

Chapitre 2

Les corrélations d'appariement nucléaire

L'appariement se trouve au cœur du noyau atomique, et en général dans les problèmes quantiques à N corps. L'importance des corrélations d'appariement en théorie de la structure nucléaire sont responsables d'un certain nombre des phénomènes comme la stabilité du noyau pair-pair par rapport aux noyaux impairs. L'existence d'un gap entre l'état fondamental et les états excités dans les noyaux.

La notion de l'énergie d'appariement est apparue des les premiers calculs de l'énergie de liaison du noyau.

En effet dans l'étude systématique des masses A, on observe les effets appelés pair-pair. En comparant les noyaux impair-impair, Z (impair) et N (impair) avec leurs voisins pair-pair, on aboutit (en moyenne) avec les relations suivantes :

$$E(N_{\text{impair}}) - E(\text{pair} - \text{pair}) = \Delta_n$$

$$E(Z_{\text{impair}}) - E(\text{pair} - \text{pair}) = \Delta_p$$

$$E(\text{impair-impair}) - E(\text{pair-pair}) = \Delta_n + \Delta_p - E_{np}$$

où :

$$\Delta_n \simeq \Delta_p = \frac{12}{\sqrt{A}} \text{Mev.}$$

$$E_{np} \simeq \frac{20}{A} \text{Mev.}$$

Sont déterminées de manière empirique.

D'autre part, la formule semi-empirique de masse pour l'énergie de liaison de noyau s'écrit :

$$E(A, Z) = a_v A - a_s A^{\frac{2}{3}} - a_c \frac{Z^2}{A^{\frac{2}{3}}} - a_a \frac{(N - Z)^2}{A} + P(N, Z) \quad (2.1)$$

Le terme P (N, Z) est un terme quantique d'énergie d'appariement entre les nucléons, soit :

$-\Delta$: pour les noyaux impair-impair.

0 : pour les noyaux impair (A impair).

Δ : pour les noyaux pair-pair.

Avec : $\Delta = \frac{12}{\sqrt{A}}$, et le terme E_{np} étant négligé.

2.1 Hamiltonien en seconde quantification

Soit un système constitué de n nucléons, N neutrons et Z protons, et on considère les deux types de nucléons comme deux systèmes indépendants, c'est-à-dire que l'on néglige les interactions neutron-proton. L'hamiltonien en seconde quantification de ce système est donné par [2], [3] :

$$H = H_0 + V \quad (2.2)$$

où H_0 , est le champ moyen du modèle à particule indépendantes, il définit une base de représentation pour les états sur lesquels il est diagonale et s'écrit dans le formalisme de la seconde quantification :

$$H_0 = \sum_v \varepsilon_v a_v^+ a_v \quad (2.3)$$

où a_v^+ et a_v représentent les opérateurs de création et d'annihilation des particules à l'état $|v\rangle$.

Il satisfont aux règles d'anti commutation des fermions :

$$\{a_v^+, a_\ell^+\} = \{a_v, a_\ell\} = 0 \quad (2.4)$$

et :

$$\{a_\nu^+, a_\ell\} = a_\nu^+ a_\ell + a_\ell a_\nu^+ = \delta_{\nu\ell} \quad (2.5)$$

L'hamiltonien réel H diffère de H_0 , par le terme V représentant l'interaction résiduelle sur le même bas et dans l'hypothèse d'une interaction à deux corps on peut écrire :

$$V = \frac{1}{4} \sum_{klmn} \langle k\ell | V | mn \rangle a_k^+ a_\ell^+ a_n a_m \quad (2.6)$$

où les quantités $\langle k\ell | V | mn \rangle$, sont des éléments de matrice antisymétriques de l'interaction résiduelle V que l'on suppose invariant par rotation et par renversement du sens du temps, ce qui entraîne :

$$\langle k\ell | V | mn \rangle = s_k s_\ell s_m s_n \langle -m - n | V | -k - \ell \rangle = \langle \tilde{m}\tilde{n} | V | \tilde{k}\tilde{\ell} \rangle \quad (2.7)$$

où l'on not par : $|\tilde{k}\rangle = s_k |k\rangle$

avec $|\tilde{k}\rangle$ désigne l'état reversé par rapport au sens du temps de $|k\rangle$, s_k étant le facteur de phase et $\varepsilon_k = \varepsilon_{\tilde{k}}$.

2.1.1 Force d'appariement

Pour rendre compte de l'effet d'appariement, Belyaev a introduit la notion d'interaction résiduelle entre deux états renversés l'un de l'autre par rapport au sens du temps.

Cette force est définie par ses éléments de matrice :

$$\langle k\ell | V | mn \rangle = -4G \delta_{k\tilde{\ell}} \delta_{m\tilde{n}} \quad (2.8)$$

où G est une constante positive appelée la constante d'appariement.

2.1.2 Hamiltonien du système

Pour étudier l'effet d'une telle interaction, on considère pour chaque type de nucléons (neutrons ou protons), l'hamiltonien de l'expression (2.2) s'écrit comme suit :

$$\begin{aligned}
H &= \sum_{\nu} \varepsilon_{\nu} a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu} + \frac{1}{4} (-4G \delta_{kl} \delta_{m\tilde{n}}) a_k^{\dagger} a_l^{\dagger} a_n a_m \\
&= \sum_{\nu \rangle 0} \varepsilon_{\nu} (a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu} + a_{\tilde{\nu}}^{\dagger} a_{\tilde{\nu}}) - G \sum_{km \rangle 0} a_k^{\dagger} a_k^{\dagger} a_m a_{\tilde{m}} \\
&= \sum_{\nu \rangle 0} \varepsilon_{\nu} (a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu} + a_{\tilde{\nu}}^{\dagger} a_{\tilde{\nu}}) - G \sum_{\nu\mu \rangle 0} a_{\nu}^{\dagger} a_{\tilde{\nu}}^{\dagger} a_{\tilde{\mu}} a_{\mu}
\end{aligned} \tag{2.9}$$

Cette hamiltonien doit décrire un système de n particules et doit donc commuter avec l'opérateur nombre de particules N :

$$N = \sum_{\nu \rangle 0} (a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu} + a_{\tilde{\nu}}^{\dagger} a_{\tilde{\nu}}) \tag{2.10}$$

Il s'agit donc de déterminer les états $|\varphi\rangle$, qui sont à la fois fonction propres de H et N .

