

COMMISSARIAT A L'ENERGIE ATOMIQUE

CENTRE D'ETUDES NUCLEAIRES DE SACLAY

Service de Documentation

F91191 GIF SUR YVETTE CEDEX

CEA-CONF - - 8270

L3

Saclay Ph-T 85-181

DESCRIPTION THERMODYNAMIQUE DES NOYAUX EXCITES

par

Paul BONCHE

Service de Physique Théorique

CEA-Saclay

91191 Gif-sur-Yvette Cedex, France

Communication présentée à :

Joliot-Curie school on nuclear matter in all its states

Bombannes (France)

16-20 Sep 1985

DESCRIPTION THERMODYNAMIQUE DES NOYAUX EXCITES

par

Paul BONCHE

Service de Physique Théorique

CEA-Saclay

91191 Gif-sur-Yvette Cedex, France

Dans les collisions entre ions lourds aux énergies dites *Ganil*, ou *Sara*, on a pu mettre en évidence la formation de systèmes composites très excités. Si l'on traduit en température les énergies d'excitation ainsi obtenues, on obtient des températures de plusieurs MeV, typiquement 4 à 5 MeV, voire 6 MeV pour les systèmes les plus légers. Les études théoriques de ces systèmes font de plus en plus appel à des concepts de thermodynamique ou de physique statistique, ne serait-ce que par l'introduction de la température que l'on vient de mentionner.

Ce cours a donc pour but de présenter précisément les concepts de base de physique statistique qui sont sous-jacents dans la physique des ions lourds telle qu'on peut désormais la pratiquer au *Ganil* ou à *Sara*. Il ne s'agit pas tout d'abord de décrire les mécanismes de réactions qui amènent à la formation de systèmes composites susceptibles d'une description faite dans le cadre de la physique statistique, ni d'ailleurs de proposer une étude des mécanismes de désexcitation de ces systèmes par évaporation ou par fragmentation. Pour cela, nous renvoyons les lecteurs aux cours et séminaires appropriés de cette école (voir en particulier le cours de Babinet et le séminaire de Galin).

Le contenu du cours est réparti en trois grands chapitres. Le premier contient des rappels de mécanisme statistique et des éléments de thermodynamique nécessaires pour comprendre la mécanique quantique à température non nulle. Le second présente une étude dans le cadre nucléaire de la transition de phase liquide-gaz ; une application phénoménologique de la stabilité des noyaux chauds en découle. Enfin, dans le troisième chapitre, une présentation microscopique est proposée : partant des concepts de physique statistique exposés dans le premier chapitre, elle fournit une description des noyaux très excités, ou chauds, qui confirme en particulier les résultats qualitatifs obtenus dans le cadre de l'approche phénoménologique de la deuxième partie. De plus elle permet une description complète de la plupart des caractéristiques des noyaux en fonction de la température.

Le temps limité fait que ce cours ne pourra être complet et maints aspects seront passés sous le silence. Si du moins, sur les points traités, un peu de clarté est apportée, ce cours aura rempli une partie de ses ambitions. Si de plus, l'un ou l'autre de ses lecteurs restait sur sa faim et cherchait à en apprendre davantage en allant consulter l'une quelconque des références citées, le succès du cours serait complet.

I. ELEMENTS DE PHYSIQUE STATISTIQUE

Dans cette première partie, nous esquissons un rapide survol des éléments de physique statistique qui sont sous-jacents en physique nucléaire lorsqu'on étudie les propriétés des noyaux très excités. Tout d'abord, nous rappelons les définitions et les propriétés des opérateurs densité ainsi que leur utilité pour le calcul des valeurs moyennes d'observables. Nous introduisons la notion d'entropie statistique comme mesure de l'information manquante et nous donnons sa définition en terme de l'opérateur densité. Une fois ces concepts introduits, nous nous attaquons au problème du choix de l'opérateur densité pour un système physique donné en fonction des renseignements connus sur le système. Ceci nous permet de définir la distribution d'équilibre d'un système, ainsi que sa fonction de partition, comme résultant de l'application d'une méthode variationnelle associée à des paramètres de Lagrange judicieusement choisis. Suivant le choix des variables du problème, nous définissons les ensembles canonique et grand-canonique. Le lien avec la thermodynamique est rappelé, mais sans justification détaillée, seule la relation entre le paramètre de Lagrange associé à la conservation de l'énergie et la température est explicitée. Enfin, les différents potentiels thermodynamiques sont définis ainsi que leur inter-relation par transformation de Legendre appropriée. Une application du concept d'entropie statistique maximum est donnée à titre d'exemple pour une étude possible de la fragmentation des noyaux.

Ce chapitre s'inspire directement du livre de R.Balian "Du microscopique au macroscopique"¹. Dans la suite, nous ne donnons aucune référence et, pour compléter ou approfondir ce cours, on aura tout intérêt à se reporter spécialement aux chapitres 2 à 5 du tome I.

1.1. MELANGES STATISTIQUES - OPERATEURS DENSITE

On a l'habitude de représenter un état physique d'un noyau par une fonction d'onde qui dépend de tous les degrés de liberté des nucléons en présence, (position, spin...) : $\Psi(r_1\sigma_1, r_2\sigma_2, \dots, r_N\sigma_N)$ par exemple pour un système à N nucléons. En fait cette fonction d'onde est la représentation dans l'espace des coordonnées d'un état de l'espace de Hilbert \mathcal{H} associé au système quantique que l'on considère.

$$\Psi(r_1\sigma_1, r_2\sigma_2, \dots) = \langle r_1\sigma_1, r_2\sigma_2, \dots | \Psi \rangle$$

Soit donc un état physique représenté par le ket $|\Psi\rangle$. Dans la suite, l'espace de Hilbert est supposé de dimension finie pour éviter des complications mathématiques laborieuses.

Si une grandeur physique A est décrite par un opérateur \hat{A} , sa mesure expérimentale sera donnée par la valeur moyenne de \hat{A} dans l'état $|\Psi\rangle$:

$$\langle A \rangle = \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle$$

Ce problème bien posé est celui où l'état considéré est un état du système parfaitement connu, on appelle un tel état, état pur.

En fait nous voulons décrire des situations plus complexes où l'état du système est mal connu. Dans ce cas, le ket décrivant cet état n'est pas entièrement déterminé mais seul peut être atteinte la probabilité q_λ que l'état soit décrit par un ket donné $|\Psi_\lambda\rangle$. Bien entendu, comme toute loi de probabilité, ces q_λ doivent être positifs ou nuls et leur somme doit égaler 1 :

$$q_\lambda \geq 0, \quad \sum_{\lambda} q_\lambda = 1 \quad (I.1)$$

Dans ce cas, on a un mélange statistique d'états $(q_\lambda; |\Psi_\lambda\rangle)$ qui représente le système.

Suivant la démarche esquissée ci-dessus pour un état pur, nous voulons définir maintenant la valeur moyenne d'une observable pour un état décrit par un tel mélange statistique. Si le système était dans l'un des états purs $|\Psi_\lambda\rangle$, la mesure de l'observable A serait donnée par $\langle \Psi_\lambda | \hat{A} | \Psi_\lambda \rangle$, comme la probabilité de ce ket est q_λ , on voit intuitivement que la valeur moyenne de A sera :

$$\langle A \rangle = \sum_{\lambda} q_\lambda \langle \Psi_\lambda | \hat{A} | \Psi_\lambda \rangle \quad (I.2)$$

Nous admettrons ce résultat qui s'obtient rigoureusement en considérant les sous-espaces propres de \hat{A} . Il faut parfois se méfier de son intuition : nous avons implicitement supposé les kets $|\Psi_\lambda\rangle$ normés à l'unité mais ils ne sont pas nécessairement orthogonaux, cependant, le résultat ci-dessus est correct même si les kets ne sont pas orthogonaux.

Introduisons donc une représentation particulière de l'espace de Hilbert qui soit une base orthonormée $(|i\rangle)$:

$$\langle i|j\rangle = \delta_{ij} \quad .$$

$$\sum_i |i\rangle\langle i| = \hat{1} \quad . \quad (I.3)$$

où $\hat{1}$ est l'opérateur unité. Si l'on insère dans (I.2) cet opérateur unité à gauche et à droite de \hat{A} , on obtient après quelques manipulations

$$\langle A \rangle = \sum_{ij} \sum_{\lambda} \langle i|\psi_{\lambda}\rangle q_{\lambda} \langle \psi_{\lambda}|j\rangle \langle j|\hat{A}|i\rangle \quad . \quad (I.4)$$

Cette relation permet de définir l'opérateur densité \hat{D} associé à l'état décrit par le mélange statistique $(q_{\lambda}, |\psi_{\lambda}\rangle)$:

$$\hat{D} = \sum_{\lambda} |\psi_{\lambda}\rangle q_{\lambda} \langle \psi_{\lambda}| \quad . \quad (I.5)$$

Ses éléments de matrice dans la base $(|i\rangle)$ sont :

$$D_{ij} = \langle i|\hat{D}|j\rangle = \sum_{\lambda} \langle i|\psi_{\lambda}\rangle q_{\lambda} \langle \psi_{\lambda}|j\rangle \quad .$$

et forment la matrice densité. L'équation (I.4) s'écrit alors :

$$\langle A \rangle = \sum_{ij} D_{ij} A_{ji} = \text{Tr}(\hat{D} \hat{A}) \quad . \quad (I.6)$$

Ce résultat montre que seul \hat{D} intervient pour le calcul de $\langle A \rangle$ et donc que toute l'information sur le système quantique décrit par le mélange statistique est contenue dans l'opérateur densité.

Une remarque importante s'impose alors immédiatement. Soient deux états décrits par des mélanges statistiques différents, $(q_{\lambda}, |\psi_{\lambda}\rangle)$ et $(p_{\nu}, |\phi_{\nu}\rangle)$. Si ces mélanges correspondent au même opérateur densité :

$$\sum_{\lambda} |\psi_{\lambda}\rangle q_{\lambda} \langle \psi_{\lambda}| = \sum_{\nu} |\phi_{\nu}\rangle p_{\nu} \langle \phi_{\nu}| = \hat{D} \quad .$$

on voit, à cause de l'éq. (I.6) qu'aucune expérience ne permettra jamais de les distinguer : ils sont équivalents. Enfin, un système décrit par un état pur n'est qu'un cas particulier de mélange statistique où tous les q_{λ} sont nuls sauf un seul, égal à l'unité et, $\hat{D} = |\psi\rangle\langle\psi|$ est le projecteur sur l'état pur $|\psi\rangle$ correspondant.

Nous donnons maintenant les propriétés des opérateurs densité, telles qu'elles découlent des équations (I.5) et (I.1) :

- i) $\hat{D} = \hat{D}^\dagger$ hermiticité (q_λ réel) .
 ii) $\text{Trace}(\hat{D})=1$ $\sum_\lambda q_\lambda = 1$. (I.7)
 iii) $\langle \hat{D} | \hat{D} | \hat{D} \rangle \geq 0$ semi-défini positif ($q_\lambda \geq 0, \forall \lambda$) .

On a noté entre parenthèses les propriétés des probabilités q_λ responsables de celles de \hat{D} . Inversement, on peut montrer que tout opérateur vérifiant ces trois propriétés peut être considéré comme un opérateur densité associé à un état représenté par un mélange statistique que l'on peut en principe construire. En effet, si \hat{D} vérifie (I.7), son hermiticité entraîne qu'on peut en écrire sa décomposition spectrale en terme de ses fonctions propres orthonormées $|i\rangle$ et de ses valeurs propres p_i :

$$\hat{D} = \sum_i |i\rangle p_i \langle i| \quad (I.8)$$

des propriétés ii) et iii) de \hat{D} , il résulte que les p_i sont positifs ou nuls et que leur somme vaut 1. Ainsi \hat{D} sous la forme (I.8) a bien la structure d'un opérateur densité (voir I.5) associé à un mélange statistique $(p_i; |i\rangle)$ où les états purs représentés par les kets $|i\rangle$ sont cette fois orthonormés.

Jusque là, nous avons supposé que le nombre de particules du système était donné. Ce que nous avons dérivé se généralise sans difficulté au cas où le nombre de particules n'est connu qu'en moyenne ou est aléatoire. L'espace de Hilbert associé au système est alors la somme directe des espaces de Hilbert associés à des systèmes ayant un bon nombre de particules. Pour le physicien nucléaire habitué aux fermions qui obéissent au principe d'exclusion de Pauli, il s'agit là de l'espace de Fock. Pour toute observable A qui conserve le nombre de nucléons, $[\hat{A}, \hat{N}] = 0$ (où \hat{N} est l'opérateur nombre de nucléons), la mesure A sera donnée comme précédemment par

$$\langle A \rangle = \text{Trace}(\hat{D} \hat{A}),$$

où \hat{D} est l'opérateur densité du système dans l'espace de Fock.

Rappelons brièvement la façon dont \hat{D} évolue dans le temps. Si l'hamiltonien \hat{H} du système est exactement connu, les états purs évoluent suivant l'équation de Schrödinger dépendant du temps :

$$i\hbar \frac{d|\psi\rangle}{dt} = \hat{H}|\psi\rangle \quad ,$$

et l'opérateur densité associé à un état pur vérifie donc

$$i\hbar \frac{d\hat{D}}{dt} = [\hat{H}, \hat{D}] \quad (I.9)$$

Pour un mélange statistique où chaque composante $|\psi_\lambda\rangle$ évolue suivant l'équation de

Schrödinger, comme les probabilités ρ_n ne dépendent pas du temps, l'opérateur densité associé vérifie encore l'équation (I.9) ci-dessus dite équation de Liouville-von Neumann. Nous ne considérerons pas ici le cas plus général où l'hamiltonien est mal connu ou aléatoire.

