus en plus prépondérantes, ce qui grèverait les performances.

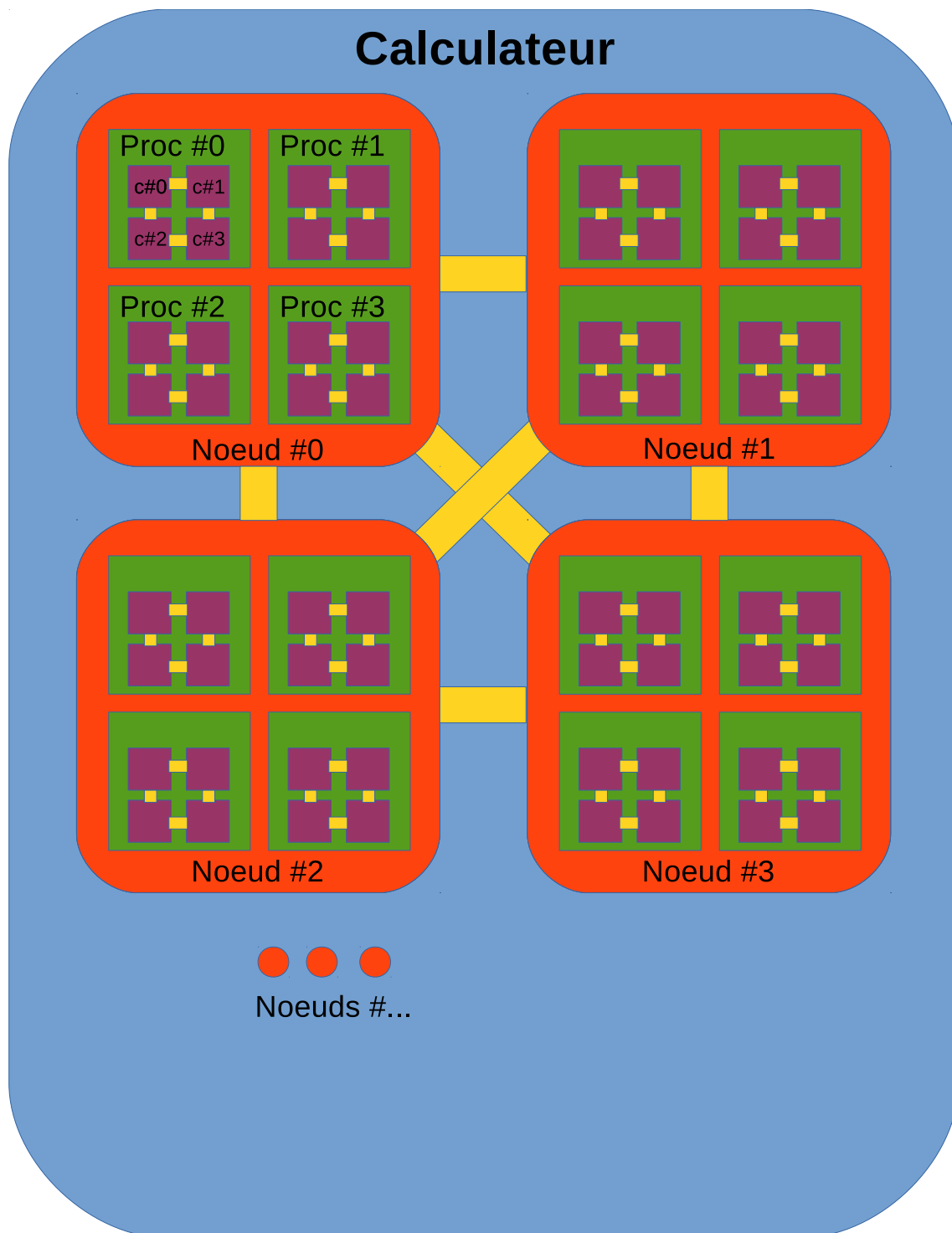


FIGURE 4-3 – Illustration de l'organisation structurelle d'un supercalculateur actuel.

Il semble donc judicieux de se tourner vers une autre architecture. C'est ce qui a été entrepris depuis plusieurs années avec l'incorporation de GPGPU (General Purpose Graphics Processing Units) dans les machines. Ces nouvelles puces sont inspirées des cartes graphiques utilisées dans les stations de bureau et tirent partie du fait qu'une puce contient beaucoup de cœurs de calcul, même s'ils sont moins performants individuellement qu'un processeur traditionnel. Ce changement a permis d'augmenter considérablement les performances des codes qui ont été portés. Toutefois, le contre-coup est que cette nouvelle architecture oblige à changer également de façon profonde la programmation, et même l'organisation des codes (CUDA, OpenCL, ...).

Une nouvelle solution développée par Intel, sorte d'hybride entre les GPGPU et les CPU classiques a récemment été mise sur le marché : les MIC ou Many Integrated Core. Cette puce est en réalité plus proche des CPU grâce au fait qu'elle reste sur une architecture x86-64, ce qui permet d'utiliser les mêmes langages de programmation qu'auparavant. Elle possède un nombre de cœurs par processeur beaucoup plus important qu'un processeur traditionnel, même si individuellement moins puissants, se rapprochant de l'esprit des GPGPU. La dernière version en date produite par Intel est la série Knights Landing (KNL). Le tableau 4.1 permet une comparaison entre des processeurs de bureau de dernière génération de moyenne et haut de gamme et d'un KNL d'Intel.

Dans une machine de bureau, même si le concept de nœud peut sembler étrange, il n'y a en tout cas qu'un seul emplacement pour processeur (socket), en général. On remarque que pour des processeurs pourtant sortis à moins d'un an d'écart, les différences entre le milieu de gamme et le haut de gamme des puces pour ordinateurs personnels est insignifiant comparativement aux différences de conception vis-à-vis des KNL. Ces MIC sont celles qui ont été choisies pour constituer les futures machines. Bien que les processeurs traditionnels aient encore quelques années devant eux dans tous les grands centres de calcul du monde, il est évident que l'écriture d'un nouveau code soit contrainte par l'apparition de ces nouvelles puces. La

Nom commun	Skylake	Skylake	KNL
Référence	i5 6500	i7 6700K	Xeon Phi 7250
Date de sortie	Septembre 2015	Août 2015	Juin 2016
Finesse de gravure	14nm	14nm	14nm
Nombre de transistors	1.75 Milliards	1.75 Milliards	+ de 8 Milliards
Fréquence/Turbo	3.2GHz/3.6GHz	4GHz/4.2GHz	1.4GHz/1.6GHz
Architecture	x86-64	x86-64	x86-64
Jeu d'instructions	SSE 4.1/4.2, AVX2.0	SSE 4.1/4.2, AVX2.0	AVX-512
Socket/noeud	1	1	1
Cœurs/socket	4	4	68
Threads/cœur	1	2	4
Threads/socket	4	8	272
Cache L1	2*32KB/cœur	2*32KB/cœur	2*32KB/cœur
Cache L2	256KB/cœur	256KB/cœur	1MB/2cœurs
Cache L3	6MB	8MB	16GB ⁴
Puissance crête (DP)	100GFlops	250GFlops	3TFlops
Qté RAM max	64GB	64GB	384GB
TDP (Thermal Design Power)	65W	91W	215W
Prix	200\$	350\$	~ 5000\$

TABLE 4.1 – Comparaison des caractéristiques de processeurs Skylake de dernière génération et d'un processeur KNL [ark].

fréquence des processeurs de type KNL est environ égale à la moitié de celle d'un processeur traditionnel, une unité de calcul effectue donc deux fois moins d'opérations qu'un processeur comme les Skylake dans le même temps. Si l'on exécute un code non optimisé sur ces nouvelles architectures, les performances peuvent, dans certains cas, être inférieures à celles obtenues sur les anciennes générations de machines !

4.1.3 Préparation à l'écriture du code

4.1.3.1 Cahier des charges

La programmation d'un outil de calcul tel qu'un code modélisant le noyau atomique par la QRPA est une entreprise qui nécessite de définir une philosophie de développement, une façon de procéder ainsi que de prévoir l'organisation générale du code avant même d'écrire la première ligne. Ces choix ont été consignés, de façon informelle, sous forme d'un cahier des charges devant être respecté par le futur code :

1. indenté,
2. commenté,
3. noms des variables et fonctions clairs,
4. proche des équations, si possible,
5. écrit en C++,
6. Adapté aux prochaines générations de machines (TERA-1000⁵, EXA-1⁶),
7. Utilisant la librairie Armadillo (utilisant la librairie MKL d'Intel),
8. Terme central uniquement, direct et échange, pour le moment.

Les trois premiers points peuvent paraître anecdotiques, mais après avoir eu l'occasion de parcourir les anciens codes développés durant les années 70, où, pour

5. Machine de transition vers les nouvelles architectures.

6. Première machine de classe exaflopique au CEA.

diverses raisons, ces pratiques étaient loin d'être fréquentes, il semblait évident de rendre le code le plus clair possible pour de futurs utilisateurs et développeurs, celui-ci étant sensé perdurer.

Le quatrième point est un choix personnel, discutable, mais il semblait intéressant de s'autoriser, dans certains cas, des entorses à la course aux optimisations. Quand l'optimisation concerne une partie du code dont le temps d'exécution est négligeable vis-à-vis du temps total du calcul, alors on reste proche des formules. Dans le cas d'un portion de code où le coût de calcul est plus important, si l'optimisation ne fait gagner qu'une faible proportion de temps mais rend la lecture et l'éventuelle modification ou ajout extrêmement ardues (avec en plus la possibilité plus importante d'ajouter des erreurs), alors on la rejette. Bien évidemment, dans le cas où un algorithme plus complexe aurait un temps de calcul beaucoup plus court, celui-ci est retenu, peu importe son degré d'abstraction.

Le cinquième point se justifie pour plusieurs raisons. D'une part, c'est un langage très répandu, que l'auteur de ce manuscrit maîtrise et qu'un futur développeur a de grandes chances de connaître également. D'autre part, c'est un langage moderne, orienté objet, donc propice à la décomposition du code en blocs indépendants et évolutifs. Enfin, c'est un code qui s'exécute rapidement.

Les points 6 et 7 sont liés. Le point 6 est une évidence pour la pérennité du code, comme exposé dans la partie 4.1.2. Les raisons d'utilisation de la librairie d'algèbre linéaire Amadillo ainsi que ses caractéristiques seront présentées dans la partie 4.1.4.3.

Finalement, pour le moment, nous nous contenterons de la présence du terme central de l'interaction de Gogny uniquement. Les termes restants (coulomb, spin-orbite, ...) pourront être programmés à l'avenir sur le modèle du terme central, ce qui sera grandement facilité par la modularité permise par le C++.

4.1.3.2 Parallélisme (OpenMP+MPI) & vectorisation

Dans la section 4.1.2, il était fait mention d’une nouvelle façon de programmer, de manière parallèle. Pour être le plus efficace possible et tirer parti au mieux des infrastructures de calcul telles que le KNL, nous devons mettre à profit trois niveaux de programmation

- MPI (Message Passing Interface),
- OpenMP (Open MultiProcessing),
- vectorisation.