Ce problème n'admet pas la solution exacte simple dans le cas général. Il a cependant été résolu approximativement par Bardeen- Cooper et Schiffer (BCS) dans la théorie de la supraconductivité.

2.2 Théorie BCS

La théorie BCS est introduite par Bardeen-Cooper et Schrieffer, pour décrire la supraconductivité dans les matériaux. En physique nucléaire, cette théorie est utilisée pour étudier les phénomènes d'appariement, dans lesquels les recouvrements des fonctions d'onde des deux nucléons appariés sont pris en considération.

Dans la théorie BCS, les fonctions BCS sont fonctions propres de H , mais le nombre

de particules n'est conservé qu'en moyenne.

$$\langle BCS | N | BCS \rangle = n_0 \quad (2.11)$$

où n_0 est le nombre réel de particules de système.

On tient compte de cette contrainte en introduisant un paramètre de Lagrange λ , et en minimisant la valeur moyenne de l'hamiltonien auxiliaire :

$$\hat{H} = H - \lambda N \quad (2.12)$$

En fait le λ représente le potentiel chimique

Un état $|BCS\rangle$ est défini à partir du vide $|0\rangle$ par :

$$|BCS\rangle = \prod_{i>0} (u_i + v_i \alpha_i^+ \alpha_{\tilde{i}}^+) \quad (2.13)$$

où les orbitales i et \tilde{i} sont reliées par une opération de renversement du sens du temps, et α_i^+ est l'opérateur de création d'un nucléon dans l'orbitale i . La notation $|i\rangle$ indique que le produit court seulement sur un membre pour chaque paire BCS.

2.3 Transformation de Bogoliubov-Valatin

Pour tenir compte des effets d'appariement dans le noyau, on doit considérer un état à N corps plus général qu'un déterminant de Slater. Pour cela, on utilise la transformation généralisé de Bogoliubov-Valatin.

Dans le but de minimiser \hat{H} , Bogliubov et Valatin ont défini les opérateurs α_v^+ et α_v qui sont combinaisons linéaires des opérateurs de création et d'annihilation de vrai particules :

$$\begin{cases} \alpha_v = u_v a_v - v_v a_{\tilde{v}}^+ \\ \alpha_v^+ = u_v a_{\tilde{v}}^+ - v_v a_v \end{cases} \quad (2.14)$$

La quasi-particule créée par a_v^+ est une vraie particule avec une amplitude de probabilité

u_ν et un vrai trou avec une amplitude de probabilité v_ν . Les paramètres v_ν et u_ν sont des nombres positifs et satisfont aux conditions :

$$u_\nu = u_{\tilde{\nu}} \text{ et } v_\nu = v_{\tilde{\nu}} \quad \forall \nu \quad (2.15)$$

Ce qui signifie que l'état $|\tilde{\nu}\rangle$, est occupé ou inoccupé avec la même probabilité que l'état $|\nu\rangle$. D'autre part, les états symétriques $|\nu \dots \omega\rangle$, peuvent être construits à partir d'un état $|0\rangle$ qu'on appelle le vide des opérateurs de création α_ν^+ . On fabrique des états à une, deux, ..., N particules, en appliquant au vide un, deux, ..., N opérateurs de création $|0\rangle$ vide.

$a_\nu^+ |0\rangle$ état à une particule.

$a_\nu^+ a_\mu^+ |0\rangle$ état à deux particules.

$a_\nu^+ a_\mu^+ \dots a_\omega^+ |0\rangle$ état à N particules.

L'espace qui contient le vide et l'ensemble de ces derniers d'états s'appelle l'espace de Fock. On peut écrire :

$$|\nu \mu \dots \omega\rangle = a_\nu^+ a_\mu^+ \dots a_\omega^+ |0\rangle \quad (2.16)$$

Pour cela, le vide satisfait à l'équation :

$$a_\nu |0\rangle = 0, \quad \langle 0 | a_\nu^+ = 0 \quad (2.17)$$

Par ailleurs, les opérateurs α_ν^+ et α_ν étant encore des opérateurs de création et d'annihilation de fermions, on a :

$$\{\alpha_k, \alpha_l\} = \{\alpha_k^+, \alpha_l^+\} = 0 \quad (2.18)$$

et

$$\begin{aligned}
\{\alpha_k^+, \alpha_l\} &= \delta_{kl} \\
&= \left\{ u_k \alpha_k^+ - v_k \alpha_{\tilde{k}}, u_l \alpha_l - v_l \alpha_{\tilde{l}} \right\} \\
&= (u_k^2 + v_k^2) \delta_{kl}
\end{aligned} \tag{2.19}$$

Ce qui entraine à la condition de normalisation :

$$u_k^2 + v_k^2 = 1 \tag{2.20}$$

Ce qui signifie que le transformation est unitaire, ou encore que la somme de probabilité d'occupation et d'inoccupation d'un état $|v\rangle$ ou $|\tilde{v}\rangle$ est égale à l'unité.