Remarquons que l'opérateur densité \hat{D} est un opérateur à plusieurs corps dans l'espace de Hilbert associé au système. En particulier, pour un noyau ayant exactement N nucléons la matrice densité sera une matrice dans un espace à N corps. La matrice densité réduite à 1 corps avec lequel on a l'habitude de travailler s'obtient par une trace partielle sur N-1 corps faite sur la matrice densité. Par exemple soit l'opérateur densité \hat{D} caractérisant un noyau de N nucléons dans un état donné, sa représentation dans l'espace des coordonnées peut s'écrire :

$$\langle r_1, r_2, \dots, r_N | \hat{D} | r'_1, r'_2, \dots, r'_N \rangle ,$$

la matrice densité à un corps $\langle r_1 | \hat{\rho} | r'_1 \rangle$ est donné par :

$$\langle r_1 | \hat{\rho} | r'_1 \rangle = N \int dr_2 dr_3 \dots dr_N \langle r_1, r_2, \dots, r_N | \hat{D} | r'_1, r_2, \dots, r_N \rangle .$$

Bien évidemment la matrice densité à un corps contient moins d'information, en particulier toutes les corrélations à deux corps et plus ont disparu. Et enfin la densité de matière en un point donné de l'espace est la partie diagonale de la matrice densité à un corps :

$$\rho(r) = \langle r | \hat{\rho} | r \rangle .$$

Rappelons que dans un modèle de particules indépendantes où un noyau est décrit par un déterminant de Slater où exactement N orbitales $\varphi_n(r)$ sont occupées avec une probabilité 1 par un nucléon, on a la relation usuelle

$$\langle r | \hat{\rho} | r' \rangle = \sum_{\lambda} \varphi_{\lambda}(r) \varphi_{\lambda}^*(r') ,$$

que nous retrouverons dans la suite.

1.2. ENTROPIE STATISTIQUE - DEFINITION ET PROPRIETES - CAS DE SYSTEME COMPOSITE

L'objectif est de déterminer au mieux, pour un système quantique donné, l'opérateur densité puisque c'est lui qui permet, au moins en principe, de calculer les valeurs moyennes de toutes les observables. Cependant, pour un système mal connu, il faut d'abord donner une mesure quantitative de l'information manquante, ou, ce qui revient au même, évaluer le désordre du système en fonction de sa loi de probabilité. Cette quantité d'information manquante est mesurée à partir de l'opérateur densité \hat{D} par l'entropie statistique S :

$$S(\hat{D}) = -k \text{ Trace } (\hat{D} \text{ Log } \hat{D}), \quad (\text{I.10})$$

où k est la constante de Boltzmann. Nous ne donnerons aucune justification de cette expression que nous postulons. Les propriétés de S qui sont données dans la suite montrent que S est bien une mesure du désordre. Remarquons que si \hat{D} est donné par sa décomposition spectrale en fonction de ses valeurs propres et de ses vecteurs propres (cf. eq.(I.8)), l'entropie statistique devient :

$$S(\hat{D}) = -k \sum_i (p_i \text{ Log } p_i) \quad (\text{I.11})$$

L'entropie statistique définie par (I.10) vérifie quelques propriétés élémentaires qui la justifient comme mesure du désordre d'un système.

i) Elle est invariante lorsqu'on change \hat{D} par une transformation unitaire. Par une telle transformation, le système quantique considéré n'est pas modifié et son désordre ne peut donc ni augmenter ni diminuer. Cette propriété se démontre à partir de (I.10) en utilisant l'invariance cyclique de la trace.

ii) L'entropie statistique est minimale et égale à zéro pour un état pur. D'après (I.11), puisque les p_i sont positifs ou nuls et de somme 1 ($0 \leq p_i \leq 1, \sum p_i = 1$), chaque contribution $-kp_i \text{ Log } p_i$ est positive ou nulle. S est donc positive ou nulle. Pour un état pur, les p_i sont tous nuls sauf un qui est égal à l'unité, S est alors nulle et donc minimale. Réciproquement si S est nulle les p_i sont soit nuls soit égaux à 1, comme leur somme vaut 1, un seul d'entre eux est non nul et égal à 1, on a donc un état pur.

S'il n'y a pas de désordre l'entropie statistique S est nulle, et réciproquement.

iii) L'entropie statistique est maximum si les événements p_i sont équiprobables. Pour N événements équiprobables, $p_i = \frac{1}{N}$ et $S = k \text{ Log } N$. Nous admettrons ce résultat qui exprime bien que l'entropie est une mesure de désordre. En effet, l'équiprobabilité des événements correspond à l'état le plus désordonné où il n'y a en quelque sorte aucune raison de préférer un événement à un autre. Toute différence, si minime soit-elle, "renseigne" sur le système. Le maximum de l'entropie correspond donc au maximum du désordre ou, en d'autres termes au maximum de l'information manquante. C'est cette dernière remarque qui nous permettra de construire la méthode variationnelle qui donne l'opérateur densité.

D'autres propriétés sont à noter dans le cas où le système physique est un système composite constitué de deux sous-systèmes a et b . Dans ce cas l'espace de Hilbert du système total est le produit tensoriel des deux espaces \mathcal{H}^a et \mathcal{H}^b des deux sous-systèmes. Soit \hat{D} l'opérateur densité du système composite. Soit une

observable A définie par un opérateur \hat{A} , n'agissant que dans \mathcal{X} ; dans le calcul de sa valeur moyenne, $\text{Trace}(\hat{D}\hat{A})$, on peut prendre tout d'abord la trace dans l'espace \mathcal{X}^a où \hat{A} n'agit pas et, définissant \hat{D}_a par :

$$\hat{D}_a = \text{Trace}_b(\hat{D}). \quad (I.12)$$

on a :

$$\langle \hat{A}_a \rangle = \text{Trace}_b(\hat{D}_a \hat{A}_a) \quad . \quad (I.13)$$

L'opérateur \hat{D}_a vérifie les propriétés (I.7) des opérateurs densités. on peut l'assimiler à l'opérateur densité du sous-système a décrit dans \mathcal{X}^a . On aurait pu définir de même l'opérateur densité \hat{D}_b en prenant la trace de \hat{D} dans \mathcal{X}^b .

Revenons aux propriétés de l'entropie dans le cas où un système est composé de deux sous-systèmes a et b d'opérateurs densité \hat{D}_a et \hat{D}_b .

iv) Si les sous-systèmes sont statistiquement indépendants, l'opérateur densité du système composite est égal au produit tensoriel des opérateurs densité des sous-systèmes.

$$\hat{D} = \hat{D}_a \otimes \hat{D}_b, \quad (I.14)$$

et l'entropie statistique totale est exactement la somme des entropies calculées séparément dans chacun des sous-espaces:

$$S(\hat{D}) = S(\hat{D}_a) + S(\hat{D}_b) \quad . \quad (I.15)$$

Dans ce cas, il n'y a pas de corrélations et aucune information provenant de l'un des sous-systèmes ne peut renseigner sur l'autre.

v) Si au contraire les sous-systèmes a et b sont corrélés, \hat{D} contient plus d'information que n'en contient \hat{D}_a et \hat{D}_b . La connaissance du système global avec ses corrélations est plus précise que la simple connaissance de ses deux parties et donc

$$S(\hat{D}) \leq S(\hat{D}_a) + S(\hat{D}_b) \quad . \quad (I.16)$$

L'opérateur densité \hat{D} n'est plus nécessairement égal au produit tensoriel $\hat{D}_a \otimes \hat{D}_b$. En fait, dans (I.16), l'égalité n'a lieu que si $\hat{D} = \hat{D}_a \otimes \hat{D}_b$, c'est-à-dire en l'absence de corrélations: c'est une réciproque de la propriété précédente.

vi) La dernière propriété est une propriété de "concavité" qui signifie que la réunion de deux états d'un même système en un état unique augmente le

désordre. Soit deux états décrits par les opérateurs densité \hat{D}_1 et \hat{D}_2 , soit μ_1 et μ_2 les poids par lesquels on pondère ces états dans le mélange ($0 \leq \mu_1, \mu_2 \leq 1$ et $\mu_1 + \mu_2 = 1$) alors

$$S(\mu_1 \hat{D}_1 + \mu_2 \hat{D}_2) \geq \mu_1 S(\hat{D}_1) + \mu_2 S(\hat{D}_2) \quad . \quad (I.17)$$

Nous terminons cette section par l'expression de la variation de S en fonction d'une variation infinitésimale quelconque $\delta\hat{D}$ de \hat{D} :

$$\delta S(\hat{D}) = -k \text{Trace} (\delta\hat{D}(\text{Log}\hat{D} + 1)) \quad . \quad (I.18)$$

Enfin pour tout système quantique décrit par un mélange statistique et qui évolue par un hamiltonien \hat{H} parfaitement connu, on a d'après (I.9)

$$i\hbar \frac{dS}{dt} = - \text{Trace} ([\hat{H}\hat{D}]\text{Log}\hat{D}) = 0 \quad . \quad (I.19)$$

Dans un tel cas, aucune information n'est perdue ni gagnée. L'entropie ne peut donc augmenter que si l'évolution elle-même est mal connue, c'est-à-dire si l'hamiltonien est mal connu ou s'il contient des parties aléatoires.

Pour obtenir les résultats (I.18) et (I.19), il faut utiliser entre autre l'invariance cyclique de la trace.

I.3. CHOIX DE L'OPERATEUR DENSITE - DISTRIBUTION D'EQUILIBRE

Jusqu'à présent, nous avons défini formellement un opérateur densité et calculé le degré de désordre qui le caractérise via l'entropie. Il nous reste maintenant à trouver une méthode pour le calcul explicite de \hat{D} pour un système quantique donné, compte tenu des renseignements que l'on possède sur le système.

Tout d'abord si l'on ne sait rien, cas que nous avons déjà rencontré, il suffit de dénombrer les états purs possibles qui sont alors tous équiprobables. Pour N états $|\Psi_\lambda\rangle$, on aura

$$\hat{D} = \sum_{\lambda=1}^N |\Psi_\lambda\rangle \frac{1}{N} \langle\Psi_\lambda| \quad ,$$

et, conformément à la propriété iii) de la section précédente, l'entropie qui est alors maximum vaut :

$$S(\hat{D}) = k \text{Log } N \quad .$$

Si au contraire l'état est au moins partiellement connu, il faut explicitement tenir compte des renseignements dont on dispose. Si l'un de ces renseignements est une information exacte, on l'inclut dans la construction de l'espace de Hilbert. Ainsi, si le nombre de particules N est exactement connu, il suffit de choisir l'espace de Hilbert des états \mathcal{H}^N ayant exactement N particules. Dans d'autres cas on ne connaît l'information qu'en valeur moyenne, par exemple

l'énergie $U = \text{Trace}(\hat{D} \hat{H})$ peut être connue seulement en moyenne. Les cas que l'on rencontre le plus souvent sont :

i) N et U sont connus exactement, l'opérateur densité associé est dit microcanonique.

ii) N est connu exactement mais U en valeur moyenne. L'ensemble statistique des états de ce type est dit canonique.

iii) Enfin à la fois N et U sont connus en valeur moyenne, on parle alors d'ensemble grand canonique.

Si des renseignements sont exactement connus, nous supposons que la définition de l'espace de Hilbert en tient compte de façon appropriée. Plaçons-nous dans le cas général où nous connaissons la valeur moyenne d'un certain nombre d'observables \hat{A}_i :

$$\text{Trace}(\hat{D} \hat{A}_i) = \langle A_i \rangle \quad (I.20)$$

Nous voulons trouver la distribution statistique d'équilibre réalisée dans l'opérateur densité \hat{D} , compte tenu des contraintes (I.20). Or nous savons que l'entropie, mesure du désordre, est maximum si le désordre est maximum, c'est-à-dire en l'absence d'information pour des événements équiprobables. Pour généraliser ce concept en incluant les contraintes, on postule que la distribution d'équilibre représentée par l'opérateur densité \hat{D} est celle, compatible avec toutes les données existantes, qui maximise l'entropie $S(\hat{D})$.

Pour construire \hat{D} explicitement à partir de ce postulat, choisissons une base arbitraire d'état $\{|i\rangle\}$ de l'espace de Hilbert. Il faut alors trouver les éléments de matrice $\langle i|\hat{D}|j\rangle$ qui maximisent $S(\hat{D})$ avec les contraintes (I.20). En général, on inclut une contrainte supplémentaire qui exprime le fait que \hat{D} est de trace unité (cf. (I.7)). On utilise alors la méthode variationnelle des multiplicateurs de Lagrange et nous cherchons les valeurs stationnaires de :

$$-\text{Trace}(\hat{D} \text{Log} \hat{D}) - \sum_i \lambda_i \text{Trace}(\hat{D} \hat{A}_i) - \lambda_0 \text{Trace}(\hat{D}), \quad (I.21)$$

en faisant varier arbitrairement les D_{ij} sans plus se soucier des contraintes. Les paramètres de Lagrange λ_i et λ_0 seront ensuite déterminés en imposant à la solution trouvée de vérifier les contraintes. En utilisant (I.18) on écrit que la variation de (I.21) est nulle :

$$\begin{aligned} 0 &= -\text{Trace}(\delta \hat{D} (\text{Log} \hat{D} + \sum_i \lambda_i \hat{A}_i + \lambda_0 + 1)) \\ &= -\sum_{ij} \langle i|\delta \hat{D}|j\rangle \langle j| \text{Log} \hat{D} + \sum_i \lambda_i \hat{A}_i + \lambda_0 + 1 |i\rangle \end{aligned} \quad (I.22)$$

Cette dernière expression doit être nulle pour toute variation hermitique

arbitraire des éléments de matrice de \hat{D} et donc

$$0 = \langle j | \text{Log} \hat{D} + \sum_i \lambda_i \hat{A}_i + \lambda_0 + 1 | i \rangle \quad (I.23)$$

pour tout couple (ij) soit :

$$\hat{D} = e^{-\sum_i \lambda_i \hat{A}_i - \lambda_0 - 1}$$

que l'on réécrit sous la forme :

$$\hat{D} = \frac{1}{Z} e^{-\sum_i \lambda_i \hat{A}_i} \quad (I.24)$$

On a ainsi construit l'opérateur densité à l'équilibre étant donné des contraintes imposées en moyenne. Cette expression s'appelle *distribution de Boltzmann-Gibbs*. Pour clore la démonstration, il faut montrer que l'extremum que nous avons trouvé rend $S(\hat{D})$ maximum. Nous admettrons que la distribution de Boltzmann-Gibbs a une entropie strictement supérieure à celle obtenue pour tout autre opérateur densité vérifiant les contraintes (I.20).