Parmi les trois, le MPI est le seul à pouvoir transmettre des données entre processeurs de nœuds différents. La contrepartie est que même au sein d’un nœud, le MPI entraîne un surcoût qui peut être pénalisant. De plus, il nécessite une intervention relativement importante dans le code, avec transmission explicite des données entre les processeurs.

L’OpenMP permet également de faire travailler plusieurs cœurs de calcul, mais uniquement au sein d’un nœud. Dans certains cas, il est possible d’utiliser la puissance d’OpenMP à l’aide de quelques lignes de codes supplémentaires. De plus, ces lignes de commandes, nommées *pragmas*, s’écrivent sous la forme

```
1 #pragma omp XXX
```

qui est considérée comme un commentaire par le compilateur si l’option de prise en compte d’OpenMP n’est pas activée⁷.

Il est ainsi possible de paralléliser très facilement une boucle de grande taille.

```
1 // Declaration du tableau de 100 entiers
2 int a[100];
3
4 #pragma omp parallel for num_threads(4)
5 for (int i = 0; i < 100; ++i){
```

7. Pour le compilateur icc d’Intel, il s’agit de l’option *-qopenmp* et pour le compilateur GNU g++, il s’agit de l’option *-fopenmp*.

```

6 | a [ i ] = i ;
7 | }

```

Ici, le code lancera 4 threads OpenMP qui se répartiront chacun un quart de la boucle. Ils s'exécutent chacun de leur côté et ne s'occupent que de l'affectation des valeurs du tableau `a` qui sont dans leur zone d'activité. Puisque les données sont indépendantes, il n'y a pas de problème d'accès mémoires concurrents. En théorie, ce morceau de code s'exécutera 4 fois plus rapidement que la version séquentielle, ce qui est remarquable vu le peu d'effort investi.

La vectorisation est un principe de programmation qui n'est pas nouveau. Il était à la base de nombreux codes de calcul dès les années 70, à l'époque des calculateurs vectoriels de type Cray. L'arrivée des micro-processeurs que l'on connaît aujourd'hui, durant les années 90, a poussé au retrait des processeurs vectoriels, car leur rapport coût/performance n'était plus suffisamment intéressant. La vectorisation consiste à appliquer une même instruction sur plusieurs données à la fois, ce qui permet d'obtenir plusieurs résultats en même temps, au lieu de devoir les obtenir à la chaîne, comme illustré sur le schéma 4-4.

Grâce au schéma, on comprend facilement que le processeur SIMD illustré, s'il est bien utilisé, peut fournir les données par paquets de trois, et donc entraîner une diminution du temps de calcul d'un facteur trois par rapport au processeur SISD.

La vectorisation revient maintenant sur le devant de la scène car les processeurs KNL possèdent deux unités de calcul vectoriel de 512 bits par cœur. Si l'on utilise un cœur comme celui-ci sans se soucier de vectoriser, et que l'on travaille avec des valeurs en double précision (64 bits) alors on n'utilise qu'un huitième des capacités du processeur ! Il est donc absolument nécessaire de respecter au maximum l'alignement des données en mémoire, ce qui sert à réaliser une vectorisation optimale.

Lors du développement du code TAQOS, ces trois outils ont été pris en considération et utilisés tel qu'expliqué dans la partie 4.1.4.2.

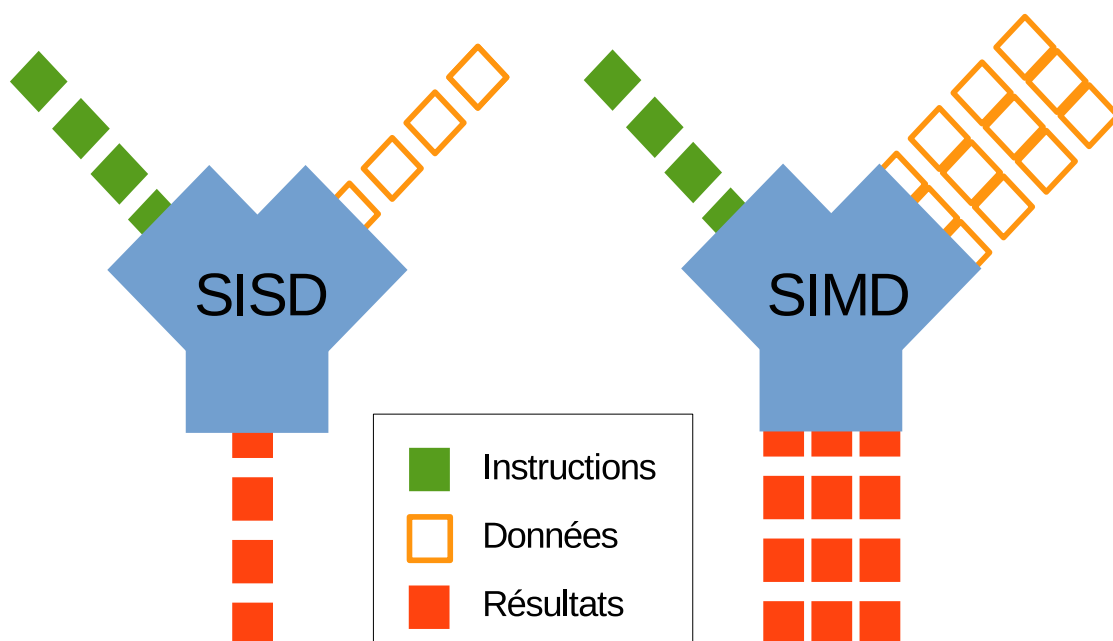


FIGURE 4-4 – Illustration montrant le fonctionnement d’un processeur de type Single Instruction Single Data (SISD) et celui d’un processeur Single Instruction Multiple Data (SIMD).

4.1.4 Programmation du code

4.1.4.1 Récupération des données issues de HFB et création des paires

Comme expliqué auparavant, le calcul QRPA prend comme données d'entrée des grandeurs calculées par un calcul HFB. En l'occurrence, il est nécessaire de récupérer, en plus des conditions de calcul telles que la nature de l'interaction, la taille de la base de l'OH et les paramètres de l'OH, le spectre de quasiparticules, avec leur niveau d'énergie individuelle, leurs vecteurs U et V , ainsi que leur isospin.

Une fois ce spectre rapatrié, on peut lancer l'analyse combinatoire pour former les paires de quasiparticules qui nous servent de base pour les excitations de phonons (cf. équation (1.49)). Une paire est créée si les deux qp sont de même isospin, si la parité de la paire correspond à la parité demandée par l'utilisateur et enfin si la somme de leurs énergies de qp est inférieur à une éventuelle valeur de troncature (*cutoff*).

Une fois la base prête, il faut remplir la matrice QRPA.

4.1.4.2 Calcul du champ central

Comme montré au chapitre 1, l'interaction effective de Gogny utilisée pour décrire l'interaction entre les nucléons est composée de plusieurs termes

$$\begin{aligned}
v_{12} = & \sum_{i=1}^2 e^{-(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2 / \mu_i^2} (W_i + B_i P_\sigma - H_i P_\tau - M_i P_\sigma P_\tau) \\
& + t_3 (1 + x_0 P_\sigma) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \left[\rho \left(\frac{\vec{r}_1 - \vec{r}_2}{2} \right) \right]^\alpha \\
& + i W_{LS} \overleftarrow{\nabla}_{12} \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \times \overrightarrow{\nabla}_{12} \cdot (\vec{\sigma}_1 + \vec{\sigma}_2) \\
& + (1 + 2\tau_{z1})(1 + 2\tau_{z2}) \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}.
\end{aligned} \tag{4.12}$$

Comme précisé précédemment, il a été convenu de programmer, dans un premier temps, le terme central de l'interaction, terme le plus emblématique de par le

fait qu'il possède deux portées finies mais également le plus coûteux en temps de calcul du fait de ces portées non nulles. L'une des portées est attractive, alors que l'autre est répulsive, ce qui vise à reproduire l'attraction des nucléons dans le milieu nucléaire en même temps que le cœur dur. Notre interaction se résumera par conséquent à

$$v_{cent} = \sum_{i=1}^2 e^{-(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2 / \mu_i^2} (W_i + B_i P_\sigma - H_i P_\tau - M_i P_\sigma P_\tau). \quad (4.13)$$

On retrouve dans cet élément les termes de Wigner, Bartlett, Heisenberg et Majorana paramétrisés selon les valeurs données dans le tableau 1.1.

Les termes restants, bien que non négligeables quant à la durée mais aussi l'impact sur le résultat du calcul, pourront être programmés sur le modèle existant.

De surcroît, comme expliqué dans la partie 3.2, les termes de l'interaction sont indépendants les uns des autres, ce qui permet, si on le souhaite, de remplir la matrice QRPA du terme central uniquement et de la stocker. Lorsque les termes suivants seront programmés, il sera alors possible d'extraire cette matrice, d'y ajouter les nouveaux termes, jusqu'à ce qu'elle contienne la totalité de l'interaction. L'avantage de cette façon de procéder est que le temps de calcul sera grandement réduit par rapport à un calcul complet réalisé en une seule fois.

Malgré tout, le remplissage de la matrice QRPA (1.52) avec le terme central de l'interaction de Gogny est une tâche lourde, de (très) loin la plus pénalisante dans le schéma de calcul. Il a donc été décidé de se concentrer sur ce passage pour le paralléliser au maximum. Le principe général retenu est illustré dans la figure 4-5.