2.3.1 Transformation inverse de Bogoliubov-Valatin

Dans le cadre de minimisé H b-v ne trouve pas une solution dans le cas des quasi particule (langage mathématique) alors ils ont fait une petite transformation pour trouve la solution de H simplifier ils sont ajouté un paramètre dans les dernières équations après faire ses calcule

Sachant que :

$$\begin{aligned}
\alpha_v &= u_v a_v - v_v a_{\tilde{v}}^+ \\
\alpha_v^+ &= u_v a_v^+ - v_v a_{\tilde{v}}
\end{aligned}$$

Il vient :

$$\alpha_{\tilde{v}}^+ = u_v a_{\tilde{v}}^+ + v_v a_v$$

d'ou :

$$v_v \alpha_{\tilde{v}}^+ = v_v (u_v a_{\tilde{v}}^+ + v_v a_v) = v_v u_v a_{\tilde{v}}^+ + v_v^2 a_v \tag{2.21}$$

$$u_v \alpha_v = u_v (u_v a_v - v_v a_{\tilde{v}}^+) = u_v^2 a_v - u_v v_v a_{\tilde{v}}^+ \tag{2.22}$$

Et sommant les deux équations (2.21) et (2.22) terme à terme, il vient :

$$u_\nu \alpha_\nu + v_\nu \alpha_\nu^+ = u_\nu^2 a_\nu - u_\nu v_\nu a_\nu^+ + v_\nu u_\nu a_\nu^+ + v_\nu^2 a_\nu = (u_\nu^2 + v_\nu^2) a_\nu \quad (2.23)$$

La transformation inverse s'écrit donc :

$$\begin{aligned} a_\nu &= u_\nu \alpha_\nu + v_\nu \alpha_\nu^+ \\ a_\nu^+ &= u_\nu \alpha_\nu^+ + v_\nu \alpha_\nu \end{aligned} \quad (2.24)$$

On peut donc définir une nouvelle représentation appelée "représentation quasi particule" dont le vide est noté $|BCS\rangle$ ou $|0\rangle$, sera définie par l'équation :

$$\langle BCS | \alpha_\nu^+ = 0, \quad \alpha_\nu | BCS \rangle = 0 \quad , \forall \nu$$

2.4 Equation de gap

On diagonalise approximativement l'hamiltonien (2.9), en le linearisant par l'utilisation du théorème de Wick. Les paramètres u_ν et v_ν sont choisis de manière à minimiser la valeur moyenne de l'hamiltonien \hat{H} calculée sur état $|BCS\rangle$ et on exprime \hat{H} en représentation quasi particule.

$$\begin{aligned} \hat{H} &= H - \lambda N \\ &= \sum_{\nu \geq 0} \varepsilon_\nu (a_\nu^+ a_\nu + a_\nu^+ a_\nu) - G \sum_{\nu, \mu \geq 0} a_\nu^+ a_\nu^+ a_\mu a_\mu - \lambda \sum_{\nu \geq 0} (a_\nu^+ a_\nu + a_\nu^+ a_\nu) \\ &= \sum_{\nu \geq 0} (\varepsilon_\nu - \lambda) (a_\nu^+ a_\nu + a_\nu^+ a_\nu) - G \sum_{\nu, \mu \geq 0} a_\nu^+ a_\nu^+ a_\mu a_\mu \end{aligned} \quad (2.25)$$

En utilisant le théorème de Wick il vient :

$$\begin{aligned}
a_\nu^+ a_\nu &= a_\nu^+ a_\nu + : a_\nu^+ a_\nu : \\
a_{\tilde{\nu}}^+ a_{\tilde{\nu}} &= a_{\tilde{\nu}}^+ a_{\tilde{\nu}} + : a_{\tilde{\nu}}^+ a_{\tilde{\nu}} :
\end{aligned} \tag{2.26}$$

$$\begin{aligned}
a_\nu^+ a_{\tilde{\nu}}^+ a_{\tilde{\mu}} a_\mu &= a_\nu^+ a_{\tilde{\nu}}^+ a_{\tilde{\mu}} a_\mu - a_\nu^+ a_{\tilde{\mu}} a_{\tilde{\nu}}^+ a_\mu + a_\nu^+ a_\mu a_{\tilde{\nu}}^+ a_{\tilde{\mu}} \\
&+ a_\nu^+ a_{\tilde{\nu}}^+ : a_{\tilde{\mu}} a_\mu : - a_\nu^+ a_{\tilde{\mu}} : a_{\tilde{\nu}}^+ a_\mu : + a_\nu^+ a_\mu : a_{\tilde{\nu}}^+ a_{\tilde{\mu}} : \\
&+ : a_\nu^+ a_{\tilde{\nu}}^+ : a_{\tilde{\mu}} a_\mu - : a_\nu^+ a_{\tilde{\mu}} : a_{\tilde{\nu}}^+ a_\mu + : a_\nu^+ a_\mu : a_{\tilde{\nu}}^+ a_{\tilde{\mu}} \\
&+ : a_\nu^+ a_{\tilde{\nu}}^+ a_{\tilde{\mu}} a_\mu :
\end{aligned} \tag{2.27}$$

La théorie de Wick permet décrire l'hamiltonien \hat{H} sous la forme :

$$\hat{H} = E_0 + H_{11} + H_{22} + H_{resid} \quad \text{avec} \quad H_{resid} = H_{22} + H_{33} + H_{44} \tag{2.28}$$

où :

E_0 est une constante qui contient les termes entièrement contractés.

H_{11} contient les produits normaux de deux opérateurs α^+ et α

H_{22} contient les termes en $\alpha^+ \alpha^+$ et $\alpha \alpha$

H_{resid} (terme résiduel) représente le produit normal : $: a_\nu^+ a_{\tilde{\nu}}^+ a_{\tilde{\mu}} a_\mu :$

$$\begin{aligned}
E_0 &= \sum_{\nu > 0} (\varepsilon_\nu - \lambda) (v_\nu^2 + v_{\tilde{\nu}}^2) - G \sum_{\nu, \mu > 0} (u_\nu v_\nu u_\mu v_\mu + v_\nu^2 \delta_{\nu\mu} v_\nu^2 \delta_{\nu\mu}) \\
&= 2 \sum_{\nu > 0} (\varepsilon_\nu - \lambda) v_\nu^2 - G \sum_{\nu, \mu > 0} u_\nu v_\nu u_\mu v_\mu - G \sum_{\nu > 0} v_\nu^4 \\
&= 2 \sum_{\nu > 0} \left(\varepsilon_\nu - \lambda - \frac{1}{2} G v_\nu^2 \right) v_\nu^2 - G \sum_{\nu > 0} u_\nu^2 v_\nu^2 \\
E_0 &= 2 \sum_{\nu > 0} \left(\varepsilon_\nu - \lambda - \frac{G}{2} v_\nu^2 \right) v_\nu^2 - \frac{\Delta^2}{G}
\end{aligned} \tag{2.29}$$

où l'on a posé :

$$\Delta = G \sum_{v>0} u_v v_v \quad (2.30)$$

qui mesure la demi-largeur du gap.

