Contribution aux journées d'études sur la fission.
L'Alpe d'Huez, France, 6 - 10 Octobre 1980.
CEA - CONF 5478

LA DERIVATION DYNAMIQUE DU CHFMIN DE FISSION ET SES PROBLEMES

by

FR8102712

B.G. Giraud

DPh-T, CEA-CEN Saclay, BP N°2 à Gif-sur-Yvette 91190

Contribution aux journées d'études sur la fission, 6 au 10 Octobre 1930, l'Alpe d'Huez.

Résumé :

On rappelle qu'il est possible de changer arbitrairement le moment quadrupolaire d'une fonction d'onde sans en changer l'énergie. Il parait donc difficile de définir la barrière de fission par une théorie statique. Si on a recours à la seule théorie dynamique microscopique disponible, qui est la méthode de Hartree et Fock dépendante du temps, une autre difficulté se présente. Il faut en effet rendre le temps imaginaire pour tenir compte de l'effet tunnel. On envisage l'interprétation possible du chemin en temps imaginaire comme chemin de fission.

I Conception traditionnelle

Dans tout cet exposé nous nous intéressons exclusivement à la théorie *microscopique* du chemin de fission. Nous entendons par là qu'on suppose connu par exemple le Hamiltonien de l'U238, $\mathcal{H} = \Sigma\, \mathcal{T}_i + \Sigma\, \mathcal{V}_{ij}$, et qu'on veut représenter à chaque instant la fonction d'onde du noyau en fission par une fonction des coordonnées de tous les nucléons $\Psi(r_i,t)$, $i = 1,\ldots 238$.

Le plus souvent on se donne a priori, ou on dérive (d'un calcul de Hartree-Fock sous contrainte par exemple), une famille de fonctions d'onde $\Phi(r_i,\alpha\beta\ldots)$ qui dépendent de quelques paramètres $\alpha,\beta\ldots$ La fonction d'onde $\Psi(r_i,t)$, censée décrire le processus de fission, est alors déduite des Φ soit par combinaisons linéaires

$$\Psi(r_i,t) = \int d\alpha\, d\beta \quad f(\alpha\beta,t)\ \Phi(\bar{r}_i,\alpha\beta)\ , \qquad (I.1)$$

soit en rendant $\alpha,\beta\ldots$ dépendants du temps. En principe les équations de mouvement de f ou de $\alpha,\beta\ldots$ sont déduites de la connaissance de $\mathcal{H}$.

Quels que soient les détails de la théorie, l'élément essentiel à considérer est la surface d'énergie

$$\mathcal{E}(\alpha\,\beta\ldots) = \langle\Phi(.\alpha\beta)|\mathcal{H}|\Phi(.\alpha\beta)\rangle \ . \qquad \text{(I.2)}$$

Les vallées, cols et autres détails du paysage de cette surface d'énergie contrôlent en principe (avec les masses effectives) toute la dynamique.

En particulier, le premier paramètre α à considérer est le moment quadrupolaire de Φ, et le temps de vie est extrêmement sensible au comportement de $\mathcal{E}$ en fonction de α. *Nous allons montrer*[1-3] *que ce comportement est cependant très mal défini.*

En effet, ajoutons à Φ une petite composante ε d'une fonction d'onde en anneau $\overset{\circ}{\Phi}$ avec les propriétés suivantes. La densité de matière décrite par $\overset{\circ}{\Phi}$ doit être : 1) éloignée de celle décrite par Φ, 2) à faibles densités et gradients (diffuse), 3) ellipsoïdale. Alors on voit tout de suite que $\Phi + \varepsilon\overset{\circ}{\Phi}$ a la même énergie que Φ, mais un moment quadrupolaire arbitraire. La surface d'énergie est devenue plate, bien que ε joue le rôle de α.