Les valeurs de nombre de processus MPI, de threads OpenMP et de taille de vecteurs n'ont qu'une valeur illustrative. Chaque nœud de calcul prend en charge une bande de la matrice QRPA qu'il se charge de calculer. Il découpe ensuite cette bande en bandes plus petites qu'il partage entre ses différents threads. Les données, si elles sont correctement alignées en mémoire, sont vectorisées et donc calculées en grappes. Finalement, un processus MPI se charge de récolter l'ensemble des bandes

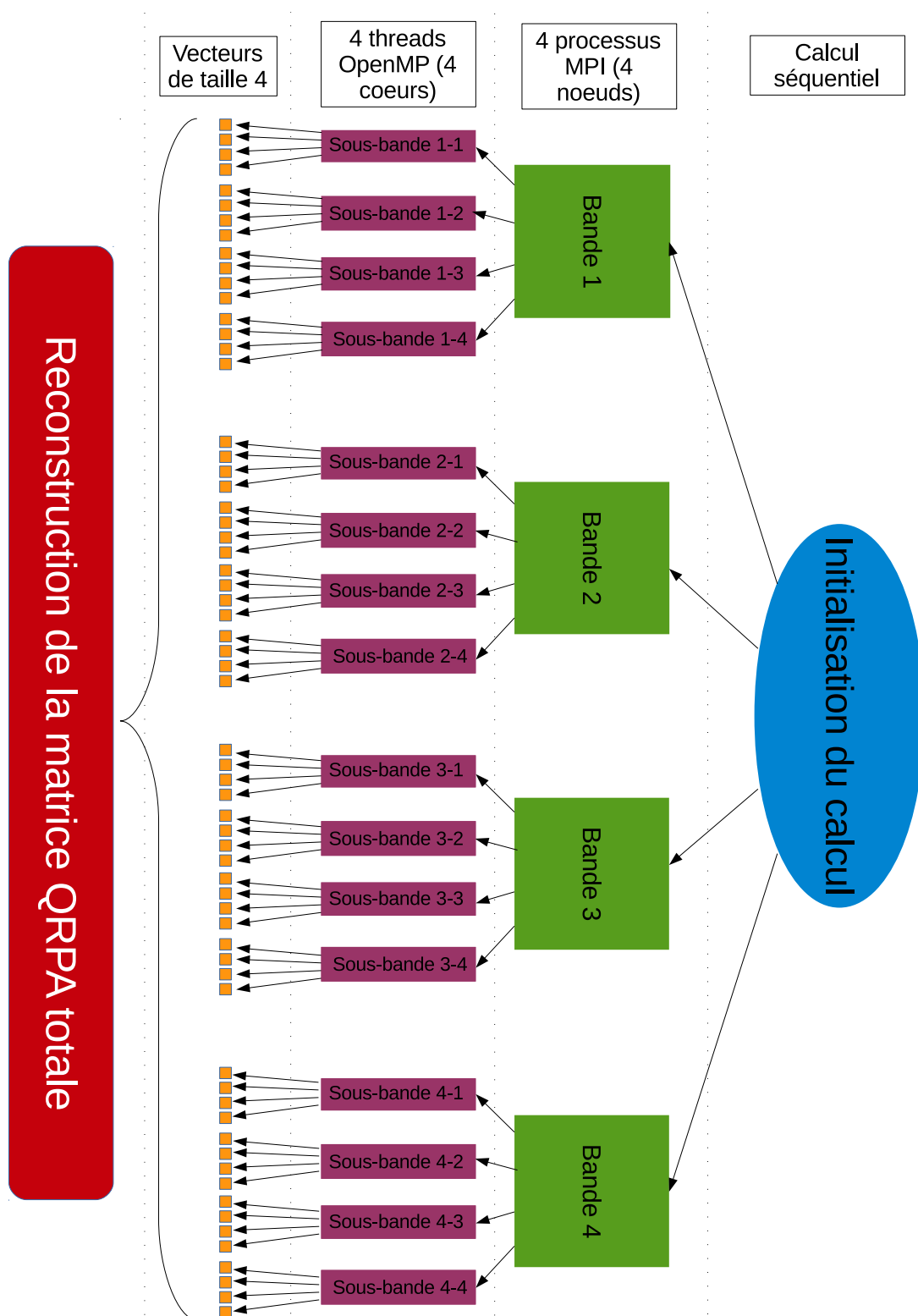


FIGURE 4-5 – Représentation schématique des différents niveaux de parallélisation dans l'algorithme du remplissage de la matrice QRPA.

qu'il regroupe dans la matrice complète. Dans le code TAQOS, j'ai décidé de laisser à l'utilisateur le choix du nombre de threads OpenMP ainsi que du nombre de processus MPI. L'utilisateur choisira les valeurs qui conviennent pour que le code s'exécute de la façon la plus adéquate possible selon la machine considérée et selon le temps de calcul à sa disposition. On passe ensuite à la diagonalisation.

4.1.4.3 Diagonalisation

La partie diagonalisation de la matrice QRPA est simplifiée à l'extrême dans ce code, grâce à l'utilisation de la bibliothèque d'algèbre linéaire ARMADILLO [SC16]. Cette bibliothèque mathématique est développée depuis quelques années en C++. Elle est éditée sous licence MPL (Mozilla Public Licence), ce qui la rend libre d'utilisation, à la fois pour des applications libres, mais aussi propriétaires.

Pour illustrer la facilité d'utilisation d'ARMADILLO, voici la portion de code qui traite de la diagonalisation. Il fait suite au remplissage de la matrice QRPA de taille `2*nbr_2qps` :

```

1 // Initialisation du vecteurs eigval contenant les energies de phonons
2 // ainsi que de la matrice eigvec contenant les amplitudes X et Y
3 arma::vec eigval(2*nbr_2qps, arma::fill::zeros);
4 arma::mat eigvec(2*nbr_2qps, 2*nbr_2qps, arma::fill::zeros);
5
6 // Diagonalisation
7 eig_gen(eigval, eigvec, matM);

```

Et c'est tout !

Finalement, en plus d'être très simple à comprendre et à utiliser, la bibliothèque est très véloce grâce au fait qu'elle soit vectorisée, multithreadée (OpenMP) et qu'elle repose (entre autres) sur la bibliothèque MKL (Math Kernel Library) d'Intel.

4.1.4.4 Opérateurs de transitions en symétrie triaxiale

Une fois la matrice diagonalisée et les vecteurs propres (amplitudes X et Y) ainsi que les valeurs propres (énergies de phonons ω_n) calculés, on peut lancer le calcul des différentes grandeurs/observables qui nous intéressent, et notamment les probabilités de transitions liées aux moments multipolaires. De même que dans la section 3.1.2.2, il est conseillé au lecteur intéressé de se reporter au formulaire de l'annexe C.3 pour la liste des opérateurs jusqu'à l'ordre 8. Les opérateurs sont toujours utilisés sous forme matricielle, avec notamment trois matrices construites comme (3.36), avec cependant une subtilité liée à la partie imaginaire pour y .

Notons enfin qu'il est astucieux (mais non obligatoire) d'utiliser les matrices correspondant à l'action de $x + iy$ et $x - iy$ (et accessoirement $x^2 + y^2$) plutôt que celles correspondant à x et y seuls. Dans ce cas, le calcul est encore un peu plus facilité.

4.1.5 Validation à l'aide du code axial

Le code a été validé en comparant — entre autres choses — les valeurs propres triaxiales ω_n avec celles obtenues par le code axisymétrique dans un cas très simple, à savoir la particule α au point sphérique $\beta = 0$. Évidemment, le concept de champ moyen n'est pas vraiment adapté pour traiter un si petit noyau, mais le but de ce comparatif était purement et simplement de s'assurer que le code était mathématiquement et algorithmiquement conforme aux équations.

Nous avons vérifié que les deux codes HFB, préliminaires aux calculs QRPA, contenaient exactement les mêmes termes de l'interaction de Gogny, et que ceux-ci conduisaient au même résultat. Ainsi, on s'assure que le point de départ des deux calculs QRPA est le même. Une différence sur le résultat final ne peut être imputé qu'à l'étape QRPA. À ce propos, la figure 4-6 montre, grâce à un échantillon des premières énergies de phonons provenant de chacun des deux codes, que ceux-ci s'accordent bien. L'écart entre les valeurs propres est, dans le pire des cas, de l'ordre

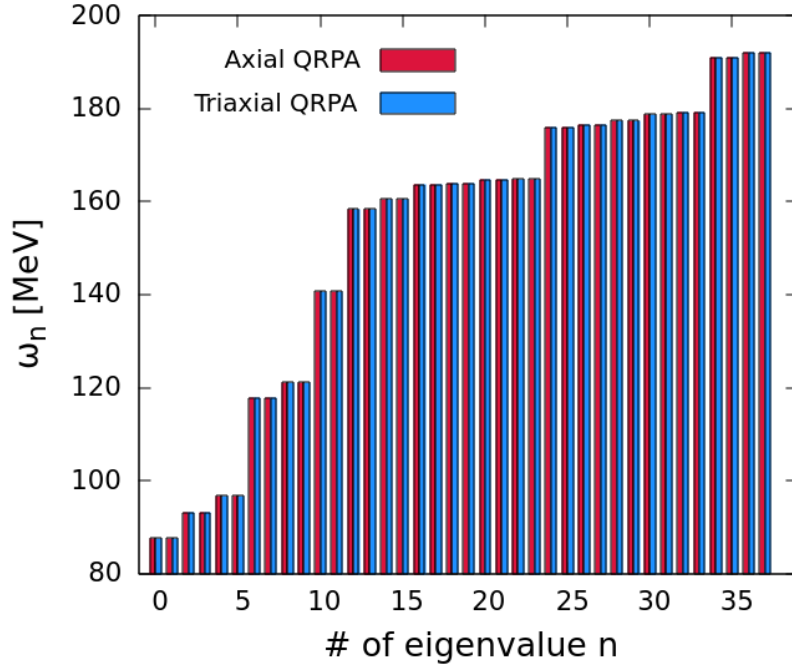


FIGURE 4-6 – Comparaison entre les valeurs propres QRPA obtenues par le code axial ISAAC (à gauche, en rouge) et celles obtenues par le code triaxial (à droite, en bleu).

de 10^{-6} MeV, ce que nous considérons comme suffisant pour la suite. On établit que le code triaxial donne des résultats identiques au code axial, dans la limite de la symétrie axiale. Il est à présent possible d'utiliser le code TAQOS pour des calculs triaxiaux.

4.1.6 Premiers résultats

Nous avons vu dans la partie 2.4.4 que le terme central de l'interaction n'était absolument pas suffisant pour reproduire des paramètres de masse, mais que son importance n'était pas négligeable. Nous décidons alors d'utiliser le code triaxial pour calculer des paramètres de masse du ^{32}Mg en différents points de déformation dans la carte triaxiale :

- $\beta = 0$ (minimum HFB),
- $\beta = 0.1$ and $\gamma = 0$,

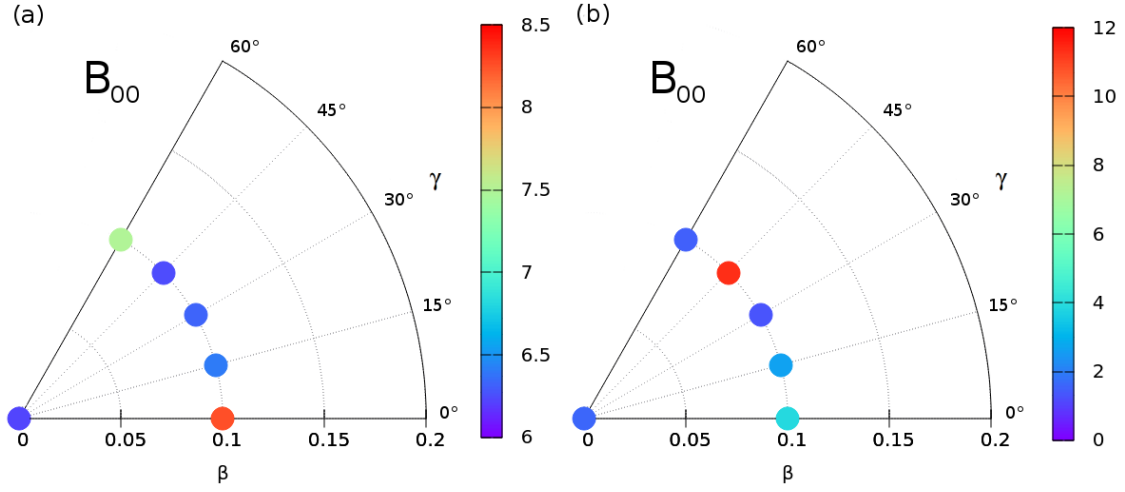


FIGURE 4-7 – Cartes triaxiales du paramètre de masse vibrationnel B_{00} pour le ^{32}Mg à $\beta = 0$, $\beta = 0.1$ et $\gamma = 0^\circ$, $\gamma = 15^\circ$, $\gamma = 30^\circ$, $\gamma = 45^\circ$ et $\gamma = 60^\circ$ obtenus par (a) HFB (b) QRPA.