L'équation H_{11} s'écrit comme suit :

$$\begin{aligned} H_{11} &= \sum_{v>0} (u_v^2 \alpha_v^+ \alpha_v - v_v^2 \alpha_v^+ \alpha_v + u_v^2 \alpha_v^+ \alpha_v - v_v^2 \alpha_v^+ \alpha_v) - \\ &G \sum_{v\mu>0} \left[\begin{aligned} &-u_v v_v u_\mu v_\mu (\alpha_\mu^+ \alpha_\mu + \alpha_\mu^+ \alpha_\mu + v_v^2 \delta_{v\mu} (u_v^2 \alpha_v^+ \alpha_v - v_v^2 \alpha_v^+ \alpha_v)) \\ &-u_v v_v u_\mu v_\mu (\alpha_v^+ \alpha_v + \alpha_v^+ \alpha_v) + v_v^2 \delta_{v\mu} (u_v^2 \alpha_v^+ \alpha_v - v_v^2 \alpha_v^+ \alpha_v) \end{aligned} \right] \\ &= \sum_{v>0} (\varepsilon_v - \lambda) (u_v^2 - v_v^2) (\alpha_v^+ \alpha_v + \alpha_v^+ \alpha_v) - G \sum_{v\mu>0} \left[\begin{aligned} &v_v^2 \delta_{v\mu} (u_v^2 - v_v^2) (\alpha_v^+ \alpha_v + \alpha_v^+ \alpha_v) \\ &-2u_v v_v u_\mu v_\mu (\alpha_v^+ \alpha_v + \alpha_v^+ \alpha_v) \end{aligned} \right] \\ H_{11} &= \sum_{v>0} \left\{ (\varepsilon_v - \lambda) - G v_v^2 (u_v^2 - v_v^2) + 2G u_v v_v \sum_{\mu>0} u_\mu v_\mu \right\} (\alpha_v^+ \alpha_v + \alpha_v^+ \alpha_v) \end{aligned} \quad (2.31)$$

L'équation H_2 s'écrit comme suit :

$$\begin{aligned} H_2 &= \sum_{v>0} 2(\varepsilon_v - \lambda) u_v v_v (\alpha_v^+ \alpha_v^+ + \alpha_v \alpha_v) - G \sum_{v\mu>0} 2v_v^2 \delta_{v\mu} u_v v_v (\alpha_v^+ \alpha_v^+ + \alpha_v \alpha_v) \\ &+ u_v v_v (u_\mu^2 \alpha_\mu^+ \alpha_\mu - v_\mu^2 \alpha_\mu^+ \alpha_\mu) + u_\mu v_\mu (u_v^2 \alpha_v^+ \alpha_v^+ - v_v^2 \alpha_v \alpha_v) \\ H_2 &= \sum_{v>0} \left[2(\varepsilon_v - \lambda - G v_v^2) u_v v_v - G (u_v^2 - v_v^2) \sum_{\mu>0} u_\mu v_\mu \right] (\alpha_v^+ \alpha_v^+ + \alpha_v \alpha_v) \end{aligned} \quad (2.32)$$

L'expression de H_{11} s'écrit alors :

$$H_{11} = \sum_{v>0} \left\{ (\varepsilon_v - \lambda) - G v_v^2 (u_v^2 - v_v^2) + 2G u_v v_v \sum_{\mu>0} u_\mu v_\mu \right\} (\alpha_v^+ \alpha_v + \alpha_v^+ \alpha_v) \quad (2.33)$$

L'expression de H_{22} s'écrit :

$$H_{22} = \sum_{v>0} \left[2(\varepsilon_v - \lambda - G v_v^2) u_v v_v - G (u_v^2 - v_v^2) \sum_{\mu>0} u_\mu v_\mu \right] (\alpha_v^+ \alpha_v^+ + \alpha_v \alpha_v) \quad (2.34)$$

L'expression de H_{resid} s'écrit ;

$$H_{resid} = -G \sum_{\nu\mu>0} : a_\nu^+ a_{\bar{\nu}}^+ a_{\bar{\mu}} a_\mu : \quad (2.35)$$

On a alors :

$$\langle \hat{H} \rangle = E_0 = 2 \sum_{\nu>0} \left(\varepsilon_\nu - \lambda - \frac{G}{2} v_\nu^2 \right) v_\nu^2 - G \left(\sum_{\nu>0} u_\nu v_\nu \right)^2 \quad (2.36)$$

En néglige le terme v_ν^4 dans l'expression (2.29) on peut supposer que v_ν^4 est suffisamment petite, il vient :

$$E_0 = 2 \sum_{\nu>0} (\varepsilon_\nu - \lambda) v_\nu^2 - G \left(\sum_{\nu>0} u_\nu v_\nu \right)^2 \quad (2.37)$$

L'approximation des quasi particules indépendantes consiste a annuler le terme H_{22} et à négliger les termes résiduel.

L'hamiltonien auxilaree \hat{H} s'écrit alors :

$$\hat{H} = E_0 + \sum_{\nu>0} E_\nu (\alpha_\nu^+ \alpha_\nu + \alpha_{\bar{\nu}}^+ \alpha_{\bar{\nu}}) \quad (2.38)$$

où :

$$E_\nu = \sqrt{(\varepsilon_\nu - \lambda - G v_\nu^2)^2 + \Delta^2} \quad (2.39)$$

est l'énergie d'une quasi particule.