Plus précisément, dans le calcul de l'énergie, $\overset{\circ}{\Phi}$ n'apporte aucun élément de matrice diagonal de $\mathcal{H}$, du fait de la 2e condition, et aucun élément de matrice avec Φ, à cause de la 1e condition. L'énergie ne change pas. Au contraire, les conditions 1) et 3) peuvent donner à $\overset{\circ}{\Phi}$ un moment quadrupolaire énorme, même après pondération par ε^2. Donc le paramètre ε détruit complètement le sens du paramètre α, sans coûter d'énergie.

On peut conclure de ce raisonnement que si la *dynamique* nucléaire exclue l'arrivée dans Ψ de composantes telles que $\overset{\circ}{\Phi}$, la théorie ne peut les exclure a priori. Mais dans ce cas il n'y a plus de barrière de fission bien définie. La théorie doit être reformulée dans un cadre dépendant du temps, car seule la condition initiale peut, éventuellement, orienter le système vers une telle exclusion. Tel est l'objet de la prochaine section.

II Recherche d'un chemin dynamique

Soit Φ_0 le déterminant de Slater, solution statique de Hartree-Fock de $\mathcal{H}$, qui décrit le (pseudo) fondamental de U238. Il se trouve que Φ_0 est un minimum local stable de Hartree-Fock, et prendre cette fonction d'onde pour point de départ de la théorie n'est pas une trop mauvaise approximation.

Le temps de vie de fusion spontanée est alors évidemment relié à la constante de décroissance exponentielle

$$\Gamma = -\lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} \log|\langle\Phi_o|\exp(-i\mathcal{H}T)|\phi_o\rangle|^2 \quad . \qquad \text{(II.1)}$$

Un calcul exact de l'élément de matrice de $\exp(-i\mathcal{H}T)$ étant évidemment impossible, on peut cependant utiliser la théorie des intégrales fonctionnelles avec déterminants de Slater[4)].

Pour cela, on cherche une solution de l'équation de Hartree et Fock dépendante du temps

$$\left[i\frac{\partial}{\partial t} - \mathcal{C} - \mathrm{Tr}\,\mathcal{V}\rho\right]\Phi(t) = 0 \quad , \qquad \text{(II.2)}$$

avec

$$\rho(r,r',t) = \sum_{\lambda=1}^{238} \varphi_\lambda^*(r,t)\varphi_\lambda(r',t) \quad , \qquad \text{(II.3)}$$

où les φ_λ sont les orbites occupées dans le déterminant $\Phi(t)$. Les conditions aux limites sont imposées par Φ_o

$$\Phi(r_i, -\frac{T}{2}) = \Phi_o(r_i), \qquad \text{(II.4a)}$$

$$\Phi^*(r_i, \frac{T}{2}) = \Phi_o^*(r_i). \qquad \text{(II.4b)}$$

On constate, ce qui sera utile par la suite, que

$$\Phi^*(r_i,t) = \Phi(r_i,-t) \qquad \text{(II.5)}$$

et donc que

$$\rho(r,r',t) = \sum_\lambda \varphi_\lambda(r,-t)\varphi_\lambda(r',t) \quad . \qquad \text{(II.6)}$$

Si on trouve une solution satisfaisante aux éqs. (II.2) à (II.4) alors on obtient l'estimation de phase stationnaire

$$\mathrm{Log}\langle\Phi_o|\exp(-i\mathcal{H}T)|\Phi_o\rangle \propto i\int_{-T/2}^{T/2} dt \int dr_i\; \Phi^*(r_i,t)\left[i\frac{\partial}{\partial t} - \mathcal{H}\right]\Phi(r_i,t) \qquad \text{(II.7)}$$

Malheureusement, du fait que Φ_o est une solution de Hartree et Fock, on n'obtient pour les éqs. (II.2) à (II.4) que la solution triviale $\Phi(t) = \Phi_o$ à une phase près dépendante du temps.