En écrivant l'éq. (I.24), nous avons remplacé le paramètre λ_0 par $Z = e^{\lambda_0 + 1}$. La condition de normalisation de \hat{D} détermine Z :

$$Z = \text{Trace} e^{-\sum_i \lambda_i \hat{A}_i} \quad (I.25)$$

Cette équation donne Z comme fonction des paramètres de Lagrange λ_i . On appelle Z la fonction de partition du système. Les conditions (I.20) achèvent de déterminer les λ_i comme solutions des équations :

$$\langle A_i \rangle = \text{Trace}(\hat{D} \hat{A}_i) = \frac{1}{Z} \text{Trace} \left(e^{-\sum_j \lambda_j \hat{A}_j} \hat{A}_i \right)$$

ou encore :

$$\langle A_i \rangle = -\frac{1}{Z} \frac{\partial}{\partial \lambda_i} \text{Trace} e^{-\sum_j \lambda_j \hat{A}_j}$$

et, en réutilisant (I.25) :

$$\frac{\partial}{\partial \lambda_i} \text{Log} Z(\lambda_j) = - \langle A_i \rangle \quad (1.26)$$

Par un calcul simple, on peut maintenant réexprimer l'entropie d'équilibre en fonction de la distribution de Boltzmann-Gibbs par:

$$S(\hat{O}) = k \text{Log} Z + k \sum_i \lambda_i \langle A_i \rangle \quad (1.27)$$

ou encore, à cause de (1.26):

$$S = k \text{Log} Z - \sum_i \lambda_i \frac{\partial}{\partial \lambda_i} (k \text{Log} Z) \quad (1.28)$$

Soit un petit déplacement de l'équilibre caractérisé par une variation infinitésimale des $\langle A_i \rangle$ et donc des λ_i qui en dépendent. On a :

$$d(\text{Log} Z) = \sum_i \frac{\partial}{\partial \lambda_i} (\text{Log} Z) d\lambda_i = - \sum_i \langle A_i \rangle d\lambda_i \quad (1.29)$$

et, avec (1.28)

$$dS = k \sum_i \lambda_i d\langle A_i \rangle \quad (1.30)$$

Ces deux dernières relations montrent que les variables naturelles pour la fonction de partition sont les paramètres de Lagrange alors que pour l'entropie, ce sont les valeurs moyennes $\langle A_i \rangle$. Prenant les $\langle A_i \rangle$ comme variables, on déduit de (1.30):

$$\frac{\partial S}{\partial \langle A_i \rangle} = k \lambda_i \quad (1.31)$$

La transformation (1.28) est une transformation de Legendre qui fait passer de $k \text{Log} Z$, fonction des λ_i à l'entropie S comme fonction des $\langle A_i \rangle$, variables conjuguées des λ_i . La transformation inverse qui est aussi une transformation de Legendre s'écrit immédiatement

$$k \text{Log} Z = S - \sum_i \langle A_i \rangle \frac{\partial S}{\partial \langle A_i \rangle} \quad (1.32)$$

Ensemble canonique

Le nombre de particule N et le volume Ω sont donnés exactement. l'énergie est donnée en valeur moyenne : $U = \text{Trace}(\hat{O} \hat{H}_N)$ où \hat{H}_N est l'hamiltonien dans l'espace à N particules. Le paramètre de Lagrange associé s'appelle traditionnellement β et l'on a:

$$\hat{D} = \frac{1}{Z_c} e^{-\beta \hat{H}_N} \quad (I.33)$$

avec pour la fonction de partition Z_c :

$$Z_c(\beta, N) = \text{Trace } e^{-\beta \hat{H}_N} = \sum_n e^{-\beta E_n} \quad (I.34)$$

où la somme sur n porte sur les états à N particules. L'entropie d'équilibre s'écrit:

$$S(U) = k \text{Log } Z_c + k \beta U \quad (I.35)$$

Ensemble grand canonique

L'énergie U et le nombre de particules sont donnés en moyenne. On travaille alors dans l'Espace de Fock défini dans la première section, les paramètres de Lagrange associés à U et N sont β et $-\alpha$. On peut écrire immédiatement, en spécifiant les expressions (I.24), (I.25) et (I.27):

$$\hat{D} = \frac{1}{Z_G} e^{-\beta \hat{H} + \alpha \hat{N}} \quad (I.36)$$

$$Z_G(\alpha, \beta) = \text{Trace}(e^{-\beta \hat{H} + \alpha \hat{N}}) = \sum_N e^{-\alpha N} \sum_n e^{-\beta E_n^N} = \sum_N e^{-\alpha N} Z_c(\beta, N), \quad (I.37)$$

$$S(U, N) = k \text{Log } Z_G + k \beta U - k \alpha N \quad (I.38)$$

On remarquera que dans (I.37), nous avons réexprimé Z_G comme une transformée de Laplace sur N des fonctions de partition canonique $Z_c(\beta, N)$ calculées dans chacun des espaces de Hilbert à bon nombre de particules N et pour la même valeur du paramètre de Lagrange β .

Notons enfin les relations entre U et N , valeurs moyennes d'observable et β et α , relations dérivées des expressions (I.26) et (I.31) écrites en grand canonique

$$\frac{\partial}{\partial \beta} \text{Log } Z_G = -U, \quad \frac{\partial}{\partial \alpha} \text{Log } Z_G = N \quad (I.39)$$

et les relations inverses

$$\frac{1}{k} \frac{\partial S}{\partial U} = \beta, \quad \frac{1}{k} \frac{\partial S}{\partial N} = -\alpha \quad (I.40)$$

La généralisation, en grand canonique, au cas où l'on a plusieurs espèces de particules, se fait sans difficultés particulières. Il suffit de repartir des formules générales (I.24) à (I.32) en introduisant autant d'opérateurs nombre de particules \hat{N}_i que nécessaire et de même, autant de paramètres de Lagrange associés α_i . Nous rencontrerons un tel cas dans la dernière partie du cours où nous

distinguerons explicitement les protons des neutrons.

1.4. RELATION AVEC LA THERMODYNAMIQUE : TEMPERATURE

Maintenant que nous avons construit la densité d'équilibre de Boltzmann-Gibbs, il nous faut faire le lien avec la thermodynamique. En fait nous allons limiter nos ambitions et nous nous contenterons de définir la température et les différents potentiels thermodynamiques dans le contexte microscopique que nous avons adopté.

La notion de température en thermodynamique s'introduit comme une mesure relative. Seul le troisième principe (principe de Nernst) permet de définir un zéro absolu. La façon de procéder consiste à mettre au contact deux systèmes en équilibre thermique. Le plus chaud cède alors de la chaleur au plus froid et vice versa. Du point de vue microscopique, prendre deux systèmes à l'équilibre et les mettre en contact thermique revient à prendre deux systèmes décrits par une distribution de Boltzmann-Gibbs et à les coupler par une interaction pour permettre le transfert d'énergie d'un système à l'autre.

Plaçons-nous dans l'ensemble canonique. Si donc deux systèmes a et b sont tout d'abord isolés thermiquement, l'hamiltonien \hat{H} du système a+b est exactement la somme de deux parties \hat{H}_a et \hat{H}_b qui dépendent exclusivement des variables des sous-systèmes concernés : a pour \hat{H}_a , b pour \hat{H}_b . Comme \hat{H}_a et \hat{H}_b commutent, les énergies U_a et U_b de chacun des sous-systèmes sont conservées. Introduisons les paramètres de Lagrange β_a et β_b pour écrire explicitement que a et b sont à l'équilibre dans l'ensemble canonique:

$$\hat{D}_a = \frac{1}{Z_a} e^{-\beta_a \hat{H}_a} \quad , \quad \hat{D}_b = \frac{1}{Z_b} e^{-\beta_b \hat{H}_b} \quad , \quad (1.41)$$

$$Z_a(\beta_a) = \text{Trace } e^{-\beta_a \hat{H}_a} \quad , \quad Z_b(\beta_b) = \text{Trace } e^{-\beta_b \hat{H}_b} \quad , \quad (1.42)$$

$$U_a = - \frac{\partial}{\partial \beta_a} \text{Log} Z_a(\beta_a) \quad , \quad U_b = - \frac{\partial}{\partial \beta_b} \text{Log} Z_b(\beta_b) \quad . \quad (1.43)$$

L'opérateur densité global s'écrit alors

$$\hat{D} = \hat{D}_a \otimes \hat{D}_b = \frac{1}{Z_a(\beta_a) Z_b(\beta_b)} e^{-\beta_a \hat{H}_a - \beta_b \hat{H}_b} \quad . \quad (1.44)$$

Nous avons ainsi réalisé l'équilibre thermique de chacun des sous-systèmes en écrivant qu'ils sont à l'équilibre pour les énergies U_a et U_b respectivement. Le fait qu'ils sont thermiquement isolés se traduit par l'absence de corrélations entre a et b. Amenons ces systèmes au contact en introduisant une petite perturbation \hat{V} . Ce terme dépend des deux sous-systèmes mais doit être assez faible pour pouvoir être négligé devant \hat{H}_a et \hat{H}_b . Son rôle est de permettre des échanges

d'énergie entre a et b sans perturber le système total de telle sorte que l'énergie totale $U = U_a + U_b$ reste constante. L'opérateur densité s'écrit alors avec un seul paramètre de Lagrange β puisqu'il n'y a plus qu'une seule contrainte sur l'énergie totale et, comme \hat{V} est négligeable, on obtient

$$\hat{D} = \frac{1}{Z(\beta)} e^{-\beta \hat{H}} = \frac{1}{Z_a(\beta) Z_b(\beta)} e^{-\beta(\hat{H}_a + \hat{H}_b)} \quad (I.45)$$

En comparant avec (I.41), on voit que le contact thermique réalisé par \hat{V} a eu pour effet d'égaliser les paramètres β_a et β_b . Ce paramètre de Lagrange joue ainsi le rôle d'une température, il est déterminé par l'énergie totale qui est conservée :

$$U = U_a + U_b = - \frac{\partial}{\partial \beta} \text{Log} (Z_a(\beta) Z_b(\beta)) \quad (I.46)$$

La nouvelle répartition de l'énergie, $U = U'_a + U'_b$, entre a et b une fois l'équilibre thermique réalisé, s'obtient en calculant la valeur moyenne de \hat{H}_a et de \hat{H}_b dans l'état décrit par \hat{D} selon (I.45) avec β déterminé par (I.46).

Pour achever de réaliser le lien entre β et la température, nous utiliserons le résultat suivant que nous n'avons pas démontré mais qui provient de la concavité de l'entropie (voir section I.2): l'énergie U est une fonction décroissante de β . Par suite, comme la somme $U_a + U_b$ est conservée, l'équilibre va se réaliser pour une valeur de β intermédiaire entre β_a et β_b . Le système "le plus froid", c'est-à-dire celui qui gagne de l'énergie au dépend de l'autre, voit son paramètre β diminuer: l'échelle des β varie donc en sens inverse de la température ordinaire.

On peut poursuivre le lien entre l'échelle microscopique, où nous ne disposons que de l'énergie interne U , et l'échelle macroscopique en identifiant au cours d'une transformation infinitésimale la partie de la variation de U provenant uniquement de la variation de \hat{D} à la variation de quantité de chaleur (pas de variation de \hat{H})

$$dQ = \text{Trace} (\hat{H} d\hat{D}) \quad (I.47)$$

En effet nous avons assimilé les échanges de chaleur avec un potentiel de couplage \hat{V} non déterminé mais faible devant \hat{H} . Par contre, la variation infinitésimale de travail sera associée à la variation de \hat{H} lui-même:

$$dU = \text{Trace} (\hat{D} d\hat{H}) \quad (I.48)$$

Pour un système qui peut échanger du travail et de la chaleur on retrouve ainsi le premier principe de la thermodynamique:

$$\Delta U = \Delta U + \Delta Q \quad (I.49)$$

On peut de même retrouver le fondement microscopique du second et du troisième principe. Nous nous contenterons ici de remarquer que pour un système subissant une transformation telle qu'à chaque instant il est à l'équilibre thermique, et donc décrit par une distribution de Boltzmann-Gibbs, la variation de la quantité de chaleur (I.47) peut être reliée à la variation d'entropie: $dS = -k \text{ Trace } \hat{D}(\text{Log} \hat{D} + 1)$ donnée par (I.18). En effet, puisque la trace de \hat{D} reste égale à un à chaque instant, et donc $\text{Trace}(d\hat{D}) = 0$, on peut simplifier cette expression. Si l'on remplace \hat{D} par son expression on obtient successivement

$$\begin{aligned} dS &= -k \text{ Trace } (d\hat{D} \text{ Log} \hat{D}) \\ &= -k \text{ Trace } (d\hat{D} \text{ Log} Z) + k\beta \text{ Trace } (\hat{H} d\hat{D}) \\ &= k\beta \text{ Trace } (\hat{H} d\hat{D}) \end{aligned} \quad (I.50)$$

Si maintenant on rapproche le résultat de la relation

$$dS = \frac{dQ}{T}$$

entre les variations d'entropie et de chaleur au cours d'une transformation quasi-statique d'un système à l'équilibre thermodynamique, on voit que l'on peut identifier le paramètre de Lagrange β avec l'inverse de la température

$$\beta = \frac{1}{kT} \quad (I.51)$$

Ceci achève ce que nous dirons sur les liens entre l'échelle microscopique décrite par la distribution de Boltzmann-Gibbs et l'échelle macroscopique de la thermodynamique.