Ainsi, la condition de normalisation du nombre de particules s'écrit :

$$\begin{aligned}
n &= \langle BCS | N | BCS \rangle \\
n &= \langle BCS | \sum_v a_v^\dagger a_v | BCS \rangle = \langle BCS | \sum_{v>0} (\alpha_v^+ \alpha_v + \alpha_{\bar{v}}^+ \alpha_{\bar{v}}) | BCS \rangle \\
&= \langle BCS | \sum_{v>0} [(u_v \alpha_v^+ + v_v a_{\bar{v}}) (u_v \alpha_v + v_v a_{\bar{v}}^\dagger) + (u_v \alpha_{\bar{v}}^+ - v_v a_v) (u_v \alpha_{\bar{v}} - v_v a_v^\dagger)] | BCS \rangle \\
&= \langle BCS | \sum_{v>0} v_v^2 (\delta_{\bar{v}v} - a_{\bar{v}}^+ \alpha_{\bar{v}}) + v_v^2 (\delta_{vv} - a_v^+ a_v) | BCS \rangle \\
n &= \sum_{v>0} 2v_v^2 \tag{2.40}
\end{aligned}$$

La valeur moyenne de \hat{H} s'écrit alors sous la forme :

$$\begin{aligned}
\langle \hat{H} \rangle &= E_0 \\
&= 2 \sum_{v>0} \left(\varepsilon_v - \lambda - \frac{G}{2} v_v^2 \right) v_v^2 - G \left(\sum_{v>0} u_v v_v \right)^2 \tag{2.41}
\end{aligned}$$

On choisit maintenant u_v et v_v de manière à minimiser E_0 d'une part, et de façon à ce que la valeur moyenne de N soit égale à n_0 d'autre part, on a donc :

$$\frac{\partial E_0}{\partial u_v} = \frac{\partial E_0}{\partial v_v} = 0$$

Si l'on dérive l'expression de E_0 (??) par rapport à v_v et en tenant compte de la définition de Δ , on obtient :

$$4 \left(\varepsilon_v - \lambda - G v_v^2 \right) v_v - 2\Delta \left(\frac{\partial u_v}{\partial v_v} v_v + u_v \right) = 0 \tag{2.42}$$

on a :

$$v_v^2 + u_v^2 = 1 \Rightarrow 2u_v \partial u_v = -2v_v \partial v_v = \frac{\partial u_v}{\partial v_v} = \frac{-v_v}{u_v} \tag{2.43}$$

On remplace l'expression (??) dans l'expression (??) on trouve :

$$4(\varepsilon_v - \lambda - Gv_v^2)v_v - 2\Delta\left(\frac{-v_v^2}{u_v} + u_v\right) = 0 \quad (2.44)$$

On multiplie l'équation (??) en u_v , cette dernière expression devient alors :

$$4u_v v_v (\varepsilon_v - \lambda - Gv_v^2) - 2\Delta (u_v^2 - v_v^2) = 0 \quad (2.45)$$

Pour résoudre l'équation (??), posons le changement de variables suivant :

$$u_v = \cos \theta_v$$

$$v_v = \sin \theta_v$$

puisque $v_v^2 + u_v^2 = 1$

L'expression (??) devient alors :

$$(\varepsilon_v - \lambda - Gv_v^2) \sin 2\theta_v = \Delta \cos 2\theta_v \quad (2.46)$$

ou bien

$$\tan 2\theta_v = \frac{\Delta}{\varepsilon_v - \lambda - Gv_v^2}$$

On carré expression (2.46) trouve alors :

$$\begin{aligned} (\varepsilon_v - \lambda - Gv_v^2)^2 \sin^2 2\theta_v &= \Delta^2 \cos^2 2\theta_v \\ \Leftrightarrow (\varepsilon_v - \lambda - Gv_v^2)^2 \sin^2 2\theta_v &= \Delta^2 (1 - \sin^2 2\theta_v) \\ &= [(\varepsilon_v - \lambda - Gv_v^2) + \Delta^2]^2 \sin^2 2\theta_v = \Delta^2 \end{aligned}$$

Sachant que :

$$\begin{aligned}\sin 2\theta_v &= 2u_v v_v \\ &= \frac{\Delta}{\sqrt{(\varepsilon_v - \lambda - Gv_v^2)^2 + \Delta^2}}\end{aligned}\quad (2.47)$$

et

$$\begin{aligned}u_v^2 - v_v^2 &= \cos^2 \theta_v - \sin^2 \theta_v \\ &= \cos 2\theta_v = \sqrt{1 - \sin^2 2\theta_v} \\ &= \sqrt{1 - \frac{\Delta^2}{(\varepsilon_v - \lambda - Gv_v^2)^2 + \Delta^2}} \\ &= \frac{\varepsilon_v - \lambda - Gv_v^2}{\sqrt{(\varepsilon_v - \lambda - Gv_v^2)^2 + \Delta^2}}\end{aligned}\quad (2.48)$$

On obtient les expressions des probabilités d'innoculation u_v et d'occupation v_v suivantes :

$$u_v^2 = \frac{1}{2} \left\{ 1 \pm \frac{\varepsilon_v - \lambda - Gv_v^2}{\sqrt{(\varepsilon_v - \lambda - Gv_v^2)^2 + \Delta^2}} \right\} \quad (2.49)$$

$$v_v^2 = \frac{1}{2} \left\{ 1 \pm \frac{\varepsilon_v - \lambda}{\sqrt{(\varepsilon_v - \lambda)^2 + \Delta^2}} \right\} \quad (2.50)$$

De même la condition de conservation du nombres de particules, s'écrit :

$$n = \sum_{v>0} \left\{ 1 - \frac{\varepsilon_v - \lambda - Gv_v^2}{\sqrt{(\varepsilon_v - \lambda - Gv_v^2)^2 + \Delta^2}} \right\} \quad (2.51)$$