- $\beta = 0.1$ and $\gamma = 15^\circ$,
- $\beta = 0.1$ and $\gamma = 30^\circ$,
- $\beta = 0.1$ and $\gamma = 45^\circ$,
- $\beta = 0.1$ and $\gamma = 60^\circ$ (c'est à dire $\beta = -0.1$).

Nous comparons ces résultats avec ceux obtenus dans l'approximation d'Inglis-Belyaev, obtenus au niveau HFB (mais avec l'interaction dans sa totalité, comme montré dans la figure 4-7. Mentionnons ici que ces valeurs n'ont pas pour vocation d'être utilisées pour des calculs 5DCH, puisqu'elles ne contiennent pas les composantes dues aux autres termes de l'interaction. Cependant, cela permet de mettre en évidence que les fortes variations observées à la fois selon β et selon γ dans les paramètres de masse sont effectivement présents même en se restreignant au terme central. Nous notons également que les valeurs QRPA sont globalement plus faibles que les valeurs HFB (environ 30% de moins pour la QRPA, exception faite du pic à $\gamma = 45^\circ$) et que les pics ne sont pas localisés aux mêmes endroits dans les deux cas. Ces différences peuvent trouver leur origine dans deux phénomènes. D'une part, la QRPA est une méthode au-delà du champ moyen statique, qui ajoute de nouveaux

types de corrélations ignorées dans HFB, pouvant causer une modification de la carte de B_{00} . D'autre part, nous ne prenons en compte, dans le calcul triaxial, que le terme central et nous oublions de fait des corrélations. Il serait intéressant d'analyser le comportement de ces paramètres en prenant en compte les termes manquants. Il sera possible de réaliser cette étude à moindre coût en réutilisant le principe développé dans la partie 3.2.

Cette étude est un nouveau pas vers des calculs systématiques de cartes (β, γ) de paramètres de masse à la Thouless-Valatin, par le biais de la QRPA. Mis en relation avec la conclusion de l'étude présentée dans la partie 2.4, nous pouvons espérer pouvoir obtenir des cartes triaxiales incluant plus de corrélations que celles actuellement utilisées. Par ailleurs, l'approche QRPA triaxiale développée ici contribuera à élargir le spectre des systèmes qu'il est possible de décrire en s'attaquant aux noyaux dont l'état fondamental est triaxial. Cependant, il est nécessaire de continuer les efforts de programmation en ajoutant les termes de l'interaction effective de Gogny manquant à l'appel dans cette version. Ce travail sera facilité par la possibilité de s'inspirer du terme déjà programmé.

Conclusion & perspectives

Comme nous l'avons vu, le noyau atomique est un système très complexe à comprendre et à modéliser. Même lorsque l'on enclenche des approximations destinées à réduire la difficulté de l'exercice, les temps de calculs peuvent rester lourds voire prohibitifs. Le passage à une version parallélisée [PGM⁺11] en 2010 permet aujourd'hui au code QRPA axial ISAAC d'avoir à son actif plusieurs centaines de millions d'heures de calculs sur les machines mises à notre disposition. Il est à présent utilisé de façon routinière comme le prouve, entre autres, l'important volume de calculs consignés dans les études systématiques des transitions de type électrique et magnétique d'ordre 1 et de leur influence dans les fonctions de force [MPG⁺16, GHP⁺16]. De plus, les comparaisons réalisées vis-à-vis de résultats expérimentaux ont permis d'exposer la qualité de ces calculs théoriques comme présenté au 2.2 ou dans la partie 2.3 et ont permis la publication de l'étude traitant des noyaux d'étain [C⁺15] ainsi que celle centrée autour des sections efficaces de réactions dans l'²³⁸U [DBH⁺15].

Une autre approche utilisant la QRPA a été commentée dans la partie 2.4 lors de l'analyse de la faisabilité et de la pertinence du calcul des paramètres de masse vibrationnels utilisés dans le 5DCH, par le biais de la QRPA [LDP15]. Cette nouvelle voie de calcul a montré tout son intérêt et laisse entrevoir une grande avancée dans le traitement de la dynamique quadripolaire. Il sera sans aucun doute très intéressant d'étudier l'impact des nouvelles cartes de paramètres de masses sur la spectroscopie issue du 5DCH lorsque le code QRPA triaxial sera à même de

fournir ces cartes en incluant la totalité de l'interaction de Gogny.

En dépit du poids important du temps de calcul nécessaire pour remplir la matrice QRPA, le développement du code triaxial TAQOS présente en lui-même un progrès. Et même s'il se cantonne, pour le moment, au terme central de l'interaction de Gogny, il possède l'avantage non négligeable de pouvoir découpler les différents termes de l'interaction comme nous l'avons vu dans la partie 3.2. Il est envisageable de lancer une campagne de calculs visant à remplir quelques matrices amputées des autres termes et de les stocker. On peut, pendant ce temps, développer les termes manquants. Il suffira ensuite de récupérer les matrices, d'y ajouter les nouveaux termes grâce à un nouveau calcul, plus court, afin obtenir des résultats issus de calculs triaxiaux plus complets.

Finalement, le développement d'un formalisme astucieux de calcul des opérateurs de transitions électromagnétiques multipolaires généralisé a permis d'augmenter, sans difficulté excessive, l'ordre maximal des transitions accessibles, à la fois pour le code à symétrie axiale, dont ont bénéficié les études présentées dans [MPG⁺16, GHP⁺16], mais aussi pour le code à symétrie triaxiale. Ce formalisme original et l'outil numérique associé seront exploités pour le calcul des transitions entre états excités (intra et inter-bandes), ainsi que pour le calcul des temps de vie des noyaux radioactifs β .

Tous ces développements forment autant de façons différentes d'aborder le problème à N-corps microscopique. Cela représente un pas important permettant de se rapprocher encore un peu plus de l'objectif ultime que représente la description de la structure nucléaire ainsi que le calcul de données en découlant, par le biais de méthodes microscopiques, avec une précision accrue.

Annexe A

Propriétés des opérateurs de création et d'annihilation

A.1 Commutation des opérateurs bosoniques

On écrit le commutateur mettant en jeu b_i et b_j^+

$$[b_i, b_j^+] = b_i b_j^+ - b_j^+ b_i \quad (\text{A.1})$$

i) si $i \neq j$

$$\begin{aligned} [b_i, b_j^+] | \dots, n_i, \dots, n_j, \dots \rangle &= b_i b_j^+ | \dots, n_i, \dots, n_j, \dots \rangle - b_j^+ b_i | \dots, n_i, \dots, n_j, \dots \rangle \\ [b_i, b_j^+] | \dots, n_i, \dots, n_j, \dots \rangle &= \sqrt{n_j + 1} b_i | \dots, n_i, \dots, n_j + 1, \dots \rangle - \sqrt{n_i} b_j^+ | \dots, n_i - 1, \dots, n_j, \dots \rangle \\ [b_i, b_j^+] | \dots, n_i, \dots, n_j, \dots \rangle &= \sqrt{n_j + 1} \sqrt{n_i} | \dots, n_i - 1, \dots, n_j + 1, \dots \rangle \\ &\quad - \sqrt{n_i} \sqrt{n_j + 1} | \dots, n_i - 1, \dots, n_j + 1, \dots \rangle \\ [b_i, b_j^+] | \dots, n_i, \dots, n_j, \dots \rangle &= 0 \end{aligned}$$

Quelles que soient les occupations de i et de j , on a :

$$[b_i, b_j^+] = 0 \quad \text{pour} \quad i \neq j \quad (\text{A.2})$$

ii) si $i = j$

$$\begin{aligned}
[b_i, b_i^+]|.., n_i, ..\rangle &= b_i b_i^+ |.., n_i, ..\rangle - b_i^+ b_i |.., n_i, ..\rangle \\
&= \sqrt{n_i + 1} b_i |.., n_i + 1, ..\rangle - \sqrt{n_i} b_i^+ |.., n_i - 1, ..\rangle \\
&= \sqrt{n_i + 1} \sqrt{n_i + 1} |.., n_i, ..\rangle - \sqrt{n_i} \sqrt{n_i} |.., n_i, ..\rangle \\
&= (n_i + 1) |.., n_i, ..\rangle - (n_i) |.., n_i, ..\rangle \\
&= |.., n_i, ..\rangle
\end{aligned}$$

Quelle que soit l'occupation de i , on a :

$$[b_i, b_i^+] = \mathbb{1} \quad (\text{A.3})$$

En combinant les équations (A.2) et (A.3) :

$$[b_i, b_j^+] = \delta_{ij} \text{ pour les bosons} \quad (\text{A.4})$$

A.2 Commutation des opérateurs fermioniques

On écrit l'anti-commutateur mettant en jeu c_i et c_j^+

$$\{c_i, c_j^+\} = c_i c_j^+ + c_j^+ c_i \quad (\text{A.5})$$

Afin d'alléger l'écriture, on utilise un état à 2 particules i et j , $|-\rangle$ signifiant un vide de particule et $|i\rangle$ un état décrivant une particule dans un état quantique i .

i) si $i \neq j$ On remarque sans aucun calcul que si l'on applique à gauche ou à droite un état pour lequel i est vide et/ou j est occupé, on trouve une valeur nulle.