I.5. POTENTIELS THERMODYNAMIQUES

Un potentiel thermodynamique est une fonction des variables qui caractérisent un système, cette fonction est extrémale à l'équilibre et ses dérivées partielles ont des interprétations physiques simples. De ce point de vue, l'entropie réalise un exemple de potentiel thermodynamique avec pour variables les variables conservées, énergie interne U , nombre de nucléons N , et éventuellement d'autres variables x_α dont peut dépendre l'hamiltonien, volume Ω par exemple ou champ externe. La différentielle totale s'écrit alors (voir (I.30), (I.39) et (I.40))

$$dS = k\beta dU - k\alpha dN - k\beta \sum_{\alpha} x_{\alpha} dx_{\alpha} \quad (I.52)$$

Elle s'exprime en terme de paires de variables conjuguées: U et $k\beta$, N et $-k\alpha$, x_{α} et $-k\beta x_{\alpha}$. On a l'habitude en thermodynamique de distinguer entre variables extensives qui, à la limite macroscopique, sont proportionnelles au volume pour

des systèmes homogènes au moins localement, et entre variables intensives qui ne dépendent pas du volume. Les variables U et N sont extensives alors que les variables conjuguées $k\beta = 1/T$ et $-k\mu$ sont intensives.

La démarche suivie traditionnellement en thermodynamique met davantage l'accent sur l'énergie interne $U(S, N, x_n)$ fonction inverse de l'entropie $S(U, N, x_n)$. La différentielle totale dU s'écrit immédiatement:

$$dU = T dS + \mu dN + \sum_n x_n dx_n \quad (1.53)$$

L'énergie interne U est donc un potentiel thermodynamique fonction de S, N et x_n . La variable conjuguée de N , $\mu = \alpha/\beta$ est le potentiel chimique sur lequel nous reviendrons.

On utilise usuellement comme variable, la température T plutôt que l'entropie. Par transformation de Legendre appropriée on obtient l'énergie libre

$$F(T, N, x_n) = U(S, N, x_n) - S \frac{\partial U}{\partial S} = U - TS \quad (1.54)$$

dont la différentielle totale est

$$dF = -S dT + \mu dN + \sum_n x_n dx_n \quad (1.55)$$

Les variables naturelles dont dépend l'énergie libre F sont $T = 1/k\beta$, N et éventuellement le volume. Ce sont celles qui sont définies dans l'ensemble canonique et d'ailleurs, d'après (1.35), on a:

$$F(T, N, x_n) = -kT \text{Log } Z_c(\beta, N, x_n) \quad (1.56)$$

L'énergie libre est utilisée pour des transformations isothermes quasi-statiques, elle présente un minimum à l'équilibre. En cas de transformations adiabatiques, on aura intérêt à utiliser l'énergie interne.

Si l'un des x_n est le volume, le travail reçu par le système lors d'une variation $d\Omega$ du volume est, selon (1.48)

$$dU = \text{Trace } \hat{D} \frac{\partial \hat{H}}{\partial \Omega} d\Omega.$$

On peut montrer que ce travail peut se réécrire: $dU = P dV$ où la pression P est la variable conjuguée au volume:

$$P = - \frac{\partial F}{\partial \Omega} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \Omega} \text{Log } Z_c(\beta, N, \Omega, \dots) \quad (1.57)$$

La pression, comme fonction de la température, du nombre de nucléons et du volume est ce qu'on appelle l'équation d'état du système.

De même que $-Pd\Omega$ représente le travail des forces de pression pour une variation de volume, μdN joue le rôle d'un travail associé à une variation du nombre de particules. On peut l'interpréter comme la quantité d'énergie que reçoit un système si on lui rajoute ou enlève une particule, c'est en physique nucléaire l'opposé de l'énergie de séparation d'un nucléon à la limite de basse température. Pour les échanges de particules à température constante, cas le plus fréquent, il est plus pratique d'utiliser le potentiel chimique $\mu = \alpha/\beta$ que le paramètre de Lagrange α . Enfin si par la même procédure que dans la section précédente, on met au contact deux systèmes qui sont déjà à la même température, ils échangeront des particules jusqu'à réaliser l'équilibre des potentiels chimiques, le système ayant le potentiel chimique le plus élevé au départ cedant des particules à l'autre. On retrouvera une situation de ce type dans le chapitre suivant sur les transitions de phase.

Enfin si l'on veut prendre pour variables la température et le potentiel chimique, on introduit le grand potentiel A qui est obtenu par double transformation de Legendre à partir de l'énergie interne :

$$A(T, \mu, x_m) = U(S, N, x_m) - S \frac{\partial U}{\partial S} - N \frac{\partial U}{\partial N} = U - TS - \mu N \quad (I.58)$$

ou encore à partir de l'énergie libre :

$$A(T, \mu, x_m) = F(T, N, x_m) - N \frac{\partial F}{\partial N} = F - \mu N \quad (I.59)$$

La différentielle totale de A s'écrit

$$dA = -SdT - Nd\mu + \sum_m X_m dx_m \quad (I.60)$$

Cette fois-ci les variables naturelles, $T = \frac{1}{k\beta}$, μ, Ω, \dots sont celles de l'ensemble grand canonique et d'ailleurs (cf. (I.38))

$$A(T, \mu, x_m) = -kT \text{Log } Z_G(\beta, \alpha, x_m) \quad (I.61)$$

Le grand potentiel est minimal à l'équilibre, et l'équation d'état (I.57) est alors donnée par la représentation paramétrique

$$\begin{aligned} P &= - \frac{\partial}{\partial \Omega} A(T, \mu, \Omega) \\ N &= - \frac{\partial}{\partial \mu} A(T, \mu, \Omega) \end{aligned} \quad (I.62)$$

L'élimination de μ entre ces deux équations redonne l'expression (I.57).

Remarquons enfin que la seule variable extensive dont dépend le grand potentiel est le volume et donc

$$\frac{A(T, \mu, \Omega)}{\Omega} = \frac{\partial A}{\partial \Omega} \quad (I.63)$$

par suite

$$P = - \frac{A}{\Omega} \quad (1.64)$$

ce qui montre que, au moins pour un fluide homogène constitué d'une seule espèce de particules, la pression est égale au grand potentiel par unité de volume au signe près.

Si maintenant on voulait n'utiliser que les variables intensives T, μ et P pour définir un potentiel thermodynamique, on devrait faire la transformation de Legendre : $A - \Omega \frac{\partial A}{\partial \Omega}$, ce qui donne un résultat rigoureusement nul d'après (1.63). La forme différentielle de ce "résultat" s'écrit

$$SdT - \Omega dP + Nd\mu = 0 \quad (1.65)$$

Cette relation s'appelle *relation de Gibbs-Duhem* en thermodynamique, elle exprime le fait que pour caractériser un fluide à l'aide de trois variables, l'une au moins doit être extensive. On retrouvera une forme simplifiée de cette relation dans la section suivante: dans le cas isotherme et pour un système infini homogène, on a

$$\frac{dP}{dp} = \frac{1}{p} \frac{dp}{dp} \quad (1.66)$$

où $p = N/\Omega$ est la densité de nucléon.

1.6. DÉSORDRE MAXIMUM ET FRAGMENTATION

Dans cette section, nous allons appliquer le concept de désordre maximum à l'étude de la fragmentation en suivant la méthode proposée récemment par J. Aichelin et J. Hüfner².

Quand un noyau est fortement excité, comme cela se rencontre dans les réactions entre ions lourds, on observe expérimentalement un nombre important de noyaux légers produits dans la réaction. Le mécanisme de production est encore controversé et nous ne présenterons pas les modèles antagonistes en présence. Nous considérons une réaction où un projectile d'énergie élevée, typiquement de 30 à 100 MeV par nucléon est lancé sur une cible et un fragment de charge Z est observé. Avec Aichelin et Hüfner nous allons faire les hypothèses les plus "minimales possibles" pour calculer la section efficace $d\sigma/dZ$:

i) dans une première étape rapide de la réaction, un système est formé avec une charge Z_0 éventuellement inférieure à la charge totale du système cible plus projectile.

ii) dans une deuxième étape, ce système chargé se désexcite dans toutes

les combinaisons possibles de noyaux.

Définissons la probabilité $P(m,Z)$ qu'une fragmentation donnée produise m noyaux de charge Z . Comme pour toute loi de probabilité nous avons la condition de normalisation :

$$\sum_m P(m,Z) = 1 \quad (I.67)$$

Une autre condition doit être évidemment imposée: la conservation de la charge:

$$\sum_{m,Z} mZ P(m,Z) = Z_0 \quad (I.68)$$

Aucune autre hypothèse n'est faite, tant sur le mécanisme de réaction que sur la conservation de l'énergie, par exemple.

L'entropie statistique associée à la loi de probabilité $P(m,Z)$ s'écrit: (voir section I.2, eq.(I.11))

$$S = - \sum_{mZ} P(m,Z) \text{Log} P(m,Z) \quad (I.69)$$

où nous avons omis la constante de Boltzmann inessentielle pour la suite. Nous devons donc maximiser S avec la contrainte (I.68) sur la charge et les contraintes (I.67) de normalisation (autant de conditions que de valeur de Z), c'est-à-dire en introduisant les paramètres de Lagrange D et $\lambda(Z)$ et en écrivant :

$$\frac{\partial}{\partial P(m',Z')} \sum_{m,Z} \{-P(m,Z) \text{Log} P(m,Z) - \lambda(Z) P(m,Z) - DmZ P(m,Z)\} \quad (I.70)$$

le maximum de S est réalisé pour

$$P(m,Z) = \exp(-\lambda(Z) - 1 - DmZ) \quad .$$

Suivant les notations de Aichelin² introduisons $C(Z)$ par

$$P(m,Z) = C(Z) \exp(-DmZ) \quad (I.71)$$

Les conditions de normalisation permettent de calculer exactement $C(Z)$:

$$C(Z) = 1 - \exp(-DZ) \quad (I.72)$$

La conservation de la charge entraîne:

$$Z_0 = \sum_Z \frac{Z}{\exp(DZ) - 1} \quad .$$

En passant à la limite continue, Aichelin et Hüfner obtiennent $D = 1.28/\sqrt{Z_0}$, ce qui, connaissant Z_0 , achève de déterminer la loi de probabilité $P(m,Z)$ qui représente ici l'équivalent de l'opérateur densité des sections I.1 et I.3.

La section efficace inclusive de production d'un fragment de charge Z est proportionnelle à la multiplicité moyenne de production :

$$\langle n_Z \rangle = \sum_n n P(nZ) \quad (I.73)$$

et, tout calcul fait, on obtient :

$$\frac{d\sigma}{dZ} = \sigma_0 \langle n_Z \rangle = \frac{\sigma_0}{\exp(1,28 Z/\sqrt{Z_0}) - 1} \quad (I.74)$$

La constante de proportionnalité σ_0 ne peut être calculée par ce modèle, on peut la fixer par normalisation adéquate de la section efficace totale. Pour une réaction donnée, Z_0 est déterminée expérimentalement à partir de la charge totale de la cible et du projectile à laquelle on soustrait la charge des particules rapides éventuellement émises dans la première étape de la réaction. Une fois Z_0 et σ_0 calculés, il n'y a plus aucun paramètre ajustable dans le modèle. De plus, la forme de la courbe représentant la distribution de charge est complètement déterminée par la conservation de la charge. La figure I.1 que nous avons reprise de la référence 2 compare le modèle avec les données expérimentales obtenues pour les réactions $p+A$, $p+U$, $p+X$, et $p+K$, à des énergies de l'ordre de plusieurs GeV. On peut voir que l'accord est tout à fait remarquable. Nous ne discuterons pas plus en détails de la comparaison modèle-expérience, pour cela on pourra se reporter à la référence 2.

Insistons seulement sur le point suivant : nous avons fait le minimum d'hypothèses compatibles avec les conditions expérimentales et la qualité du résultat obtenu montre la puissance de la stratégie adoptée. Cet exemple très simple illustre parfaitement la valeur du concept d'entropie maximale assorti de conditions judicieusement choisies reflétant la physique du problème.

Corollairement, il est inutile de supposer des mécanismes de réaction raffinés ou trop compliqués si l'expérience ne fournit aucun renseignement permettant de les tester. Dans l'esprit de la méthode que nous avons suivie, cela reviendrait à présupposer dans les expériences des informations qui en fait ne sont pas mesurées. Dans le cas de la fragmentation que nous avons regardée, la mesure de corrélation ($d\sigma/dZdE$ par exemple) fournirait plus d'information et permettrait de raffiner les modèles.