Les équations de gap sont alors :

$$\Delta = G \sum u_v v_v \quad (2.52)$$

L'énergie du système est définie par :

$$\begin{aligned}
 E_{BCS} &= \langle BCS | H | BCS \rangle \\
 &= \langle BCS | \left(\hat{H} + \lambda N \right) | BCS \rangle \\
 &= \langle BCS | \hat{H} | BCS \rangle + \lambda \langle BCS | N | BCS \rangle \\
 &= E_0 + 2\lambda \sum_{\nu > 0} v_\nu^2
 \end{aligned} \tag{2.53}$$

En remplaçant l'expression E_0 dans cette dernière, on trouve :

$$E_{BCS} = 2 \sum_{\nu > 0} \varepsilon_\nu v_\nu^2 - G \left(\sum_{\nu > 0} u_\nu v_\nu \right)^2 \tag{2.54}$$

On remplace l'expression(2.52) dans cette dernière expression, l'énergie du système devient :

$$E_{BCS} = 2 \sum_{\nu > 0} \varepsilon_\nu v_\nu^2 - \frac{\Delta^2}{G} \tag{2.55}$$

2.5 Fonction d'onde BCS

2.5.1 L'état BCS

Dans l'approximation des quasi particules indépendantes l'état fondamental $|\psi\rangle = |BCS\rangle$ du système de particules est le vide de quasi particules. Il peut être obtenu à partir du vrai vide de particules $|0\rangle$ par élimination dans ce dernier de toutes les quasi particules.

On peut donc écrire :

$$|\psi\rangle = |BCS\rangle = \prod_{\nu > 0} \alpha_\nu \alpha_{\bar{\nu}} |0\rangle \tag{2.56}$$

En utilisant la transformation de Bogoliubov-Valatin inverse, l'expression (2.56) devient :

$$\begin{aligned}
|\psi\rangle &= \prod_{v>0} (u_v a_v - v_v a_{\bar{v}}^+) (u_v a_{\bar{v}} + v_v a_v^+) |0\rangle \\
&= \prod_{v>0} (u_v^2 a_v a_{\bar{v}} + u_v v_v a_v a_v^+ - v_v u_v a_{\bar{v}}^+ a_{\bar{v}} - v_v^2 a_{\bar{v}}^+ a_v^+) |0\rangle \\
&= \prod_{v>0} [u_v v_v (\delta_{vv} - a_v^+ a_v) - v_v^2 a_{\bar{v}}^+ a_v^+] |0\rangle \\
|\psi\rangle &= \prod_{v>0} (u_v v_v - v_v^2 a_{\bar{v}}^+ a_v^+) |0\rangle = \prod_{v>0} v_v (u_v + v_v a_v^+ a_{\bar{v}}^+) |0\rangle \tag{2.57}
\end{aligned}$$

En tenant compte du fait que l'état $|\psi\rangle$ ou $|BCS\rangle$ doit être orthonormalisé soit :

$$\begin{aligned}
\langle\psi|\psi\rangle &= \prod_{v>0} v_v^2 \langle 0| (u_v + v_v a_{\bar{v}} a_v) (u_v + v_v a_v^+ a_{\bar{v}}^+) |0\rangle \\
&= \prod_{v>0} v_v^2 \langle 0| (u_v^2 + u_v a_v^+ a_{\bar{v}}^+ + v_v u_v a_{\bar{v}} a_v + v_v^2 a_{\bar{v}} a_v a_v^+ a_{\bar{v}}^+) |0\rangle \\
\langle\psi|\psi\rangle &= \prod_{v>0} v_v^2 \tag{2.58}
\end{aligned}$$

Après l'orthonormalisation, la fonction d'onde s'écrit comme :

$$|\psi\rangle = \prod_{v>0} (u_v + v_v a_v^+ a_{\bar{v}}^+) |0\rangle \tag{2.59}$$

On voit bien dans cette dernière expression que les particules sont regroupées par paires. D'autre part, on constate que l'état $|BCS\rangle$ n'est pas état propre de l'opérateur nombre de particules N , car cet état ne conduit pas à un nombre défini de particules.

Ceci signifie que l'état $|BCS\rangle$ peut s'écrire comme suit :

$$|\psi\rangle = a_0 |N = 0\rangle + a_2 |N = 2\rangle + a_4 |N = 4\rangle + \dots \tag{2.60}$$

L'état $|BCS\rangle$ est donc une superposition d'états correspondant à différents nombre de paires. Remarquons d'autre part que l'état $|BCS\rangle$ tel que nous l'avons écrit ne peut s'ap-

plier qu'à des noyaux pair-pairs puisqu'il ne peut contenir que de paires de particules.

2.5.2 Valeur moyenne de l'opérateur nombre de particules

Dans le but de mesurer les fluctuations du nombre de particules, calculons la valeur moyenne en commençant par calculer l'action de N sur l'état $|BCS\rangle$. Compte tenu (2.10) et (2.59), soit :

$$\begin{aligned} N|\psi\rangle &= \sum_{v>0} (\alpha_v^+ \alpha_v + \alpha_v^+ \alpha_{\bar{v}}) \prod_{j>0} (u_j + v_j a_j^+ a_j^+) |0\rangle \\ &= \sum_{v>0} \alpha_v^+ \alpha_v \prod_{j>0} (u_j + v_j a_j^+ a_j^+) |0\rangle + \sum_{v>0} \alpha_v^+ \alpha_{\bar{v}} \prod_{j>0} (u_j + v_j a_j^+ a_j^+) |0\rangle \end{aligned} \quad (2.61)$$