On ne se penchera donc que sur le cas i occupé et j vide :

$$\begin{aligned}
\{c_i, c_j^+\} |i\rangle &= c_i |j\ i\rangle + c_j^+ |-\rangle \\
&= -c_i |i\ j\rangle + |j\rangle \\
&= -|j\rangle + |j\rangle \\
\{c_i, c_j^+\} &= 0
\end{aligned}$$

Quelles que soient les occupations de i et de j , on a :

$$\{c_i, c_j^+\} = 0 \quad \text{pour } i \neq j \quad (\text{A.6})$$

ii) si $i = j$

Deux cas s'offrent à nous :

$$\begin{aligned}
\text{Si } i \text{ est occupé : } \{c_i^+, c_i\} |i\rangle &= (c_i^+ c_i + c_i c_i^+) |i\rangle = c_i^+ c_i |i\rangle + c_i c_i^+ |i\rangle \\
&= c_i^+ |-\rangle + 0 \\
&= |i\rangle
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\text{Si } i \text{ est vide : } \{c_i^+, c_i\} |-\rangle &= (c_i^+ c_i + c_i c_i^+) |-\rangle = c_i^+ c_i |-\rangle + c_i c_i^+ |-\rangle \\
&= 0 + c_i |i\rangle \\
&= |-\rangle
\end{aligned}$$

Quelle que soit l'occupation de i , on a :

$$\{c_i^+, c_i\} = \mathbb{1} \quad (\text{A.7})$$

En combinant les équations (A.6) et (A.7) :

$$\{c_i, c_j^+\} = \delta_{ij} \text{ pour les fermions} \quad (\text{A.8})$$

Annexe B

Approche variationnelle

On part de l'équation de Schrödinger en notation de Dirac :

$$\hat{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle \quad (\text{B.1})$$

En multipliant par le bra $\langle\Psi|$ à gauche :

$$\langle\Psi|\hat{H}|\Psi\rangle = \langle\Psi|E|\Psi\rangle \quad (\text{B.2})$$

$$\langle\Psi|\hat{H}|\Psi\rangle = E\langle\Psi|\Psi\rangle \quad (\text{B.3})$$

$$\text{Soit } E = \frac{\langle\Psi|\hat{H}|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle} \quad (\text{B.4})$$

En vertu des propriétés des fonctions d'onde utilisées¹, on peut écrire Ψ sous forme d'une combinaison linéaire de fonctions d'onde telles que :

$$|\Psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n |\Psi_n\rangle \text{ avec } \alpha_n \in \mathbb{C} \quad (\text{B.5})$$

$$\text{et } \hat{H}|\Psi_n\rangle = E_n|\Psi_n\rangle \quad (\text{B.6})$$

1. Les observables considérées étant issues d'opérateurs hermitiques, les états propres associés à ces opérateurs constituent une base orthogonale.

La fonction d'onde est exprimée à l'aide de chaque état propre associé à chaque valeur propre (énergie pour le Hamiltonien). L'état $|\Psi_0\rangle$ correspond par conséquent à l'état fondamental ($E_0 \leq E_1 \leq \dots$, l'égalité étant valable dans le cas de valeurs propres dégénérées). On a alors la relation suivante :

$$\hat{H}|\Psi\rangle = \hat{H} \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n |\Psi_n\rangle \quad (\text{B.7})$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n \hat{H} |\Psi_n\rangle \quad (\text{B.8})$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n E_n |\Psi_n\rangle \quad (\text{B.9})$$

$$(\text{B.10})$$

En multipliant à gauche par $\langle\Psi| = \sum_{n'=0}^{\infty} \alpha_{n'}^* \langle\Psi_{n'}|$

$$\langle\Psi|\hat{H}|\Psi\rangle = \sum_{n,n'} \alpha_{n'}^* \alpha_n E_n \langle\Psi_{n'}|\Psi_n\rangle \quad (\text{B.11})$$

$$= \sum_{n,n'} \alpha_{n'}^* \alpha_n E_n \delta_{n,n'} \quad (\text{B.12})$$

$$= \sum_n |\alpha_n|^2 E_n \quad (\text{B.13})$$

Et en divisant par $\langle\Psi|\Psi\rangle = \sum_n |\alpha_n|^2$:

$$\frac{\langle\Psi|\hat{H}|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle} = \frac{\sum_n |\alpha_n|^2 E_n}{\sum_n |\alpha_n|^2} \quad (\text{B.14})$$

Ce qui conduit finalement, en se souvenant que les énergies sont ordonnées, à :

$$E[\Psi] = \frac{\sum_n |\alpha_n|^2 E_n}{\sum_n |\alpha_n|^2} \geq \frac{\sum_n |\alpha_n|^2 E_0}{\sum_n |\alpha_n|^2} = E_0 \quad (\text{B.15})$$

$$E[\Psi] \geq E_0 \quad (\text{B.16})$$

On note au passage que dans le cas où l'état fondamental est non dégénéré, l'égalité est valable si et seulement si tous les coefficients α_n avec $n > 0$ sont nuls. L'état $|\Psi\rangle$ est alors proportionnel à $|\Psi_0\rangle$

$$|\Psi\rangle = \alpha_0 |\Psi_0\rangle \quad (\text{B.17})$$

De plus, l'énergie du fondamental E_0 est le minimum que l'on peut obtenir en écrivant $\delta E[\Psi] = 0$.

Annexe C

Formulaire des opérateurs de transitions multipolaires

On exprime les opérateurs $\hat{Q}_{\lambda\mu}$ grâce aux harmoniques sphériques $Y_{\lambda\mu}$ d'après les conventions établies dans [CTDL]

$$\hat{Q}_{\lambda\mu} = \sqrt{\frac{4\pi}{2\lambda+1}} r^\lambda Y_{\lambda\mu} \quad (\text{C.1})$$

Il existe cependant 2 exceptions pour les ordres 0 – pour lequel on utilise r^2 et pas r^0 – et l'ordre 1 pour lequel on distingue les cas

- isovectoriel, avec $r^\lambda = r$
- isoscalaire, avec $r^\lambda = r^3$.

Les harmoniques sphériques sont exprimées en accord avec [LL58].

C.1 Harmoniques sphériques

$$Y_{\lambda\mu} = (-1)^{\frac{\lambda+|\lambda|}{2}} \sqrt{\frac{2\lambda+1}{4\pi} \frac{(\lambda-|\lambda|)!}{(\lambda+|\lambda|)!}} P_{\lambda|\lambda|}(\cos\theta) e^{i\lambda\phi}$$

Harmonique de degré $\lambda = 0$

$$Y_{00} = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}$$

Harmoniques de degré $\lambda = 1$

$$Y_{10} = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\cos\theta$$
$$Y_{11} = -\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}}e^{i\phi}\sin\theta$$

Harmoniques de degré $\lambda = 2$

$$Y_{20} = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{5}{\pi}}(3\cos^2\theta - 1)$$
$$Y_{21} = -\frac{1}{2}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}e^{i\phi}\sin\theta\cos\theta$$
$$Y_{22} = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}e^{2i\phi}\sin^2\theta$$

Harmoniques de degré $\lambda = 3$

$$Y_{30} = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{7}{\pi}}(5\cos^3\theta - 3\cos\theta)$$
$$Y_{31} = -\frac{1}{8}\sqrt{\frac{21}{\pi}}e^{i\phi}\sin\theta(5\cos^2\theta - 1)$$
$$Y_{32} = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{105}{2\pi}}e^{2i\phi}\sin^2\theta\cos\theta$$
$$Y_{33} = -\frac{1}{8}\sqrt{\frac{35}{\pi}}e^{3i\phi}\sin^3\theta$$

Harmoniques de degré $\lambda = 4$

$$\begin{aligned}
Y_{40} &= \frac{3(35 \cos^4 \theta - 30 \cos^2 \theta + 3)}{16\sqrt{\pi}} \\
Y_{41} &= -\frac{3}{8} \sqrt{\frac{5}{\pi}} e^{i\phi} \sin \theta \cos \theta (7 \cos^2 \theta - 3) \\
Y_{42} &= \frac{3}{8} \sqrt{\frac{5}{2\pi}} e^{2i\phi} \sin^2 \theta (7 \cos^2 \theta - 1) \\
Y_{43} &= -\frac{3}{8} \sqrt{\frac{35}{\pi}} e^{3i\phi} \sin^3 \theta \cos \theta \\
Y_{44} &= \frac{3}{16} \sqrt{\frac{35}{2\pi}} e^{4i\phi} \sin^4 \theta
\end{aligned}$$

C.2 Opérateurs en coordonnées cylindriques

On choisit d'exprimer les moments en fonction de :

$$z = r \cos \theta$$

$$r_{\perp} = r \sin \theta$$

Moment monopolaire ($\lambda = 0$)

$$\hat{Q}_{00} = 1$$

Moments dipolaires ($\lambda = 1$)

$$\hat{Q}_{10} = z$$

$$\hat{Q}_{11} = -\frac{1}{\sqrt{2}} r_{\perp} e^{i\phi}$$

Moments quadripolaires ($\lambda = 2$)

$$\hat{Q}_{20} = z^2 - \frac{1}{2}r_{\perp}^2$$

$$\hat{Q}_{21} = -\sqrt{\frac{3}{2}}r_{\perp}ze^{i\phi}$$

$$\hat{Q}_{22} = \sqrt{\frac{3}{8}}r_{\perp}^2e^{2i\phi}$$

Moments octupolaires ($\lambda = 3$)

$$\hat{Q}_{30} = z^3 - \frac{3}{2}r_{\perp}^2z$$

$$\hat{Q}_{31} = -\frac{\sqrt{3}}{4}(4r_{\perp}z^2 - r_{\perp}^3)e^{i\phi}$$

$$\hat{Q}_{32} = \sqrt{\frac{15}{8}}r_{\perp}^2ze^{2i\phi}$$

$$\hat{Q}_{33} = -\frac{\sqrt{5}}{4}r_{\perp}^3e^{3i\phi}$$

Moments hexadécapolaires ($\lambda = 4$)

$$\hat{Q}_{40} = z^4 - 3r_{\perp}^2 z^2 + \frac{3}{8}r_{\perp}^4$$

$$\hat{Q}_{41} = -\frac{\sqrt{5}}{4}(4r_{\perp} z^3 - 3r_{\perp}^3 z)e^{i\phi}$$

$$\hat{Q}_{42} = \sqrt{\frac{5}{32}}(6r_{\perp}^2 z^2 - r_{\perp}^4)e^{2i\phi}$$

$$\hat{Q}_{43} = -\frac{\sqrt{35}}{4}r_{\perp}^3 z e^{3i\phi}$$

$$\hat{Q}_{44} = \sqrt{\frac{35}{128}}r_{\perp}^4 e^{4i\phi}$$

Ordre 5

$$\hat{Q}_{50} = z^5 - 5r_{\perp}^2 z^3 + \frac{15r_{\perp}^4 z}{8} \quad (\text{C.2})$$

$$\hat{Q}_{51} = -\frac{1}{16}\sqrt{\frac{15}{2}}r_{\perp} e^{i\phi} (r_{\perp}^4 + 8z^4 - 12r_{\perp}^2 z^2) \quad (\text{C.3})$$

$$\hat{Q}_{52} = \frac{1}{8}\sqrt{\frac{105}{2}}r_{\perp}^2 z e^{2i\phi} (2z^2 - r_{\perp}^2) \quad (\text{C.4})$$

$$\hat{Q}_{53} = -\frac{1}{32}\sqrt{35}r_{\perp}^3 e^{3i\phi} (r_{\perp}^2 - 8z^2) \quad (\text{C.5})$$

$$\hat{Q}_{54} = \frac{3}{16}\sqrt{\frac{35}{2}}r_{\perp}^4 z e^{4i\phi} \quad (\text{C.6})$$

$$\hat{Q}_{55} = -\frac{3}{32}\sqrt{7}r_{\perp}^5 e^{5i\phi} \quad (\text{C.7})$$