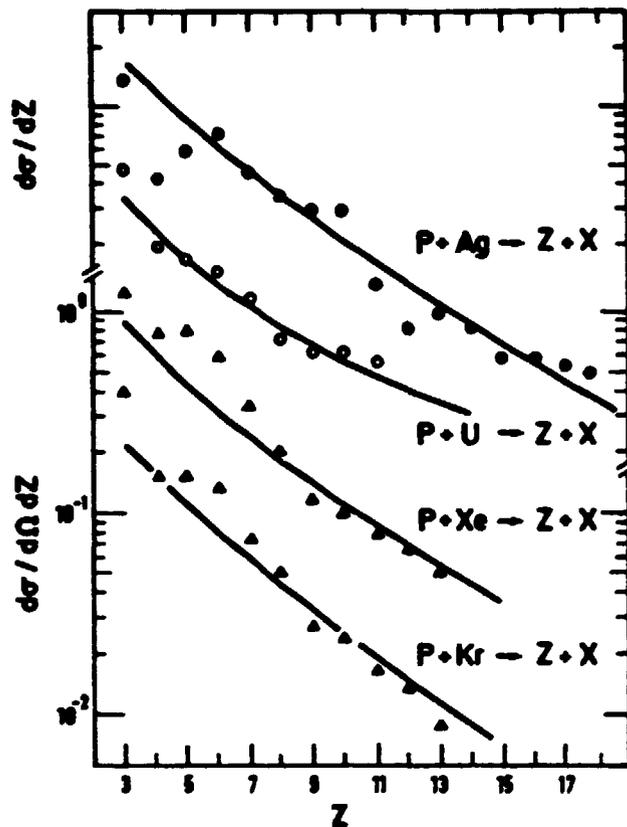


Fig. 1.1 - Comparaison entre les distributions de charges expérimentales et théoriques selon le modèle de J. Aichelin et J. Nußner². Les lignes continues sont calculées à partir de l'équation (1.74). Les données expérimentales pour $p+Ag$ et $p+W$ ont été obtenues à 4,9 GeV, pour $p+X_0$ et $p+X_p$,⁴ les données sont publiées seulement à 34 degrés, pour des énergies allant de 80 à 200 GeV. Les sections efficaces sont en unité arbitraire.

II. TRANSITION DE PHASE. STABILITE DES NOYAUX CHAUDS

Dans cette deuxième partie, nous nous intéressons à la limite de stabilité des noyaux chauds. Nous allons décrire cette limite comme la limite de coexistence de deux phases, l'une liquide, l'autre gazeuse. Au lieu de dériver les propriétés des transitions de phase liquide-gaz dans le cas le plus général, puis de les appliquer au contextenucléaire, nous allons adopter une stratégie inverse: nous allons partir du problème de physique nucléaire qui nous intéresse et dériver au moment opportun les équations de coexistence liquide gaz en montrant pourquoi nous sommes amenés à étudier ce problème. Ayant alors rappelé les propriétés des transitions de phase relevantes à notre cas, nous montrerons quelles en sont les implications en partant d'une équation d'état très simple décrivant la matière nucléaire infinie. Cette façon de procéder nous permettra de bien mettre en évidence la spécificité du problème nucléaire caractérisé par un petit nombre de nucléons, ce qui se traduit par un rapport de l'énergie de surface à l'énergie de volume en $A^{-1/3}$ et par un champ coulombien important.

II.1. LE CONTEXTE EN PHYSIQUE DES IONS LOURDS

Dans les collisions entre ions lourds, on peut s'attendre à ce qu'une fraction importante de la section efficace de réaction soit due à la formation d'un noyau composé. Une détermination expérimentale de cette fraction requiert une sélection des événements qui soit dénuée de toute ambiguïté. Récemment, une telle sélection a été proposée⁵⁻¹⁰ et a conduit à mettre en évidence la formation de noyaux composés à des énergies d'excitation élevées correspondant à des températures de l'ordre de 5 MeV. Cet axe de recherche est très prometteur car il ouvre la possibilité d'étudier la limite de stabilité des noyaux à hautes températures. En plus de son intérêt expérimental, l'étude de cette limite devrait apporter des renseignements précis sur les propriétés de la matière nucléaire chaude qui existe à l'intérieur d'un noyau composé avant qu'il ne se désexcite.

Parmi les principales propriétés de la matière nucléaire, la possibilité de coexistence de deux phases distinctes se retrouve dans la plupart des travaux théorique récent¹¹⁻¹⁶. En particulier, on en obtient une illustration dans le

diagramme des isothermes de la matière nucléaire qui, comme on le verra dans la suite, ont une forme typique de Van der Waals avec deux régions stables correspondant respectivement à une phase dense de type liquide et à une phase plus diluée de type gaz. Lorsque la température augmente, ces isothermes se déforment suivant le scénario classique: la distinction entre les deux phases s'estompe jusqu'à disparaître complètement à la température critique T_c et au-dessus. L'interprétation de cette température critique comme température limite de stabilité du noyau composé ainsi que l'étude de l'émission de fragments de masse intermédiaire au voisinage de T_c ont été étudiées dans diverses publications^{4, 17-21}.

Des calculs microscopiques^{22, 23} que nous présenterons dans la dernière partie ont montré que la description du noyau composé avec les lois de la mécanique statistique rend nécessaire la considération non pas d'un noyau isolé mais d'un noyau en équilibre avec un gaz environnant constitué des particules qu'il évapore. La présence de cette vapeur dans le calcul microscopique reflète très précisément la présence dans la fonction d'onde nucléaire de composantes non liées qui correspondent aux divers canaux de désexcitation ouverts.

Dans le contexte de l'hydrodynamique, l'équilibre entre le noyau et sa vapeur saturante s'interprète comme la coexistence des deux phases de matière nucléaire mentionnées plus haut. La matière à l'intérieur du noyau est dans la phase liquide dense alors que la vapeur externe est dans l'état plus dilué de la phase gazeuse. La diminution de la différence entre ces deux phases avec l'augmentation de la température vers la température critique T_c a pour équivalent en terme nucléaire l'augmentation de la partie non liée du spectre nucléaire, c'est-à-dire du nombre de voies de désexcitation ouvertes. Au-dessus de la température T_c , le système nucléaire ne peut plus exister en temps que système lié.

Nous allons développer un modèle phénoménologique très simple^{24, 25} pour décrire l'équilibre du noyau composé baignant dans sa vapeur saturante. Ce modèle reproduit qualitativement les résultats obtenus dans les calculs microscopiques dont nous parlerons dans la dernière partie. Il a l'avantage de permettre de discuter précisément de l'importance du terme de surface, provenant de l'interface nucléaire, et de la charge du noyau.

Ce modèle est essentiellement un modèle de goutte liquide à température finie très semblable à celui utilisé en astrophysique²⁶⁻²⁸. On simule le noyau par une goutte de matière nucléaire à bords francs, de densité constante et à une température uniforme. La pression à l'intérieur est donnée par l'équation d'état de la phase liquide de la matière nucléaire infinie. Cette goutte est éventuellement uniformément chargée, de même on peut inclure une tension superficielle. A l'extérieur, les conditions aux limites sont engendrées par une vapeur en équilibre avec les particules qui s'évaporent. Cette vapeur est régie par l'équation d'état de la phase gazeuse de la matière nucléaire infinie.

Avant d'introduire l'équation d'état nucléaire, nous allons brièvement rappeler comment décrire un équilibre liquide-gaz à partir des concepts développés dans la première partie du cours mais avec des notations de physique nucléaire.

II.2. EQUATIONS DE COEXISTENCE LIQUIDE-GAZ

Soit une enceinte d'un volume V contenant exactement N nucléons en équilibre thermique à la température T . Supposons que N_n d'entre eux soient condensés en une goutte de matière nucléaire occupant un volume V_n , les $N_v = N - N_n$ nucléons restant constituent la phase vapeur environnante et occupent donc le volume complémentaire $V_v = V - V_n$. On a là un modèle très simple d'un noyau composé décrit par une goutte liquide en équilibre thermique au sein d'une vapeur de nucléons. L'enceinte globale n'a pas d'intérêt physique en soit pour le cas nucléaire; notons cependant que l'on pourrait décrire ainsi l'équilibre liquide-vapeur de l'eau dans une enceinte V .

De la façon dont nous avons posé le problème, on voit que les variables sont le volume, la température et le nombre de nucléons qui est connu exactement. Ce sont les variables de l'ensemble canonique. Il est alors naturel d'écrire l'énergie libre du système comme la somme de deux termes provenant l'un de la phase liquide, l'autre du gaz:

$$F(T, V, N; V_n, N_n) = F_n(T, V_n, N_n) + F_v(T, V - V_n, N - N_n) \quad (\text{II.1})$$

où F_n et F_v sont donc respectivement l'énergie libre du noyau composé et de la vapeur. Dans cette expression, nous n'avons pas distingué explicitement les protons des neutrons, nous verrons dans la suite comment introduire le champ coulombien de façon approchée. Nous avons donc deux variables supplémentaires N_n et V_n à déterminer, ce sont elles qui caractérisent dans l'enceinte la répartition des nucléons entre les deux phases. En l'absence d'informations supplémentaires sur le système, il nous faut minimiser l'énergie libre par rapport au volume V_n et au nombre de nucléons N_n de la goutte liquide. Comme on l'a vu dans le chapitre précédent, cette minimisation de F est l'équivalent de la maximisation de l'entropie dans l'ensemble canonique. Dans la pratique, nous écrivons seulement que l'énergie libre est stationnaire, sans vérifier s'il s'agit d'un extremum. On obtient ainsi les équations standards de coexistence.

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial V_n} = 0 &\Rightarrow p_n = - \frac{\partial F_n}{\partial V_n} = - \frac{\partial F_v}{\partial V_v} = p_v, \\ \frac{\partial F}{\partial N_n} = 0 &\Rightarrow \mu_n = \frac{\partial F_n}{\partial N_n} = \frac{\partial F_v}{\partial N_v} = \mu_v. \end{aligned} \quad (\text{II.2})$$

Ces équations déterminent le volume d'équilibre et le nombre correspondant de nucléons du noyau composé à une température donnée T pour un nombre total de nucléons N donné dans un volume total V donné. Leur interprétation physique est immédiate. La première exprime l'équilibre des pressions à l'interface liquide-gaz: si l'on visualise cette interface comme une membrane, on voit bien qu'un gradient circulaire de pression romprait l'équilibre et amènerait un déplacement de la membrane. La seconde équation demande l'équilibre des potentiels chimiques. Si l'on écrit la différence d'énergie libre entre un système à $N+1$ et à N nucléons, on voit qu'au premier ordre, le potentiel chimique est l'opposé de

l'énergie de séparation d'un nucléon calculée à température non nulle à partir de l'énergie libre. L'équilibre des potentiels chimiques signifie donc que cela demande autant d'énergie de faire migrer un nucléon de la phase liquide vers la phase gazeuse que l'inverse. Ces deux conditions intuitivement raisonnables trouvent donc leur fondement dans le principe de maximisation de l'entropie.

Dans l'immédiat nous n'incluerons ni terme de surface ni terme coulombien et nous supposons que l'énergie libre pour chacune des phases est proportionnelle au volume. Cela revient à supposer des phases homogènes que l'on peut décrire comme des volumes de matière nucléaire uniforme sans interaction de surface à la frontière entre les deux phases. L'énergie libre peut alors s'écrire pour la phase noyau

$$F_{0n}(T, V_n, N_n) = V_n f_{0n}(T, \rho_n) \quad (II.3)$$

où f_{0n} est l'énergie libre par unité de volume de la phase liquide à la densité $\rho_n = N_n/V_n$. Nous avons rajouté un indice "0" pour signifier l'absence de tension superficielle et de charge. L'expression du potentiel chimique devient:

$$\mu_{0n} = \frac{\partial F_{0n}}{\partial N_n} = V_n \frac{\partial f_{0n}}{\partial \rho_n} \frac{\partial \rho_n}{\partial N_n} = \frac{\partial f_{0n}}{\partial \rho_n} \quad (II.4)$$

tandis que celle de la pression s'écrit:

$$P_{0n} = - \frac{\partial F_{0n}}{\partial V_n} = - f_{0n} - V_n \frac{\partial f_{0n}}{\partial \rho_n} \frac{\partial \rho_n}{\partial V_n} = \rho_n \mu_{0n} - f_{0n} \quad (II.5)$$

ou encore:

$$P_{0n} = - \frac{F_{0n} - \rho_{0n} N_n}{V_n} \quad (II.6)$$

ce qui est bien l'opposé du grand potentiel par unité de volume, expression que nous avons déjà obtenue pour un milieu homogène (I.64).

Remarquons que dans le cas d'un milieu homogène, la pression et le potentiel chimique ne dépendent que de la température et de la densité du milieu. Si l'on dérive la pression par rapport à la densité, on obtient:

$$\frac{\partial P_{0n}}{\partial \rho_n} = \mu_{0n} + \rho_n \frac{\partial \mu_{0n}}{\partial \rho_n} - \frac{\partial f_{0n}}{\partial \rho_n} \quad (II.7)$$

Ce qui donne, compte tenu de (II.4):

$$\frac{\partial P_{0n}}{\partial \rho_n} = \rho_n \frac{\partial \mu_{0n}}{\partial \rho_n} \quad (II.8)$$

Cette relation est une version simplifiée de la relation de Gibbs Duhem (cf. (I.65) et (I.66)) pour un milieu homogène à température constante.

Si l'on suppose de même que la phase gazeuse est homogène, on aura de même $F_{0v} = V f_{0v}$. Les relations (II.4) pour le potentiel chimique μ_{0v} et (II.5) pour

la pression P_{ov} sont aussi valables et les équations de coexistence s'écrivent donc:

$$P_{on} = -(f_{on} - p_n v_{on}) = -(f_{ov} - p_v v_{ov}) = P_{ov} \quad (II.9)$$

$$v_{on} = \frac{\partial f_{on}}{\partial p_n} = \frac{\partial f_{ov}}{\partial p_v} = v_{ov}$$

II.3. EQUATION D'ETAT - DIAGRAMME DE PHASE

Pour résoudre les équations de coexistence, il nous faut une équation d'état. Au lieu de prendre d'emblée une équation d'état dérivée des forces nucléaires, nous allons choisir une variante simplifiée de l'équation de Van der Waals qui présente suffisamment de similitude avec une équation d'état nucléaire pour être tout-à-fait pertinente.