Sur la base d'un argument[5)] qui ne peut être discuté ici, on cherche alors une autre estimation d'action stationnaire, en résolvant ces équations en temps complexe. Pour cela on pose $t = i\tau$, ce qui donne

$$\left[\frac{\partial}{\partial\tau} - \mathcal{C} - \mathrm{Tr}\,\mathcal{V}_\rho\right]\Phi(\tau) = 0 \quad , \qquad \text{(II.8)}$$

avec ρ défini par l'éq. (II.6) ou, plus précisément

$$\rho(r,r',\tau) = \sum_\lambda \varphi_\lambda(r,-\tau)\varphi_\lambda(r,\tau) \, , \qquad \text{(II.9)}$$

et l'équivalent des conditions aux limites (II.4)

$$\Phi\left(r_i, -\frac{T}{2}\right) = \Phi_o(r_i) = \Phi\left(r_i, \frac{T}{2}\right) \quad . \qquad \text{(II.10)}$$

Des applications numériques sont en cours[5)] et des estimations de Γ sont alors tirées du nombre suivant, analogue au second membre de l'éq. (II.7)

$$\int_{-T/2}^{T/2} d\tau \int dr_i \; \Phi(r_i,-\tau)\left[\frac{\partial}{\partial\tau} - \mathcal{H}\right]\Phi(r_i,\tau) \quad .$$

L'état actuel de la théorie, du moins telle qu'elle est comprise par le présent auteur, ne permet pas encore de comprendre pleinement le passage de l'équation à temps réel, éq. (II.2), à celle à temps imaginaire, éq. (II.8). On peut toutefois étudier l'éq. (II.8) en tant que telle.

On sait d'abord que, puisque Φ_o est une solution statique de Hartree et Fock, il existe à l'éq. (II.8) la solution triviale $\Phi(\tau) = \Phi_o$ à une exponentielle du temps près. Cette solution n'est pas plus intéressante que la solution triviale obtenue à temps réel, mais elle indique que si on perturbe légèrement à $\tau = -\frac{T}{2}$ la condition initiale, alors la solution restera longtemps proche de Φ_o. Elle s'en éloignera brusquement quand $\tau \approx 0$, pour redevenir proche de Φ_0 presque aussitôt, jusqu'à $\tau = T/2$, si on a bien initié une solution périodique par perturbation.

La théorie fabrique donc une suite de déterminants de Slater $\Phi(\tau)$. Cette suite parait être une généralisation dynamique des fonctions $\Phi(\alpha)$ évoquées dans la section I. On peut provisoirement la considérer comme un chemin de fission.

III Discussion et conclusion

On vient de voir que la résolution de l'éq. (II.8) n'est pas triviale. Il faut choisir de mode de perturbation de Φ_0, et attendre longtemps avant de savoir si c'est une solution intéressante s'éloignant de Φ_0 avant d'y revenir, car cette solution commencera par rester longtemps proche de Φ_0. De plus l'évolution d'aller-retour sera rapide, donc numériquement délicate.

Enfin la relation de $\Phi(\tau)$ avec la conception traditionnelle reste à établir. En particulier, peut-on considérer $\langle\phi(\tau)|\mathcal{H}|\Phi(\tau)\rangle$ comme une surface d'énergie ? Peut-on également prendre τ comme coordonnée génératrice ?

Malgré ces questions encore en cours de résolution on peut estimer que l'équation de Hartree et Fock à temps imaginaire donne bien une première réponse au problème d'une théorie dynamique du chemin de fission.

Nous remercions avec plaisir les organisateurs de ce colloque pour l'occasion qui nous a été offerte de présenter la présente discussion.

Références

1) G. Fonte et G. Schiffrer, Nucl. Phys. A259 (1976) 20

2) W. H. Bassichis, M. R. Strayer et M. T. Vaughn, Nucl. Phys. A263 (1976) 379

3) B.G. Giraud, Cours à la 4e session d'études biennales de physique nucléaire t.2, C3, La Toussuire (1977), ed. E. El Baz, IPN Lyon

4) H. Orland, Méthodes mathématiques de la physique nucléaire, Collège de de France (1980), ed. B. Giraud et P. Quentin

5) S. Levit, J. W. Negele et Z. Paltiel, pretirage MIT CTP 781 ; J. W. Negele, Varenna lecture notes (1979) pretirage Saclay DPhT 79/125