Ordre 6

$$\hat{Q}_{60} = z^6 - \frac{15}{2}r_{\perp}^2 z^4 + \frac{45}{8}r_{\perp}^4 z^2 - \frac{5}{16}r_{\perp}^6 \quad (\text{C.8})$$

$$\hat{Q}_{61} = -\frac{1}{16}\sqrt{\frac{21}{2}}r_{\perp} z e^{i\phi} (8z^4 - 20r_{\perp}^2 z^2 + 5r_{\perp}^4) \quad (\text{C.9})$$

$$\hat{Q}_{62} = \frac{1}{64}\sqrt{105}r_{\perp}^2 e^{2i\phi} (r_{\perp}^4 + 16z^4 - 16r_{\perp}^2 z^2) \quad (\text{C.10})$$

$$\hat{Q}_{63} = -\frac{1}{32}\sqrt{105}r_{\perp}^3 z e^{3i\phi} (8z^2 - 3r_{\perp}^2) \quad (\text{C.11})$$

$$\hat{Q}_{64} = \frac{3}{32}\sqrt{\frac{7}{2}}r_{\perp}^4 e^{4i\phi} (10z^2 - r_{\perp}^2) \quad (\text{C.12})$$

$$\hat{Q}_{65} = -\frac{3}{32}\sqrt{77}r_{\perp}^5 z e^{5i\phi} \quad (\text{C.13})$$

$$\hat{Q}_{66} = \frac{1}{64}\sqrt{231}r_{\perp}^6 e^{6i\phi} \quad (\text{C.14})$$

Ordre 7

$$\hat{Q}_{70} = z^7 - \frac{21}{2}r_{\perp}^2 z^5 + \frac{105}{8}r_{\perp}^4 z^3 - \frac{35}{16}r_{\perp}^6 z \quad (\text{C.15})$$

$$\hat{Q}_{71} = -\sqrt{\frac{7}{2048}}r_{\perp}e^{i\phi}(64z^6 - 5r_{\perp}^6 - 240r_{\perp}^2 z^4 + 120r_{\perp}^4 z^2) \quad (\text{C.16})$$

$$\hat{Q}_{72} = \sqrt{\frac{21}{1024}}r_{\perp}^2 z e^{2i\phi}(15r_{\perp}^4 + 48z^4 - 80r_{\perp}^2 z^2) \quad (\text{C.17})$$

$$\hat{Q}_{73} = -\sqrt{\frac{21}{2048}}r_{\perp}^3 e^{3i\phi}(3r_{\perp}^4 + 80z^4 - 60r_{\perp}^2 z^2) \quad (\text{C.18})$$

$$\hat{Q}_{74} = \sqrt{\frac{231}{512}}r_{\perp}^4 z e^{4i\phi}(10z^2 - 3r_{\perp}^2) \quad (\text{C.19})$$

$$\hat{Q}_{75} = -\sqrt{\frac{231}{2048}}r_{\perp}^5 e^{5i\phi}(12z^2 - r_{\perp}^2) \quad (\text{C.20})$$

$$\hat{Q}_{76} = \sqrt{\frac{3003}{1024}}r_{\perp}^6 z e^{6i\phi} \quad (\text{C.21})$$

$$\hat{Q}_{77} = -\sqrt{\frac{429}{2048}}r_{\perp}^7 e^{7i\phi} \quad (\text{C.22})$$

Ordre 8

$$\hat{Q}_{80} = z^8 - 14r_{\perp}^2 z^6 + \frac{105}{4}r_{\perp}^4 z^4 - \frac{35}{4}r_{\perp}^6 z^2 + \frac{35}{128}r_{\perp}^8 \quad (\text{C.23})$$

$$\hat{Q}_{81} = \sqrt{\frac{9}{2048}}r_{\perp} z e^{i\phi} (64z^6 - 35r_{\perp}^6 - 336r_{\perp}^2 z^4 + 280r_{\perp}^4 z^2) \quad (\text{C.24})$$

$$\hat{Q}_{82} = \sqrt{\frac{315}{4096}}r_{\perp}^2 e^{2i\phi} (32z^6 - r_{\perp}^6 - 80r_{\perp}^2 z^4 + 30r_{\perp}^4 z^2) \quad (\text{C.25})$$

$$\hat{Q}_{83} = \sqrt{\frac{1155}{2048}}r_{\perp}^3 z e^{3i\phi} (3r_{\perp}^4 + 16z^4 - 20r_{\perp}^2 z^2) \quad (\text{C.26})$$

$$\hat{Q}_{84} = \sqrt{\frac{693}{8192}}r_{\perp}^4 e^{4i\phi} (r_{\perp}^4 + 40z^4 - 24r_{\perp}^2 z^2) \quad (\text{C.27})$$

$$\hat{Q}_{85} = \sqrt{\frac{9009}{2048}}r_{\perp}^5 z e^{5i\phi} (4z^2 - r_{\perp}^2) \quad (\text{C.28})$$

$$\hat{Q}_{86} = \sqrt{\frac{429}{4096}}r_{\perp}^6 e^{6i\phi} (14z^2 - r_{\perp}^2) \quad (\text{C.29})$$

$$\hat{Q}_{87} = \sqrt{\frac{6435}{2048}}r_{\perp}^7 z e^{7i\phi} \quad (\text{C.30})$$

$$\hat{Q}_{88} = \sqrt{\frac{6435}{32768}}r_{\perp}^8 e^{8i\phi} \quad (\text{C.31})$$

C.3 Opérateurs en coordonnées triaxiales

Ordre 0

$$\hat{Q}_{00} = x^2 + y^2 + z^2 \quad (\text{C.32})$$

Ordre 1

- isovectoriel

$$\hat{Q}_{1-1}^{IV} = \frac{1}{\sqrt{2}}(x - iy) \quad (\text{C.33})$$

$$\hat{Q}_{10}^{IV} = z \quad (\text{C.34})$$

$$\hat{Q}_{11}^{IV} = -\frac{1}{\sqrt{2}}(x + iy) \quad (\text{C.35})$$

- isoscalaire

$$\hat{Q}_{1-1}^{IS} = (x^2 + y^2 + z^2)\hat{Q}_{1-1}^{IV} \quad (\text{C.36})$$

$$\hat{Q}_{10}^{IS} = (x^2 + y^2 + z^2)\hat{Q}_{10}^{IV} \quad (\text{C.37})$$

$$\hat{Q}_{11}^{IS} = (x^2 + y^2 + z^2)\hat{Q}_{11}^{IV} \quad (\text{C.38})$$

Ordre 2

$$\hat{Q}_{2-2} = \sqrt{\frac{3}{8}}(x - iy)^2 \quad (\text{C.39})$$

$$\hat{Q}_{2-1} = \sqrt{\frac{3}{2}}z(x - iy) \quad (\text{C.40})$$

$$\hat{Q}_{20} = z^2 - \frac{1}{2}(x^2 + y^2) \quad (\text{C.41})$$

$$\hat{Q}_{21} = -\sqrt{\frac{3}{2}}z(x + iy) \quad (\text{C.42})$$

$$\hat{Q}_{22} = \sqrt{\frac{3}{8}}(x + iy)^2 \quad (\text{C.43})$$

Ordre 3

$$\hat{Q}_{3-3} = \sqrt{\frac{5}{16}}(x - iy)^3 \quad (\text{C.44})$$

$$\hat{Q}_{3-2} = \sqrt{\frac{15}{8}}z(x - iy)^2 \quad (\text{C.45})$$

$$\hat{Q}_{3-1} = \sqrt{\frac{3}{16}}[4z^2 - (x^2 + y^2)](x - iy) \quad (\text{C.46})$$

$$\hat{Q}_{30} = z\left[z^2 - \frac{3}{2}(x^2 + y^2)\right] \quad (\text{C.47})$$

$$\hat{Q}_{31} = -\sqrt{\frac{3}{16}}[4z^2 - (x^2 + y^2)](x + iy) \quad (\text{C.48})$$

$$\hat{Q}_{32} = \sqrt{\frac{15}{8}}z(x + iy)^2 \quad (\text{C.49})$$

$$\hat{Q}_{33} = -\sqrt{\frac{5}{16}}(x + iy)^3 \quad (\text{C.50})$$

Ordre 4

$$\hat{Q}_{4-4} = \sqrt{\frac{35}{128}}(x - iy)^4 \quad (\text{C.51})$$

$$\hat{Q}_{4-3} = \sqrt{\frac{35}{16}}z(x - iy)^3 \quad (\text{C.52})$$

$$\hat{Q}_{4-2} = \sqrt{\frac{5}{32}}[6z^2 - 7(x^2 + y^2)](x - iy)^2 \quad (\text{C.53})$$

$$\hat{Q}_{4-1} = \sqrt{\frac{5}{16}}z[4z^2 - 3(x^2 + y^2)](x - iy) \quad (\text{C.54})$$

$$\hat{Q}_{40} = z^4 - 3z^2(x^2 + y^2) + \frac{3}{8}(x^2 + y^2)^2 \quad (\text{C.55})$$

$$\hat{Q}_{41} = -\sqrt{\frac{5}{16}}z[4z^2 - 3(x^2 + y^2)](x + iy) \quad (\text{C.56})$$

$$\hat{Q}_{42} = \sqrt{\frac{5}{32}}[6z^2 - 7(x^2 + y^2)](x + iy)^2 \quad (\text{C.57})$$

$$\hat{Q}_{43} = -\sqrt{\frac{35}{16}}z(x + iy)^3 \quad (\text{C.58})$$

$$\hat{Q}_{44} = \sqrt{\frac{35}{128}}(x + iy)^4 \quad (\text{C.59})$$

Ordre 5

$$\hat{Q}_{5-5} = \sqrt{\frac{63}{256}}(x - iy)^5 \quad (\text{C.60})$$

$$\hat{Q}_{5-4} = \sqrt{\frac{315}{128}}z(x - iy)^4 \quad (\text{C.61})$$

$$\hat{Q}_{5-3} = \sqrt{\frac{35}{256}}[8z^2 - (x^2 + y^2)](x - iy)^3 \quad (\text{C.62})$$

$$\hat{Q}_{5-2} = \sqrt{\frac{105}{32}}z[2z^2 - (x^2 + y^2)](x - iy)^2 \quad (\text{C.63})$$

$$\hat{Q}_{5-1} = \sqrt{\frac{15}{128}}[8z^4 - 12z^2(x^2 + y^2) + (x^2 + y^2)^2](x - iy) \quad (\text{C.64})$$

$$\hat{Q}_{50} = z\left[z^4 - 5z^2(x^2 + y^2) + \frac{15}{8}(x^2 + y^2)^2\right] \quad (\text{C.65})$$

$$\hat{Q}_{51} = -\sqrt{\frac{15}{128}}[8z^4 - 12z^2(x^2 + y^2) + (x^2 + y^2)^2](x + iy) \quad (\text{C.66})$$

$$\hat{Q}_{52} = \sqrt{\frac{105}{32}}z[2z^2 - (x^2 + y^2)](x + iy)^2 \quad (\text{C.67})$$

$$\hat{Q}_{53} = -\sqrt{\frac{35}{256}}[8z^2 - (x^2 + y^2)](x + iy)^3 \quad (\text{C.68})$$