L'équation de Van der Waals s'écrit:

$$P = \frac{kT\rho}{(1-b\rho)} - a\rho^2 \quad (II.10)$$

Elle reproduit bien les isothermes des liquides et des gaz. Les termes en $b\rho$ et $a\rho^2$ mesurent les déviations par rapport aux gaz parfaits où $P = kT\rho$ (soit $PV \propto NkT$). Le terme en $-a\rho^2$ provient d'une interaction faible, attractive et à longue portée, tandis que le terme $-b\rho$ est en quelque sorte une mesure du volume exclu lié à la taille finie des molécules (ou au cœur dur des nucléons), ce qui empêche de comprimer le système au-delà d'une densité minimum $\rho_{min} \sim 1/b$.

L'expression (II.10) n'est pas directement utilisable: en physique nucléaire les forces à deux corps attractives sont telles que le terme en $-a\rho^2$ est trop important et à des densités élevées mais raisonnables du point de vue nucléaire, la pression deviendrait négative. Pour éviter cet inconvénient, on peut introduire un terme répulsif d'ordre supérieur en ρ^{2D} :

$$P = kT\rho - a\rho^2 + \frac{c\rho^3(2-b\rho)}{(1-b\rho)^2} \quad (II.11)$$

Le terme en $c\rho^3$, corrigé des effets de cœur dur ($b \neq 0$) simule l'effet répulsif de forces à trois qui deviennent importantes à haute densité et empêchent le système de s'effondrer sur lui-même. Le potentiel chimique peut s'obtenir à partir de la pression grâce à la relation de Gibbs Duhem (II.8) mais à une constante pres dépendante de la température. (On en trouvera dans la réf.29 une dérivation complète). Pour montrer l'allure générale des isothermes nous avons encore simplifié l'expression (II.10) en négligeant les effets dus au cœur dur ($b=0$): la dépendance en densité introduite par le terme en $c\rho^3$ est de loin la plus significative. Ceci conduit à l'équation d'état approchée:

$$P = kT\rho - a\rho^2 + 2c\rho^3 \quad (II.12)$$

le potentiel chimique s'écrit:

$$p = kT \text{Log}(\rho) - 2a\rho + 3c\rho^2 + \mu_0(T) \quad (II.13)$$

avec (voir ref.29):

$$\mu_0(T) = \frac{3}{2} kT \text{Log} \frac{\lambda}{kT} \quad (II.14)$$

La figure II.1 montre le réseau d'isothermes que l'on obtient pour différentes valeurs de la température. Le choix des paramètres a, c et λ dans (II.12), (II.13) et (II.14) est arbitraire, les unités n'ont donc aucune signification quantitative, seul l'aspect qualitatif est à considérer.

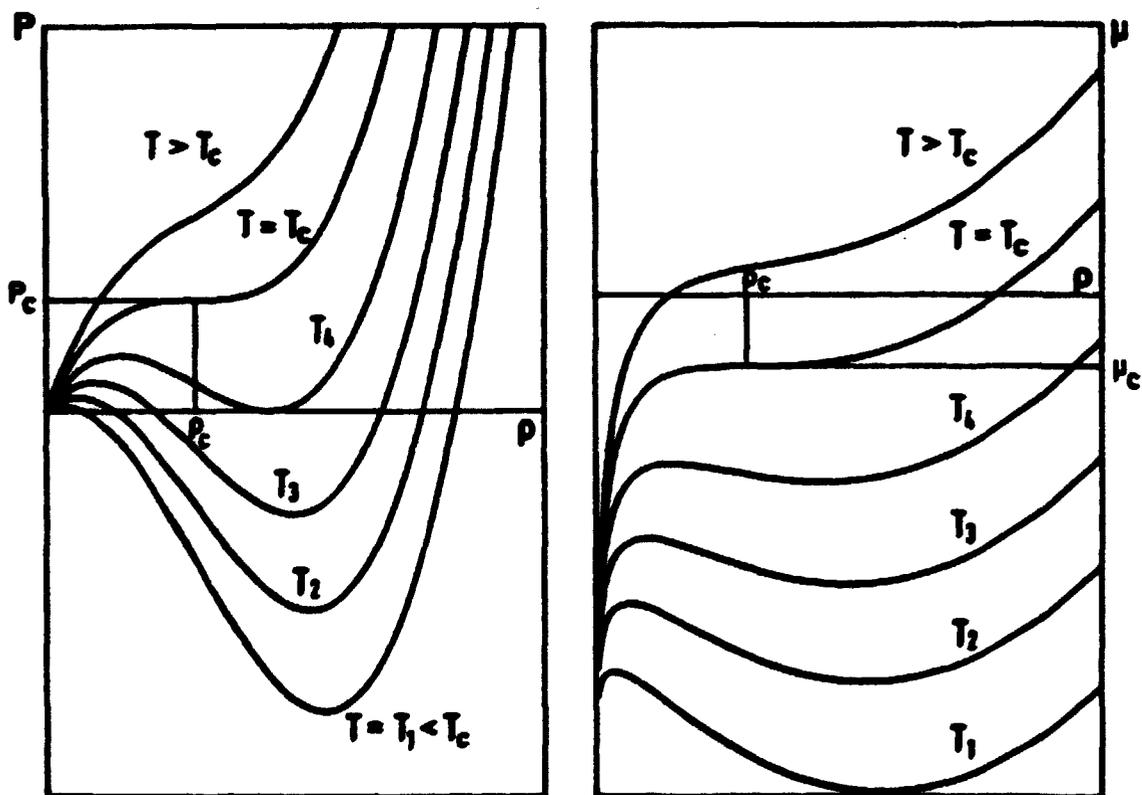


Fig. II.1 - Isothermes $P(\rho)$ et $\mu(\rho)$ calculées à partir de l'équation d'état (II.12) pour différentes températures ($T_1 < T_2 < \dots$).

On observe sur la figure l'évolution des isothermes lorsque la température augmente. Elles ont une forme similaire à celles de Van der Waals. En-dessous de la température T_c , chaque isotherme présente deux régions stables où la dérivée de la pression par rapport à la densité est positive. La vapeur correspond à la région de basse densité, à gauche du maximum, le liquide à la région de haute densité, à droite du minimum. Les maximums et minimums entre la pression et le potentiel chimique se correspondent: à cause de la relation (II.8), les dérivées

de P et de μ par rapport à ρ s'annulent en même temps.

Les deux régions physiques stables, liquide et vapeur, sont séparées par une région non physique où la dérivée $\partial P/\partial \rho$ est négative. En effet, soit un système préparé à une densité intermédiaire située entre les extrêmes d'une isotherme donnée $P(\rho)$. Si l'on augmente légèrement le volume à nombre de particules constant dans l'enceinte, la densité diminue et la pression augmente tendant ainsi à augmenter encore le volume. au contraire, une diminution de volume, équivalente à une augmentation de densité, entraîne une diminution de la pression et le système tend à se diluer de plus en plus. Dans les deux cas, à un petit déplacement le système ne développe aucune force de rappel et est instable.

Les régions liquides et gazeuses de ces isothermes pour $T < T_c$ donnent les équations d'états $P_{on}(\rho_n)$ et $P_{ov}(\rho_v)$ dans les équations de coexistence (II.9). Enfin, à la température critique T_c la distinction entre les deux phases disparaît et au-delà de T_c le système n'existe plus que dans une seule phase.

Une autre façon de visualiser les isothermes $P(\rho)$ et $\mu(\rho)$ consiste à les tracer dans le plan (P, μ) , les équations (II.12) et (II.13) étant considérées comme une représentation paramétrique de ces isothermes en fonction de ρ . La figure II.2 montre une telle représentation des isothermes calculées aux mêmes températures que sur la figure II.1.

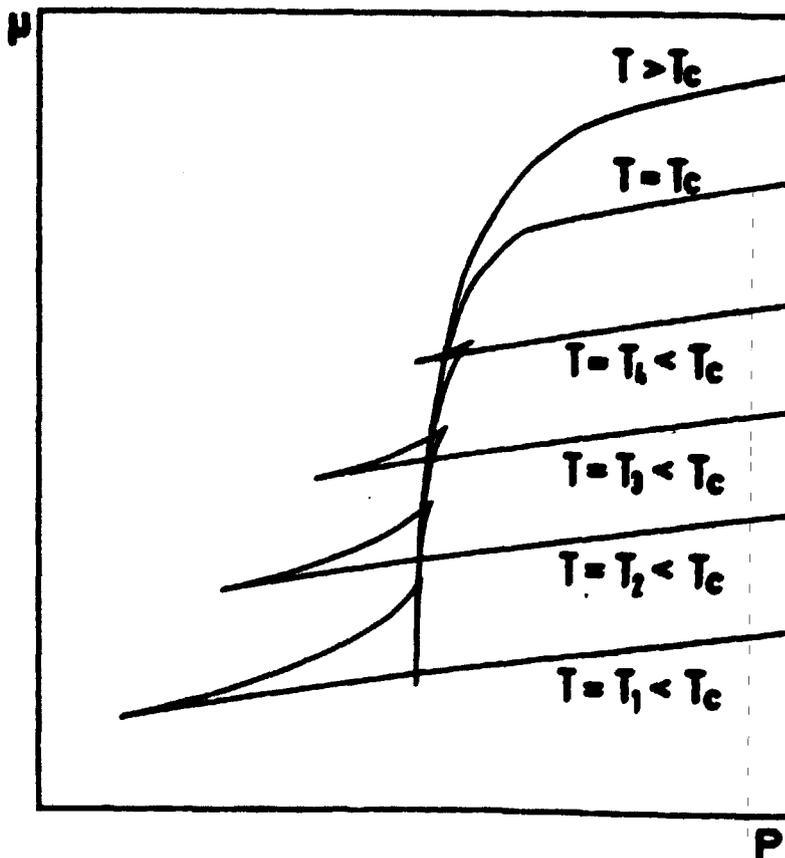


Fig. II.2 - Isothermes tracées dans le plan (P, μ) pour l'équation d'état (II.12) et (II.13) aux mêmes températures que la figure II.1.

En-dessous de la température critique, ces isothermes présentent une forme typique en "coude d'arade" avec deux points de rebroussement correspondant aux maximums et aux minimums de $P(\rho)$ et $\mu(\rho)$ comme fonction de ρ . La phase gazeuse correspond à la branche ascendante proche de la verticale, la région non physique est située entre les deux points de rebroussement et la phase liquide est représentée par la troisième branche oblique. Cette représentation a l'avantage de fournir immédiatement une solution graphique aux équations de coexistence comme nous allons le voir dans la section suivante.

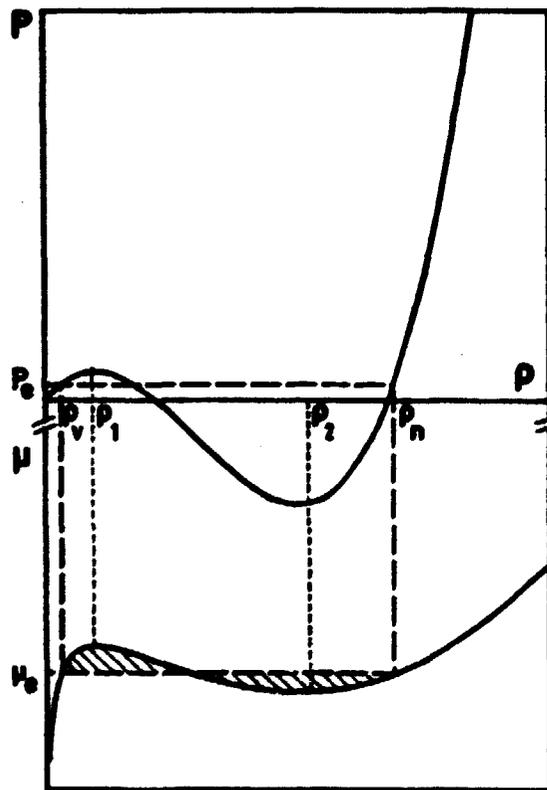


Fig. II.3 - Isotherme de l'équation d'état (11.12) pour la température $T=T_2$ de la figure 11.1. La solution des équations de coexistence est indiquée en tiret.

II.4. SOLUTIONS DES EQUATIONS DE COEXISTENCE - CONSTRUCTION DE MAXWELL

Pour illustrer la façon de résoudre les équations de coexistence nous avons redessiné sur la figure II.3 l'une des isothermes de la figure II.1 pour une température inférieure à la température critique ($T = T_2 < T_c$). La phase liquide, $P_{0n}(\rho_n)$ et $\mu_{0n}(\rho_n)$ correspond donc aux densités $\rho_n > \rho_2$ (minimum de P et de μ) tandis que la phase gazeuse, $P_{0v}(\rho_v)$ et $\mu_{0v}(\rho_v)$, correspond comme on l'a vu, aux densités $\rho_v < \rho_1$ (maximum de P et de μ). On doit donc avoir:

$$P_{ov}(\rho_v) = P_{on}(\rho_n) \quad . \quad (11.15)$$

$$\mu_{ov}(\rho_v) = \mu_{on}(\rho_n) \quad .$$

On obtient la solution numérique de ces équations par un processus itératif adéquat, ce qui donne, en sus des deux densités ρ_v et ρ_n , la pression P_e et le potentiel chimique μ_e d'équilibre. Cette solution est reportée sur les figures II.3 et II.4 pour l'isotherme qui y est dessinée. Lorsque cette isotherme est tracée dans le plan (P, μ) , on obtient le point (P_e, μ_e) de coexistence des deux phases liquide et gazeuse à l'intersection des deux branches de l'isotherme. Les densités ρ_n et ρ_v sont alors solutions de l'une ou l'autre des équations:

$$P_e = P_{on}(\rho_n) = P_{ov}(\rho_v) \quad .$$

$$\mu_e = \mu_{on}(\rho_n) = \mu_{ov}(\rho_v) \quad .$$

Sur la figure II.4 où l'isotherme est dessinée dans le plan (P, μ) , on a reporté la pression P_e et le potentiel chimique μ_e d'équilibre.