Calculons le premier terme :

$$\begin{aligned} \sum_{v>0} \alpha_v^+ \alpha_v \prod_{j>0} (u_j + v_j a_j^+ a_j^+) |0\rangle &= \sum_{v>0} \alpha_v^+ \alpha_v (u_v + v_v a_v^+ a_v^+) |0\rangle \prod_{j>0} (u_j + v_j a_j^+ a_j^+) |0\rangle \\ &= \sum_{v>0} (u_v \alpha_v^+ \alpha_v + v_v a_v^+ a_v \alpha_v^+ \alpha_v^+) |0\rangle \prod_{j>0} (u_j + v_j a_j^+ a_j^+) |0\rangle \\ &= \sum_{v>0} v_v a_v^+ (\delta_{v\bar{v}} - a_v^+ a_v) \alpha_v^+ |0\rangle \prod_{j>0} (u_j + v_j a_j^+ a_j^+) |0\rangle \\ &= \sum_{v>0} v_v (a_v^+ \alpha_v^+ + a_v^+ a_v^+ a_v \alpha_v^+) |0\rangle \prod_{j>0} (u_j + v_j a_j^+ a_j^+) |0\rangle \\ &= \sum_{v>0} v_v (a_v^+ \alpha_v^+ + a_v^+ a_v^+ (\delta_{v\bar{v}} - \alpha_v^+ a_v)) |0\rangle \prod_{j>0} (u_j + v_j a_j^+ a_j^+) |0\rangle \\ &= \sum_{v>0} v_v a_v^+ \alpha_v^+ \prod_{j>0} (u_j + v_j a_j^+ a_j^+) |0\rangle \end{aligned} \quad (2.62)$$

Calculon le deuxième terme :

$$\begin{aligned}
\sum_{v>0} \alpha_v^+ \alpha_{\bar{v}} \prod_{j>0} (u_j + v_j a_j^+ a_{\bar{j}}^+) |0\rangle &= \sum_{v>0} \alpha_v^+ \alpha_{\bar{v}} (u_v + v_v a_v^+ a_{\bar{v}}^+) |0\rangle \prod_{j>0} (u_j + v_j a_j^+ a_{\bar{j}}^+) |0\rangle \\
&= \sum_{v>0} (u_v \alpha_v^+ \alpha_{\bar{v}} + v_v a_v^+ a_{\bar{v}} a_v^+ a_{\bar{v}}^+) |0\rangle \prod_{j>0} (u_j + v_j a_j^+ a_{\bar{j}}^+) |0\rangle \\
&= \sum_{v>0} v_v a_v^+ (\delta_{v\bar{v}} - a_v^+ a_{\bar{v}}) a_{\bar{v}}^+ |0\rangle \prod_{j>0} (u_j + v_j a_j^+ a_{\bar{j}}^+) |0\rangle \\
&= - \sum_{v>0} v_v (a_v^+ a_v^+ a_{\bar{v}} a_{\bar{v}}^+) |0\rangle \prod_{j>0} (u_j + v_j a_j^+ a_{\bar{j}}^+) |0\rangle \\
&= - \sum_{v>0} v_v a_v^+ a_v^+ (\delta_{\bar{v}v} - a_{\bar{v}}^+ a_{\bar{v}}) |0\rangle \prod_{j>0} (u_j + v_j a_j^+ a_{\bar{j}}^+) |0\rangle \\
&= \sum_{v>0} v_v a_v^+ \alpha_{\bar{v}}^+ \prod_{j>0} (u_j + v_j a_j^+ a_{\bar{j}}^+) |0\rangle \tag{2.63}
\end{aligned}$$

Alors :

$$N |\psi\rangle = 2 \sum_{v>0} v_v a_v^+ \alpha_{\bar{v}}^+ \prod_{j>0} (u_j + v_j a_j^+ a_{\bar{j}}^+) |0\rangle \tag{2.64}$$

On a :

$$\begin{aligned}
\langle \psi | &= \langle 0 | \prod_{j>0} (u_j + v_j a_{\bar{j}} a_j) \\
\langle \psi | N | \psi \rangle &= \langle 0 | \prod_{j>0} (u_j + v_j a_{\bar{j}} a_j) 2 \sum_{v>0} v_v a_v^+ \alpha_{\bar{v}}^+ \prod_{j>0} (u_j + v_j a_j^+ a_{\bar{j}}^+) |0\rangle \tag{2.65}
\end{aligned}$$

La valeur moyenne de l'opérateur nombre de particules s'écrit :

$$\langle \psi | N | \psi \rangle = 2 \sum_{v>0} v_v^2 \tag{2.66}$$

2.5.3 Les états excités

Un noyau atomique peut être excité dans un état vibrationnel qui est indépendant de l'appariement des nucléons, comme il peut être excité dans un état rotationnel dans le cas non sphérique. En dehors de ces deux cas, on peut également avoir des états excités

par brisure des paires.

Considérons dans un premier temps, l'état excité à une quasi particules, il est donné par :

$$|v\rangle = |\nu_v\rangle = \alpha_v^+ |\psi\rangle \quad (2.67)$$

$$\begin{aligned} |v\rangle &= (u_\nu a_\nu^+ - v_\nu a_{\bar{\nu}}) |0\rangle \prod_{j>0} (u_j + v_j a_j^+ a_j^+) |0\rangle \\ &= (u_\nu a_\nu^+ - v_\nu a_{\bar{\nu}}) (u_\nu + v_\nu a_\nu^+ a_{\bar{\nu}}^+) \prod_{\substack{j>0 \\ j \neq \nu}} (u_j + v_j a_j^+ a_j^+) |0\rangle \\ &= (u_\nu^2 a_\nu^+ - u_\nu v_\nu a_\nu^+ a_{\bar{\nu}}^+ a_{\bar{\nu}}^+ - u_\nu v_\nu a_{\bar{\nu}} - v_\nu a_{\bar{\nu}} a_\nu^+ a_{\bar{\nu}}^+) |0\rangle \prod_{\substack{j>0 \\ j \neq \nu}} (u_j + v_j a_j^+ a_j^+) |0\rangle \\ &= a_\nu^+ \prod_{\substack{j>0 \\ j \neq \nu}} (u_j + v_j a_j^+ a_j^+) |0\rangle \end{aligned} \quad (2.68)$$

On remarque que l'état du système a un nombre impaire de particules dans l'équel une particule célibataire (in apparié) occupe l'état $|v\rangle$ du modèle à particule indépendante. Le reste des particules constituent un cœur à un nombre pair de particules, ces dernières étant rangées sous formes de paires sur les états du modèle à particules indépendantes.