$$\hat{Q}_{54} = \sqrt{\frac{315}{128}}z(x + iy)^4 \quad (\text{C.69})$$

$$\hat{Q}_{55} = -\sqrt{\frac{63}{256}}(x + iy)^5 \quad (\text{C.70})$$

Ordre 6

$$\hat{Q}_{6-6} = \sqrt{\frac{231}{1024}}(x - iy)^6 \quad (\text{C.71})$$

$$\hat{Q}_{6-5} = \sqrt{\frac{693}{256}}z(x - iy)^5 \quad (\text{C.72})$$

$$\hat{Q}_{6-4} = \sqrt{\frac{63}{512}}[10z^2 - (x^2 + y^2)](x - iy)^4 \quad (\text{C.73})$$

$$\hat{Q}_{6-3} = \sqrt{\frac{105}{256}}z[8z^2 - 3(x^2 + y^2)](x - iy)^3 \quad (\text{C.74})$$

$$\hat{Q}_{6-2} = \sqrt{\frac{105}{1024}}[16z^4 - 16z^2(x^2 + y^2) + (x^2 + y^2)^2](x - iy)^2 \quad (\text{C.75})$$

$$\hat{Q}_{6-1} = \sqrt{\frac{21}{128}}z[8z^4 - 20z^2(x^2 + y^2) + 5(x^2 + y^2)^2](x - iy) \quad (\text{C.76})$$

$$\hat{Q}_{60} = z^6 - \frac{15}{2}z^4(x^2 + y^2) + \frac{45}{8}z^2(x^2 + y^2)^2 - \frac{5}{16}(x^2 + y^2)^3 \quad (\text{C.77})$$

$$\hat{Q}_{61} = -\sqrt{\frac{21}{128}}z[8z^4 - 20z^2(x^2 + y^2) + 5(x^2 + y^2)^2](x + iy) \quad (\text{C.78})$$

$$\hat{Q}_{62} = \sqrt{\frac{105}{1024}}[16z^4 - 16z^2(x^2 + y^2) + (x^2 + y^2)^2](x + iy)^2 \quad (\text{C.79})$$

$$\hat{Q}_{63} = -\sqrt{\frac{105}{256}}z[8z^2 - 3(x^2 + y^2)](x + iy)^3 \quad (\text{C.80})$$

$$\hat{Q}_{64} = \sqrt{\frac{63}{512}}[10z^2 - (x^2 + y^2)](x + iy)^4 \quad (\text{C.81})$$

$$\hat{Q}_{65} = -\sqrt{\frac{693}{256}}z(x + iy)^5 \quad (\text{C.82})$$

$$\hat{Q}_{66} = \sqrt{\frac{231}{1024}}(x + iy)^6 \quad (\text{C.83})$$

Ordre 7

$$\hat{Q}_{7-7} = \sqrt{\frac{429}{2048}} (x - iy)^7 \quad (\text{C.84})$$

$$\hat{Q}_{7-6} = \sqrt{\frac{3003}{1024}} z (x - iy)^6 \quad (\text{C.85})$$

$$\hat{Q}_{7-5} = \sqrt{\frac{231}{2048}} [12z^2 - (x^2 + y^2)] (x - iy)^5 \quad (\text{C.86})$$

$$\hat{Q}_{7-4} = \sqrt{\frac{231}{512}} z [10z^2 - 3(x^2 + y^2)] (x - iy)^4 \quad (\text{C.87})$$

$$\hat{Q}_{7-3} = \sqrt{\frac{21}{2048}} [80z^4 - 60z^2(x^2 + y^2) + 3(x^2 + y^2)^2] (x - iy)^3 \quad (\text{C.88})$$

$$\hat{Q}_{7-2} = \sqrt{\frac{21}{1024}} z [48z^4 - 80z^2(x^2 + y^2) + 15(x^2 + y^2)^2] (x - iy)^2 \quad (\text{C.89})$$

$$\hat{Q}_{7-1} = \sqrt{\frac{7}{2048}} [64z^6 - 240z^4(x^2 + y^2) + 120z^2(x^2 + y^2)^2 - 5(x^2 + y^2)^3] (x - iy) \quad (\text{C.90})$$

$$\hat{Q}_{70} = z \left[z^6 - \frac{21}{2} z^4(x^2 + y^2) + \frac{105}{8} z^2(x^2 + y^2)^2 - \frac{35}{16} (x^2 + y^2)^3 \right] \quad (\text{C.91})$$

$$\hat{Q}_{71} = -\sqrt{\frac{7}{2048}} [64z^6 - 240z^4(x^2 + y^2) + 120z^2(x^2 + y^2)^2 - 5(x^2 + y^2)^3] (x + iy) \quad (\text{C.92})$$

$$\hat{Q}_{72} = \sqrt{\frac{21}{1024}} z [48z^4 - 80z^2(x^2 + y^2) + 15(x^2 + y^2)^2] (x + iy)^2 \quad (\text{C.93})$$

$$\hat{Q}_{73} = -\sqrt{\frac{21}{2048}} [80z^4 - 60z^2(x^2 + y^2) + 3(x^2 + y^2)^2] (x + iy)^3 \quad (\text{C.94})$$

$$\hat{Q}_{74} = \sqrt{\frac{231}{512}} z [10z^2 - 3(x^2 + y^2)] (x + iy)^4 \quad (\text{C.95})$$

$$\hat{Q}_{75} = -\sqrt{\frac{231}{2048}} [12z^2 - (x^2 + y^2)] (x + iy)^5 \quad (\text{C.96})$$

$$\hat{Q}_{76} = \sqrt{\frac{3003}{1024}} z (x + iy)^6 \quad (\text{C.97})$$

$$\hat{Q}_{77} = -\sqrt{\frac{429}{2048}} (x + iy)^7 \quad (\text{C.98})$$

Ordre 8

$$\hat{Q}_{8-8} = \sqrt{\frac{6435}{32768}} (x - iy)^8 \quad (\text{C.99})$$

$$\hat{Q}_{8-7} = \sqrt{\frac{6435}{2048}} z (x - iy)^7 \quad (\text{C.100})$$

$$\hat{Q}_{8-6} = \sqrt{\frac{429}{4096}} [14z^2 - (x^2 + y^2)] (x - iy)^6 \quad (\text{C.101})$$

$$\hat{Q}_{8-5} = \sqrt{\frac{9009}{2048}} z [4z^2 - (x^2 + y^2)] (x - iy)^5 \quad (\text{C.102})$$

$$\hat{Q}_{8-4} = \sqrt{\frac{693}{8192}} [40z^4 - 24z^2(x^2 + y^2) + (x^2 + y^2)^2] (x - iy)^4 \quad (\text{C.103})$$

$$\hat{Q}_{8-3} = \sqrt{\frac{1155}{2048}} z [16z^4 - 20z^2(x^2 + y^2) + 3(x^2 + y^2)^2] (x - iy)^3 \quad (\text{C.104})$$

$$\hat{Q}_{8-2} = \sqrt{\frac{315}{4096}} [32z^6 - 80z^4(x^2 + y^2) + 30z^2(x^2 + y^2)^2 - (x^2 + y^2)^3] (x - iy)^2 \quad (\text{C.105})$$

$$\hat{Q}_{8-1} = \sqrt{\frac{9}{2048}} z [64z^6 - 336z^4(x^2 + y^2) + 280z^2(x^2 + y^2)^2 - 35(x^2 + y^2)^3] (x - iy) \quad (\text{C.106})$$

$$\hat{Q}_{80} = z^8 - 14z^6(x^2 + y^2) + \frac{105}{4}z^4(x^2 + y^2)^2 - \frac{35}{4}z^2(x^2 + y^2)^3 + \frac{35}{128}(x^2 + y^2)^4 \quad (\text{C.107})$$

$$\hat{Q}_{81} = -\sqrt{\frac{9}{2048}} z [64z^6 - 336z^4(x^2 + y^2) + 280z^2(x^2 + y^2)^2 - 35(x^2 + y^2)^3] (x + iy) \quad (\text{C.108})$$

$$\hat{Q}_{82} = \sqrt{\frac{315}{4096}} [32z^6 - 80z^4(x^2 + y^2) + 30z^2(x^2 + y^2)^2 - (x^2 + y^2)^3] (x + iy)^2 \quad (\text{C.109})$$

$$\hat{Q}_{83} = -\sqrt{\frac{1155}{2048}} z [16z^4 - 20z^2(x^2 + y^2) + 3(x^2 + y^2)^2] (x + iy)^3 \quad (\text{C.110})$$

$$\hat{Q}_{84} = \sqrt{\frac{693}{8192}} [40z^4 - 24z^2(x^2 + y^2) + (x^2 + y^2)^2] (x + iy)^4 \quad (\text{C.111})$$

$$\hat{Q}_{85} = -\sqrt{\frac{9009}{2048}} z [4z^2 - (x^2 + y^2)] (x + iy)^5 \quad (\text{C.112})$$

$$\hat{Q}_{86} = \sqrt{\frac{429}{4096}} [14z^2 - (x^2 + y^2)] (x + iy)^6 \quad (\text{C.113})$$

$$\hat{Q}_{87} = -\sqrt{\frac{6435}{2048}} z (x + iy)^7 \quad (\text{C.114})$$

$$\hat{Q}_{88} = \sqrt{\frac{6435}{32768}} (x + iy)^8 \quad (\text{C.115})$$

Bibliographie

- [ark] Base de données des spécifications des processeurs Intel, ark.intel.com.
- [BABH14] B. Bally, B. Avez, M. Bender, and P. H. Heenen. Beyond mean-field calculations for odd-mass nuclei. *Phys. Rev. Lett.*, (113) :162501, 2014.
- [Ben12] K. Bennaceur. Cours de M2 de physique nucléaire avancée dispensé à Grenoble INP - Phelma, 2012.
- [Ber91] J.-F. Berger. Approche du champ moyen et au-delà (cours dispensé à l'Université d'été Joliot-Curie), 1991.
- [BGH⁺07] G.F. Bertsch, M. Girod, S. Hilaire, J.-P. Delaroche, H. Goutte, and S. Péru. Systematics of the first 2^+ excitation with the Gogny interaction. *Phys. Rev. Lett.*, (99) :032502, 2007.
- [BH08] M. Bender and P.-H. Heenen. Configuration mixing of angular-momentum and particle-number projected triaxial Hartree-Fock-Bogoliubov states using the Skyrme energy density functional. *Phys. Rev. C*, (78) :024309, 2008.
- [Bog58] N.N. Bogoliubov. On a new method in the theory of superconductivity. *Nuovo Cim.*, (7) :794, 1958.
- [C⁺15] A. Corsi et al. Neutron-driven collectivity in light tin isotopes : Proton inelastic scattering from ^{104}Sn . *Phys. Lett. B*, (743) :451, 2015.
- [Cas90] R.F. Casten. *Nuclear Structure from a simple perspective*. Oxford University Press, 1990.
- [CB01] G. Colò and P.F. Bortignon. QRPA plus phonon coupling model and the photoabsorption cross section for $^{18,20,22}\text{O}$. *Nuc. Phys. A*, (696) :427, 2001.
- [Cha07] F. Chappert. Nouvelles paramétrisations de l'interaction nucléaire effective de Gogny (Thèse), 2007.
- [CPGB15] F. Chapper, N. Pillet, M. Girod, and J.-F. Berger. Gogny force with a finite-range density dependence. *Phys. Rev. C*, (91) :034312, 2015.
- [CTDL] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and Lalo' *Mécanique quantique*.