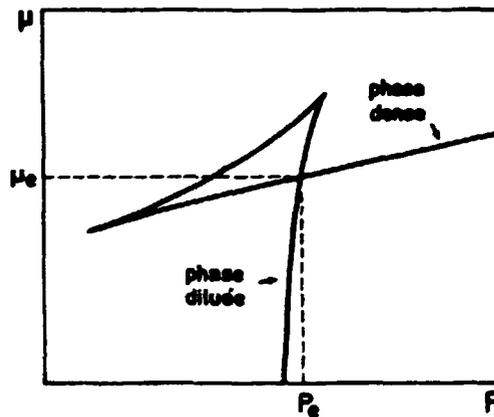


Fig. II.4 - Même isotherme que pour la figure II.3 dans le plan (P, μ) .

Traditionnellement en thermodynamique on représente plutôt la pression et le potentiel chimique en fonction de la variable volume à nombre de nucléons constant soit en fonction de $1/\rho$. Nous avons redessiné sur la figure II.5 l'isotherme qui nous a servi d'exemple en fonction du volume en fixant arbitrairement le nombre de nucléons. Les régions correspondant aux phases liquide et gazeuse sont échangées: la phase liquide est à gauche du minimum (petit volume, $V < V_2$), la phase gazeuse est à droite du maximum de l'isotherme (grand volume, $V > V_1$). La ligne horizontale qui rejoint les points de coexistence liquide-gaz (noté L et G sur la figure) s'appelle le palier de vaporisation.

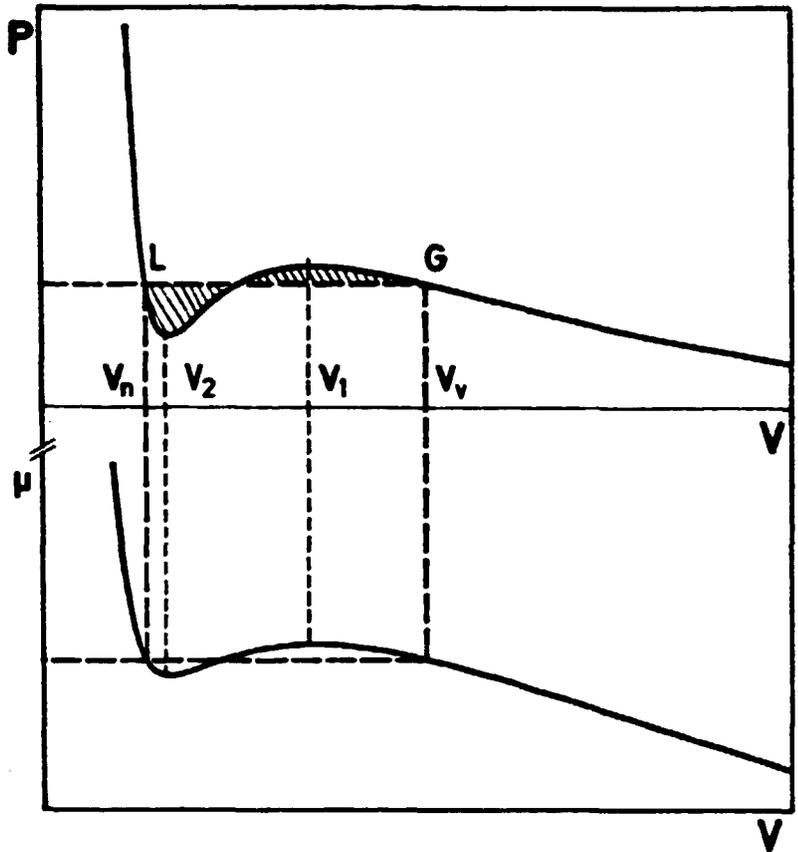


Fig. 11.5 - Isotherme des figures 11.3 et 11.4 dessinée dans la variable volume V.

Calculons l'aire comprise sous la courbe P(V) entre L et G:

$$\int_{V_n}^{V_v} P dV = [PV]_{V_n}^{V_v} - \int_{V_n}^{V_v} V dP \quad (II.16)$$

Nous avons fait une intégration par partie pour calculer (II.16). Le terme tout intégré donne $P_v(V_v - V_n)$, c'est-à-dire l'aire du rectangle LGV_vV_n. En utilisant la relation de Gibbs-Duhem à T constant: $VdP = Nd\mu$ (cf (I.65)) on peut intégrer le deuxième terme:

$$\int_{V_n}^{V_v} V dP = N \int_{V_n}^{V_v} d\mu = N[\mu]_{V_n}^{V_v} = 0$$

Et donc l'aire sous la courbe P(V) entre L et G et l'aire du rectangle LGV_vV_n sont égales ce qui conduit, par différence, à l'égalité des aires hachurées. La démonstration de cette égalité que nous venons de faire s'appuie sur les développements microscopiques que nous avons fait dans la première partie à travers la relation de Gibbs-Duhem. Cette égalité des aires est connue sous le nom de régle de Maxwell: elle détermine la position du palier de vaporisation lorsque l'isotherme fournie par la théorie présente un minimum et un maximum.

On donne habituellement en thermodynamique l'argument suivant pour

justifier la construction de Maxwell: dans la transformation isotherme en circuit fermé de L vers G le long de l'isotherme puis de G vers L (cf. fig.II.5) le long du palier, le travail reçu, égal à l'aire enfermée, doit être nul en vertu du second principe, et donc la somme algébrique des aires hachurées doit être nulle. Cet argument n'est guère satisfaisant car la transformation invoquée fait décrire au système une région non physique de l'isotherme. Si les régions situées l'une, entre le point L et le minimum, l'autre, entre le maximum et le point G et correspondant toutes deux aux branches descendantes de l'isotherme parcourue lors de la transformation, peuvent être associées à des minimums relatifs de l'énergie libre et décrire des états métastables hors d'équilibre (vapeurs sursaturantes ou liquides surchauffés), la partie ascendante n'est associée à aucun minimum relatif de F et n'a aucun sens physique.

Revenant à la figure II.3 qui donne une isotherme en fonction de p , un raisonnement en tout ~~est~~ semblable à celui qui nous a permis de justifier la construction de Maxwell entraîne pour le potentiel chimique l'égalité des aires hachurées. En effet l'aire sous l'isotherme $\mu(p)$ entre p_v et p_l vaut:

$$\int_{p_v}^{p_l} \mu dp = [\mu p]_{p_v}^{p_l} - \int_{p_v}^{p_l} p \frac{\partial \mu}{\partial p} dp \quad (II.17)$$

Le terme entre crochet est égal à l'aire du rectangle sous le palier de vaporisation: $\mu_v(p_l - p_v)$ et le dernier terme peut s'intégrer en utilisant la relation de Gibbs-Duhem sous la forme (II.8):

$$\int_{p_v}^{p_l} p \frac{\partial \mu}{\partial p} dp = \int_{p_v}^{p_l} \frac{\partial p}{\partial p} dp = [p]_{p_v}^{p_l} = 0 \quad (II.18)$$

Ce qui achève de démontrer le résultat annoncé. On a là pour les potentiels chimiques une règle analogue à la règle de Maxwell pour les pressions.

En physique nucléaire on trace en général les isothermes en fonction de la densité plutôt que du volume, la densité étant plus adéquate pour l'étude des noyaux que le volume qui reste plus mal déterminé. Remarquons enfin qu'en l'absence de tension superficielle, nous ne pouvons rien dire sur la forme de l'interface. La tension superficielle peut déterminer la taille des gouttes de liquide dans la vapeur, ou de bulles de vapeur dans le liquide. La séparation des phases peut aussi être réalisée par un champ extérieur comme la gravitation dans l'équilibre liquide-vapeur saturante de l'eau.

II.5. EQUATION D'ETAT NUCLEAIRE - TENSION SUPERFICIELLE - INTERACTION COULOMBIENNE

On peut obtenir une équation d'état nucléaire directement à partir d'une force effective de type Skyrme par exemple. Ce travail a été fait et conduit à des expressions compliquées et assez lourdes à manipuler. Le choix que nous avons fait dans la suite a été guidé par le souci d'avoir à la fois des résultats qualitativement correctes et suffisamment simples pour pouvoir mettre en évidence

les principaux effets: le but recherché est avant tout de montrer la dépendance de la stabilité d'un noyau par rapport à l'équation d'état et aussi d'introduire le plus simplement possible la tension superficielle et le champ coulombien.

Dans la réf. 14, une équation d'état relativement simple a été suggérée, elle peut se mettre sous la forme:

$$P_0(T, \rho) = T\rho - a_0^I(T)\rho^2 + a_3(1+\sigma)\rho^{2+\sigma} \quad (11.19)$$

ou

$$a_0^I(T) = a_0 - \frac{1}{2^{3/2}g} \left(\frac{2\pi\hbar^2}{m} \right)^{3/2} T^{-1/2} \quad (11.20)$$

Dans cette dernière expression, m est la masse du nucléon et $g=4$ la dégénérescence en spin et en isospin. Le paramètre σ contrôle la rigidité de l'équation d'état et est relié, ainsi que les constantes a_0 et a_3 , aux propriétés de l'état fondamental de la matière nucléaire¹⁴ par:

$$\begin{aligned} \sigma &= \frac{(K-9E_B-E_K)}{(9E_B+3E_K)} \\ a_0 &= \frac{(1+\sigma)E_B + (\sigma+1/3)E_K}{\rho_0 \sigma} \\ a_3 &= \frac{(E_B+E_K/3)}{\sigma \rho_0^{1+\sigma}} \end{aligned} \quad (11.21)$$

où E_B et E_K sont les énergies de liaison et cinétiques par particule de la matière nucléaire, ρ_0 est la densité de saturation et K est le module d'incompressibilité du fondamental:

$$K = 9\rho_0^2 \left. \frac{\partial^2 E}{\partial \rho^2} \right|_{\rho_0}$$

Cette expression (11.19) de l'équation d'état avec les définitions des coefficients ci-dessus est une approximation de basse densité mais à haute température obtenue à partir de celle qu'on peut dériver dans le cadre de l'approximation Hartree-Fock en utilisant une interaction particulière de type Skyrme. Elle peut être améliorée en ajoutant des termes de puissance supérieure en ρ et en incluant la dépendance en densité de la masse effective¹⁴. Toutefois, un inconvénient sérieux est l'absence complète d'effets liés au spin-orbite associé à l'énergie de symétrie. Néanmoins, à cause de sa simplicité et de la qualité de ses résultats, elle est tout-à-fait suffisante pour le but recherché.

Sauf indication contraire, les paramètres utilisés dans les calculs sont définis par:

$$\begin{aligned} E_B &= 16 \text{ MeV} & \rho_0 &= 0,17 \text{ Fm}^{-3} \\ E_K &= 24 \text{ MeV} & K &= 222 \text{ MeV} \end{aligned} \quad (11.22)$$

Par suite:

$$\sigma = \frac{1}{4} \quad a_0 = 800 \text{ Fm}^{-6} \quad a_2 = 879.448 \text{ Fm}^{-27/4} \quad (II.23)$$

Les isothermes calculées avec ces valeurs des paramètres et l'équation d'état (II.19) sont données sur la figure II.6. Elles ont des formes de Van der Waals avec un point critique à $T_c = 17.22 \text{ MeV}$ pour $\rho_c = 0.057 \text{ Fm}^{-3}$ et $P_c = 0.27 \text{ MeV Fm}^{-3}$. En-dessous de la température critique, les isothermes ont deux régions stables, où la dérivée de la pression par rapport à ρ est positive; la vapeur correspond à la région de basse densité et le liquide à la région de haute densité. Ces deux phases sont séparées par la région non physique où la dérivée $\partial P/\partial \rho$ est négative. Comme on l'a déjà discuté, les régions liquides et gazeuses de ces isothermes donnent les équations d'état respectives pour les pressions $P_{on}(T, \rho_n)$ et $P_{ov}(T, \rho_v)$ dans les équations de coexistence (II.15).

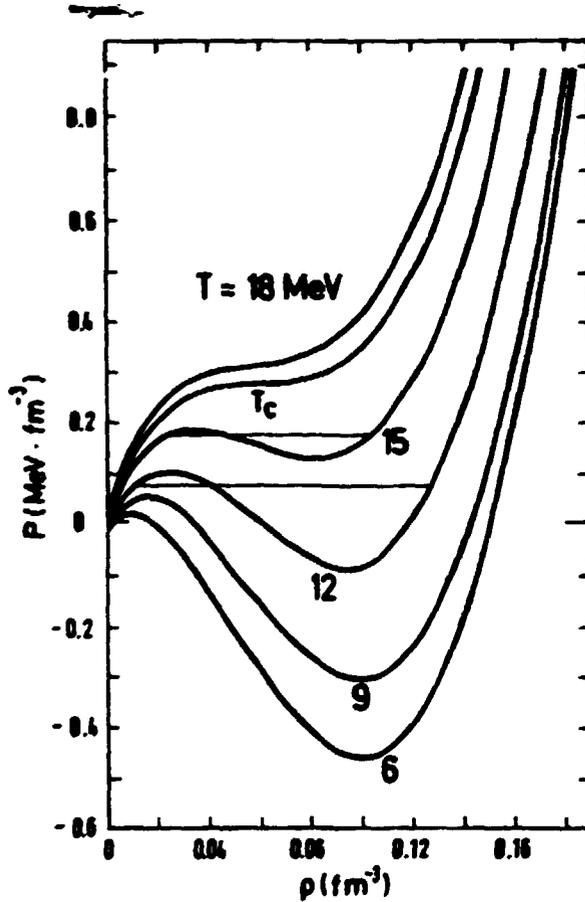


Fig. II.6 - Isothermes des pressions calculées avec l'équation d'état (II.19) et les paramètres (II.23). Les lignes horizontales pour $T=12$ et 15 MeV indiquent les paliers de coexistence entre les phases liquides et gazeuses en l'absence de tension superficielle et de champ coulombien.