L'état excité à deux quasi particules appariées est donné par :

$$\begin{aligned} |v\bar{v}\rangle &= |\psi_{v\bar{v}}\rangle \\ &= \alpha_v^+ \alpha_{\bar{v}}^+ |\psi\rangle \\ &= (u_\nu a_\nu^+ - v_\nu a_{\bar{\nu}}) (u_{\bar{\nu}} a_{\bar{\nu}}^+ + v_{\bar{\nu}} a_\nu) \prod_{j>0} (u_j + v_j a_j^+ a_j^+) |0\rangle \\ &= (u_\nu a_\nu^+ - v_\nu a_{\bar{\nu}}) (u_{\bar{\nu}} a_{\bar{\nu}}^+ + v_{\bar{\nu}} a_\nu) (u_\nu + v_\nu a_\nu^+ a_{\bar{\nu}}^+) \prod_{\substack{j>0 \\ v \neq j}} (u_j + v_j a_j^+ a_j^+) |0\rangle \\ &= (-v_\nu + u_\nu a_\nu^+ a_{\bar{\nu}}^+) \prod_{\substack{j>0 \\ v \neq j}} (u_j + v_j a_j^+ a_j^+) |0\rangle \end{aligned} \quad (2.69)$$

L'état excité à deux quasi-particules indépendantes s'écrit :

$$\begin{aligned}
|v\tilde{\mu}\rangle &= |\Psi_{v\tilde{\mu}}\rangle = \alpha_v^+ \alpha_{\tilde{\mu}}^+ |\Psi\rangle \\
&= (u_v \alpha_v^+ - v_v \alpha_{\tilde{v}}^+) (u_{\mu} \alpha_{\tilde{\mu}}^+ + v_{\mu} \alpha_{\mu}) \prod_{j>0} (u_j + v_j a_j^+ a_j^+) |0\rangle \\
&= (u_v \alpha_v^+ - v_v \alpha_{\tilde{v}}^+) (u_{\mu} \alpha_{\tilde{\mu}}^+ + v_{\mu} \alpha_{\mu}) (u_v + v_v a_v^+ a_v^+) (u_{\mu} + v_{\mu} a_{\mu}^+ a_{\mu}^+) \prod_{j>0} (u_j + v_j a_j^+ a_j^+) |0\rangle \\
&= (u_v^2 a_v^+ - v_v^2 a_{\tilde{v}} a_v^+ a_v^+) |0\rangle (u_{\mu}^2 a_{\tilde{\mu}}^+ - v_{\mu}^2 a_{\mu} a_{\mu}^+ a_{\mu}^+) |0\rangle \prod_{j>0} (u_j + v_j a_j^+ a_j^+) |0\rangle \\
|v\tilde{\mu}\rangle &= ((u_v^2 + v_v^2) a_v^+) ((u_{\mu}^2 + v_{\mu}^2) a_{\tilde{\mu}}^+) |0\rangle \prod_{j>0} (u_j + v_j a_j^+ a_j^+) |0\rangle \\
&= a_v^+ a_{\tilde{\mu}}^+ \prod_{j>0} (u_j + v_j a_j^+ a_j^+) |0\rangle \tag{2.70}
\end{aligned}$$

Les énergies des états excités

L'énergie correspondante à l'état excité à une quasi particule est obtenue en calculant sur cet état, la valeur moyenne de H' qui se réduit en fait à celle de $E_0 + H_{11}$ soit :

$$\begin{aligned}
\langle \nu | H' | \nu \rangle &= \langle \nu | E_0 - H_{11} | \nu \rangle \\
&= \langle \nu | \left[E_0 + \sum_{k>0} a_k^+ a_k + a_{\tilde{k}}^+ a_{\tilde{k}} \right] a_k^+ | \nu \rangle \\
&= \langle \nu | \left[E_0 + \sum_{k>0} E_k \delta_{k\nu} \right] a_k^+ | \nu \rangle \\
&= E_0 + E_{\nu} \geq E_0 + \Delta \tag{2.71}
\end{aligned}$$

L'énergie correspondante à l'état excité à deux quasi particules indépendantes appariées

s'écrit :

$$\begin{aligned}
\langle v\tilde{v} | \hat{H} | v\tilde{v} \rangle &= \langle v\tilde{v} | (E_0 + H_{11}) | v\tilde{v} \rangle \\
&= \langle v\tilde{v} | \left[E_0 + \sum_{k>0} E_k \left(\alpha_k^+ \alpha_k + \alpha_{\bar{k}}^+ \alpha_{\bar{k}} \right) \right] \alpha_v^+ \alpha_{\bar{v}}^+ | \psi \rangle \\
&= \langle v\tilde{v} | \left[E_0 + 2 \sum_{k>0} \delta_{kv} E_k \right] \alpha_v^+ \alpha_{\bar{v}}^+ | \psi \rangle \\
&= E_0 + 2E_v \geq E_0 + 2\Delta
\end{aligned} \tag{2.72}$$

On remarque que pour avoir un état excité à une (respectivement deux) quasiparticule indépendantes, il faut fournir un minimum d'énergie égale à Δ (respectivement 2Δ).

Bibliographie

- [1] Roger D. Woods et David S. Saxon, « Diffuse Surface Optical Model for Nucleon-Nuclei Scattering », *Physical Review*, vol. 95, juillet 1954, p. 577-578 (DOI 10.1103/PhysRev.95.577).
- [2] P. Ring and P. Schuck, *The NuclearMany-Body Problem*, Springer, New York (1980).
- [3] S. G. Nilsson and I. Ragnarsson, *Shapes and Shells in Nuclear Structure*, Cambridge University Press (1995).