- [DBH⁺15] M. Dupuis, E. Bauge, S. Hilaire, F. Lechaftois, S. Péru, N. Pillet, and C. Robin. Progress in microscopic direct reaction modeling of nucleon induced reactions. *Eur. Phys. J. A*, (51) :168, 2015.
- [DG80] J. Dechargé and D. Gogny. Hartree-Fock-Bogolyubov calculations with the D1 effective interaction on spherical nuclei. *Phys. Rev. C*, (21) :1568, 1980.
- [DGL⁺10] J.-P. Delaroche, M. Girod, J. Libert, H. Goutte, S. Hilaire, S. Péru, N. Pillet, and G.F. Bertsch. Structure of even-even nuclei using a mapped collective Hamiltonian and the D1S Gogny interaction. *Phys. Rev. C*, (81) :014303, 2010.
- [Ebr13] J.-P. Ebran. Approches microscopiques de la physique de la structure nucléaire (rapport interne), 2013.
- [GG83] M. Girod and B. Grammaticos. Triaxial Hartree-Fock-Bogolyubov calculations with D1 effective interaction. *Phys. Rev. C*, (27) :2317, 1983.
- [GG16] D. Gambacurta and M. Grasso. Second RPA calculations with the Skyrme and Gogny interactions. *Eur. Phys. J. A*, (52) :198, 2016.
- [GHGP09] S. Goriely, S. Hilaire, M. Girod, and S. Péru. First Gogny-Hartree-Fock-Bogoliubov nuclear mass model. *Phys. Rev. Lett.*, (102) :242501, 2009.
- [GHP⁺16] S. Goriely, S. Hilaire, S. Péru, M. Martini, I. Deloncle, and F. Lechaftois. The Gogny-HFB+QRPA predictions of the M1 strength function and its impact on radiative neutron capture cross section. *Phys. Rev. C*, (94) :044306, 2016.
- [HG07] S. Hilaire and M. Girod. Large-scale mean-field calculations from proton to neutron drip lines using the D1S Gogny force. *Eur. Phys. J. A*, (33) :237, 2007.
- [HSN⁺10] N. Hinohara, K. Sato, T. Nakatsukasa, M. Matsuo, and K. Matsuyana. Microscopic description of large-amplitude shape-mixing dynamics with inertial functions derived in local quasiparticle random-phase approximation. *Phys. Rev. C*, (82) :064313, 2010.
- [HvdW01] M. N. Harakeh and A. van der Woude. *Giant Resonances : Fundamental high-frequency modes of nuclear excitation*. Oxford Science Publications, 2001.
- [LDG⁺10] J. Libert, J.-P. Delaroche, M. Girod, H. Goutte, S. Hilaire, S. Péru, N. Pillet, and G. F. Bertsch. Microscopic study of low energy collective states in even-even nuclei : A prospective analysis of dynamical corrections to vibrational mass parameters. *J. Phys. : Conf. Ser.*, (205) :012007, 2010.
- [LDG16] J. Libert, J.-P. Delaroche, and M. Girod. Five-dimensional collective hamiltonian with the Gogny force : An ongoing saga. *Eur. Phys. J. A*, (52) :197, 2016.

- [LDP15] F. Lechaftois, I. Deloncle, and S. Péru. Introduction of a valence space in quasiparticle random-phase approximation : Impact on vibrational mass parameters and spectroscopic properties. *Phys. Rev. C*, (92) :034315, 2015.
- [LL58] L.D Landau and E.M. Lifschitz. *Quantum Mechanics : Non-Relativistic Theory vol.3*. Pergammon Press, 1958.
- [LRV07] E. Litvinova, P. Ring, and D. Vretenar. Relativistic RPA plus phonon-coupling analysis of pygmy dipole resonances. *Phys. Lett. B*, (647) :111, 2007.
- [MA] B. Mohammed-Azizi. *Electronic J. Theor. Phys.* **9**, page 143.
- [Mar] Marc Dupuis, communication privée.
- [MPG14] M. Martini, S. Péru, and S. Goriely. Gamow-Teller strength in deformed nuclei within the self-consistent charge-exchange quasiparticle random-phase approximation with the Gogny force. *Phys. Rev. C*, (89) :044306, 2014.
- [MPG⁺16] M. Martini, S. Péru, S. Goriely, S. Hilaire, and F. Lechaftois. Large-scale deformed quasiparticle random-phase approximation calculations of the γ -ray strength function using the Gogny force. *Phys. Rev. C*, (94) :014304, 2016.
- [NIY07] T. Nakatsukasa, T. Inakura, and K. Yabana. Finite amplitude method for the solution of the random-phase approximation. *Phys. Rev. C*, (76) :024318, 2007.
- [NND] Base de données NNDC du Brookhaven National Laboratory, <http://www.nndc.bnl.gov/chart/>.
- [P11] S. Péru. Études théoriques de la structure nucléaire au-delà de l'approximation du champ moyen (Habilitation à diriger des recherches), 2011.
- [PBB05] S. Péru, J.-F. Berger, and P. F. Bortignon. Giant resonances in exotic spherical nuclei within the RPA approach with the Gogny force. *Eur. Phys. J. A*, (26) :25, 2005.
- [PG08] S. Péru and H. Goutte. Role of deformation on giant resonances within the quasiparticle random-phase approximation and the Gogny force. *Phys. Rev. C*, (77) :044313, 2008.
- [PGB00] S. Péru, M. Girod, and J.-F. Berger. Evolution of the N=20 and N=28 shell closures in neutron-rich nuclei. *Eur. Phys. J. A*, (9) :35, 2000.
- [PGM⁺11] S. Péru, G. Gosselin, Martini, M. M., Dupuis, S. Hilaire, and J.-C. Devaux. Giant resonances in ^{238}U within the quasiparticle random-phase approximation with the Gogny force. *Phys. Rev. C*, (83) :014314, 2011.

- [phy] Base de données AMEDEC, www.phynu.cea.fr.
- [PM14] S. Péru and M. Martini. Mean field based calculations with the Gogny force : Some theoretical tools to explore the nuclear structure. *Eur. Phys. J. A*, (50) :88, 2014.
- [PZS] M. K. Pal, D. Zawischa, and J. Speth. *Z. Phys. A*, page 387.
- [RE10] T. R. Rodríguez and J. L. Egido. Triaxial angular momentum projection and configuration mixing calculations with the Gogny force. *Phys. Rev. C*, (81) :064323, 2010.
- [Row10] D. Rowe. *Nuclear collective motion : Models and theory*. World Scientific, 2010.
- [RS80] P. Ring and P. Schuck. *The Nuclear Many-Body Problem*. Springer-Verlag, 1980.
- [SC16] C. Sanderson and R. Curtin. Armadillo : a template-based C++ library for linear algebra. *Journal of Open Source Software*, (Vol. 1) :26, 2016.
- [Suh07] J. Suhonen. *From Nucleons to Nucleus : Concepts of microscopic nuclear theory*. Springer, 2007.
- [TCD⁺10] J. Toivanen, B. G. Carlsson, J. Dobaczewski, K. Mizuyama, R. R. Rodríguez-Guzmán, P. Toivanen, and P. Veselý. Linear response strength functions with iterative Arnoldi diagonalization. *Phys. Rev. C*, (81) :034312, 2010.
- [TE10] J. Terasaki and J. Engel. Self-consistent Skyrme quasiparticle random-phase approximation for use in axially symmetric nuclei of arbitrary mass. *Phys. Rev. C*, (82) :034326, 2010.
- [Tho60] D. J. Thouless. Vibrational states of nuclei in the random phase approximation. *Nucl. Phys.*, (21) :225, 1960.
- [TLS15] Y. Tanimura, D. Lacroix, and Scamps. Collective aspects deduced from time-dependent microscopic mean-field with pairing : Application to the fission process. *Phys. Rev. C*, (92) :034601, 2015.
- [Vau77] D. Vautherin. A relation between adiabatic inertial parameters and the cubic inverse energy-weighted sum rule. *Phys. Lett. B*, (69) :393, 1977.
- [Won04] S. Wong. *Introductory Nuclear Physics*. Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2004.
- [YG08] K. Yoshida and N. V. Giai. Deformed quasiparticle-random-phase approximation for neutron-rich nuclei using the Skyrme energy density functional. *Phys. Rev. C*, (78) :064316, 2008.
- [YH11] K. Yoshida and N. Hinohara. Shape changes and large-amplitude collective dynamics in neutron-rich Cr isotopes. *Phys. Rev. C*, (83) :061302, 2011.

- [YLQG99] E. Kh. Yuldashbaeva, J. Libert, P. Quentin, and M. Girod. Mass parameters for large amplitude collective motion : A perturbative microscopic approach. *Phys. Lett. B*, (461) :1, 1999.

Titre

Description des états excités du noyau par la méthode QRPA et l'interaction de Gogny

Résumé

Cette thèse présente trois aspects centrés autour de la QRPA (Quasiparticle Random Phase Approximation).

Le premier consiste en l'utilisation d'un code à symétrie axiale pour confronter des données calculées à des résultats expérimentaux, et pour alimenter un code microscopique de réactions. Cette étape est l'occasion d'analyser la spectroscopie du noyau à basse énergie (quelques dizaines de MeV), et plus spécifiquement (mais pas uniquement) la chaîne isotopique de l'étain ($Z=50$). La seconde facette repose sur l'amélioration d'un formalisme de calcul des opérateurs de transitions électromagnétiques multipolaires, et d'une méthode de généralisation du calcul de ces opérateurs permettant de faciliter la programmation en uniformisant le code pour les différentes multipolarités. Finalement, afin de dépasser la contrainte de la symétrie axiale, un nouveau code de calcul en symétrie triaxiale a été développé. Ses caractéristiques et son développement sont présentés, suivis des premiers résultats dus à son exploitation.

Mots-clefs

Structure nucléaire, N-Corps, interaction effective de Gogny, QRPA, HFB, excitation multipolaire, probabilité de transition

Title

Description of excited states in the nucleus using the QRPA and the Gogny interaction

Abstract

This thesis presents three aspects centered around the QRPA (Quasiparticle Random Phase Approximation) .

The first consists in the use of an axial code to confront computed data with experimental results and to feed a microscopic reaction code. This step is a chance to analyse low-energy spectroscopy (few tens of MeV) of some nuclei, and more precisely (but not exclusively) the tin isotopic chain ($Z=50$). The second one relies on the improvement of the formalism to calculate multipolar electromagnetic transition operators, and a method to consolidate the computation of these operators, allowing to ease the programming by unifying the code for different multipolarities. Finally, in order to overcome the axial symmetry constraint, a new triaxial code has been developed. Its assets and development are presented, followed by the first batch of results.

Keywords

Nuclear structure, many-body, Gogny effective interaction, QRPA, HFB, multipolar excitation, transition probability