C'est la similitude entre l'expression (II.19) de l'équation d'état

nucléaire (à la dépendance en température près du terme $a_0^1(T)$) pour $\sigma = 1$ et l'équation de Van der Waals simplifiée - et modifiée - (II.12) qui a conduit à l'étude de la possibilité d'une transition de phase liquide-gaz dans la matière nucléaire. D'ailleurs la valeur $\sigma = 1$ qui conduit du terme en ρ^3 dans $P(\rho)$ correspond au choix traditionnel des forces de Skyrme avec un terme dépendant des densités en ρ^8 dans l'interaction à deux corps. Les valeurs inférieures de σ ($\sigma = 1/4$ à $1/6$) sont nécessaires pour abaisser le module d'incompressibilité de $K \approx 380$ MeV à $K \approx 220$ MeV. Cette similitude est frappante si l'on compare les isothermes $P(\rho)$ correspondant à l'équation (II.12) pour des gaz réels (fig. II.1) et les isothermes obtenues pour la matière nucléaire infinie (fig. II.6).

Il faut aussi déterminer les potentiels chimiques correspondants μ_{on} et μ_{ov} . Comme on l'a vu, ils s'obtiennent à une constante près à partir de la relation de Gibbs-Duhem (II.8):

$$\tilde{\mu}(T, \rho) = \mu(T, \rho) - \mu_0(T) = T \ln \rho - 2a_0^1(T)\rho + a_3(2+\sigma)\rho^{1+\sigma} \quad (II.24)$$

où $\mu_0(T)$ est une fonction arbitraire de T .

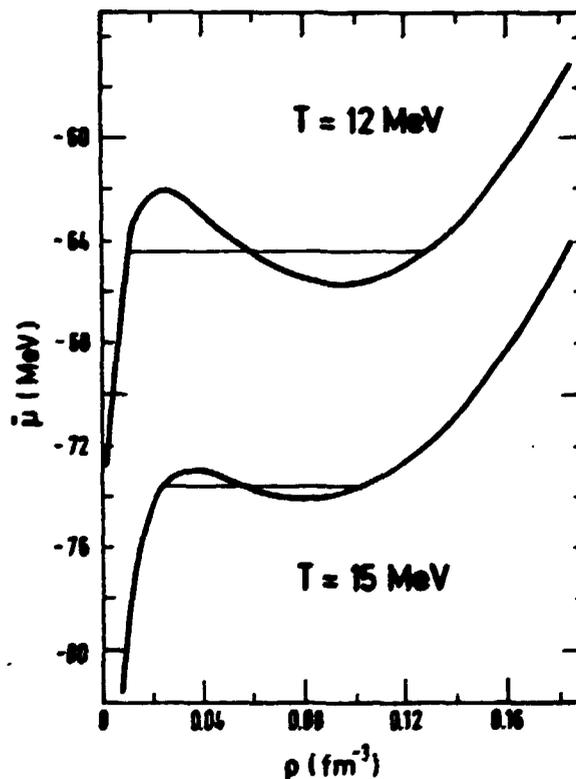


Fig. II.7 - Isothermes du potentiel chimique en fonction de la densité. Le calcul est fait à partir de l'expression (II.24). Les courbes horizontales sont les paliers de coexistence des phases liquide-gaz pour les températures considérées. Comme pour la figure II.6, ni la tension superficielle, ni le champ coulombien ne sont inclus.

Puisque dans l'équation de coexistence (II.15) intervient seulement l'égalité des potentiels chimiques, $\mu_0(T)$ va s'éliminer et sa détermination précise est donc sans objet. Les courbes en trait plein de la figure II.7 montrent des exemples de potentiels chimiques calculés pour différentes températures avec l'équation (II.24). A cause de la relation de Gibbs-Duhem, les minimums et les maximums de ces courbes correspondent à ceux des isothermes $P(\rho)$ de la figure II.6. Comme pour la pression, les parties gaz et liquide des isothermes $\mu(\rho)$, c'est-à-dire les régions à basse (avant le maximum) et à haute densité (après le minimum) fournissent les potentiels chimiques $\mu_{0g}(T, \rho_0)$ et $\mu_{0l}(T, \rho_0)$ à reporter dans l'équation de coexistence (II.15).

II.6 - TENSION SUPERFICIELLE - INTERACTION COULOMBIENNE

Pour introduire les effets de surface et l'interaction coulombienne dans les équations de coexistence, il nous faut revenir à l'expression de l'énergie libre dont elles dérivent. Considérant le noyau comme une goutte uniformément chargée, nous pouvons écrire son énergie libre non plus seulement comme un terme de volume mais comme une somme à trois termes: volume, surface et coulomb. Dans l'énergie libre totale (II.1), la contribution du noyau devient donc:

$$F_n(T, V_n, N_n) = F_{0n}(T, V_n, N_n) + F_{surf}(T, S_n) + F_{coul}(V_n) \quad (II.25)$$

L'énergie de volume a déjà été étudiée en détail dans la section précédente. Les termes de surface et de coulomb s'écrivent:

$$F_{surf}(T, S_n) = \alpha(T) S_n = \alpha(T) 4\pi R_n^2 \quad (II.26)$$

$$F_{coul}(V_n) = \frac{3}{5} \frac{Z^2 e^2}{R_n} \quad (II.27)$$

Ces expressions sont appropriées pour une sphère uniformément chargée de surface S_n , de rayon R_n , de charge Z ayant une tension superficielle $\alpha(T)$ dépendant de la température. La forme explicite de $\alpha(T)$, qui reste à choisir, a, avec l'équation d'état $P_{0n}(T, \rho_n)$, un rôle déterminant sur le comportement des noyaux à hautes températures. L'expression (II.27) du terme coulombien est indépendante de la température, de ce fait elle implique un certain nombre d'hypothèses simplificatrices (voir ref. 26) qui ne doivent pas modifier radicalement notre discussion.

Comme nous ne cherchons qu'à montrer qualitativement l'origine de l'instabilité des noyaux, nous n'avons pas introduit explicitement les protons et les neutrons, ce qui nous aurait conduit à introduire deux potentiels chimiques avec comme conséquence des équations de coexistence à la structure plus complexe. Aussi la charge Z du noyau sera définie par $Z = \kappa A$ ou κ est un paramètre fixe externe à déterminer dans chaque cas suivant le noyau considéré.

En revenant à la forme première (II.2) des équations de coexistence, on

voit que les termes rajoutés à F_{0n} dans (II.25) vont modifier les équations que l'on peut maintenant réécrire:

$$P_{0n}(T, r_n) + \delta P_n(T, \rho_n, A) = P_{0v}(T, \rho_v) \quad (II.28a)$$

$$\mu_{0n}(T, \rho_n) + \delta \mu_n(T, \rho_n, A) = \mu_{0v}(T, \rho_v) \quad (II.28b)$$

où $P_{0n} = P_{0v}$, μ_{0n} et μ_{0v} sont les pressions et potentiels chimiques du liquide et de la vapeur. Les termes supplémentaires sont:

$$\delta P_n = P_{coul} + P_{surf} = \left(\frac{4\pi \rho_n}{3A} \right)^{1/2} \left[\frac{Z^2 e^2}{5A} \rho_n - 2\alpha(T) \right] \quad (II.29a)$$

$$\delta \mu_n = \mu_{coul} = \left(\frac{4\pi \rho_n}{3A} \right)^{1/2} \frac{6\pi Z e^2}{5} \quad (II.29b)$$

où l'on a utilisé le fait que $x = Z/A$ fixe la fraction de nucléons chargés. L'interprétation physique de ces termes supplémentaires est immédiate. La répulsion coulombienne induit un terme supplémentaire positif dans la pression tandis que la tension superficielle au contraire réduit la pression interne. En terme imagé la pression nécessaire pour maintenir le noyau composé est le résultat d'un compromis entre la tension superficielle qui aide à maintenir le noyau et la répulsion coulombienne qu'il faut contrebalancer. De plus le terme coulombien induit une modification du potentiel chimique proportionnelle à la fraction x de protons à l'intérieur du noyau.

Il nous faut maintenant définir la tension superficielle $\alpha(T)$. Une étude détaillée en a été présentée dans la ref. 27, dans les calculs que nous allons présenter une forme plus simple est utilisée²⁰:

$$\alpha(T) = \alpha_0 \left(1 + \frac{3}{2} \frac{T}{T_c} \right) \left(1 - \frac{T}{T_c} \right)^{3/2} \quad (II.30)$$

où T_c est la température critique. La tension superficielle à température nulle vaut:

$$\alpha_0 = 18 \text{ MeV}/4\pi r_0^2 = 1,14 \text{ MeV Fm}^{-2} \quad (II.31)$$

c'est la valeur des formules de masse semi-empiriques avec $r_0 = 1,12 \text{ Fm}$. Pour comparaison nous avons aussi utilisé l'expression:

$$\alpha(T) = \alpha_0 \left(1 - \frac{T}{T_c} \right)^2 \quad (II.32)$$

qui a été introduite dans la ref. 11. Les deux expressions (II.30) et (II.32) s'annulent à la température critique mais approchent cette limite de façon différente. A basse température l'expression (II.30) est quadratique en T ce qui est plus satisfaisant que l'expression (II.32) qui est linéaire en T .

En principe l'équation d'état et la tension superficielle devraient être déterminées à partir du même hamiltonien microscopique et devraient donc être

reliées. Nous n'avons pas cette relation et nous les varierons indépendamment quoique la température critique T_c figurant dans la tension superficielle soit celle déterminée par l'équation d'état.

II.7 - EQUILIBRE EN L'ABSENCE DE CHAMP COULOMBIEN

Lorsque la tension superficielle est incluse, mais sans terme coulombien, le problème est alors celui d'une goutte de matière nucléaire non chargée baignant dans la vapeur environnante. Dans ce cas, l'équation (II.28b) de coexistence pour les potentiels chimiques reste inchangée ($\delta\mu_n=0$) tandis que dans l'équation d'égalité des pressions (II.28a) le terme δP_n est rajouté:

$$\delta P_n = -2\alpha(T) \left(\frac{4\pi \rho_n}{3} \right)^{1/3} = -2\alpha(T) \frac{1}{R_n}$$

Ce terme est l'expression usuelle de la différence de pression à travers une interface sphérique: la pression interne est supérieure à la pression externe, la différence étant contrebalancée par la tension superficielle. Cette différence dépend du rayon R_n de la goutte et donc du nombre de nucléons A. Les équations de coexistence auront une solution qui va dépendre du noyau considéré. C'est la première dépendance explicite en A qui apparaît dans l'équilibre noyau-vapeur. Cette dépendance sera encore plus accusée lorsque nous introduirons le terme coulombien.

Restant pour l'instant au cas non chargé, on voit que la solution des équations (II.28) donne des expressions pour les pressions P_{on} et P_{ov} de volume et pour les potentiels chimiques associés $\mu_{on} = \mu_{ov}$ qui sont fonction et de la température, et de A. Pour apprécier les modifications introduites par la tension superficielle à l'équilibre en volume discuté plus haut, il est plus facile de représenter les nouvelles valeurs sur les isothermes dessinées en l'absence de terme de surface. La figure II.8 donne un exemple illustratif pour le noyau non chargé ^{109}Ag avec le coefficient $\alpha(T)$ de surface donné par l'expression (II.30). Pour les températures $T = 12 \text{ MeV}$ et $T = 15 \text{ MeV}$, les lignes en tirets joignent les points de coexistence. Comme les pressions internes de la phase liquide sont modifiées par le terme δP_n et ne sont plus égales aux pressions de la vapeur, ces lignes n'ont plus de raisons d'être horizontales.

La pression interne totale, corrigée du terme de surface: $P_{on} + \delta P_n(T, \rho, A)$ a été dessinée sur la figure II.8 pour l'isotherme $T = 12 \text{ MeV}$ pour le noyau ^{109}Ag (non chargé). L'équilibre demande l'égalité de cette pression et de la pression de vapeur P_{ov} . La ligne verticale aide à voir cette égalité: la pression à laquelle elle coupe l'isotherme en pointillé ($P + \delta P$ à $T = 12 \text{ MeV}$) est égale à la pression de vapeur figurée par le point noir sur la partie gauche stable de l'isotherme $T = 12 \text{ MeV}$ pour la vapeur.

Comme l'équation (II.28b) pour les potentiels chimiques n'est pas explicitement modifiée pour des noyaux non chargés, les points de coexistence sont

toujours aux extrémités d'une ligne horizontale qui ne sont cependant plus celles obtenues pour l'équilibre en volume sans terme de surface: c'est la conséquence implicite sur cette équation de la modification de l'égalité des pressions par $2P_n$. La modification principale due au terme de surface est dans le changement des isothermes de la phase liquide. Cette modification disparaît à la température critique quel que soit A. En-dessous de la température critique, on peut observer que la tension superficielle déplace l'équilibre vers un équilibre avec un potentiel chimique moins profond, une phase gazeuse moins dense et une phase liquide plus dense. Ce changement se comprend qualitativement assez simplement: la tension superficielle aide à maintenir le noyau stable, prenant ainsi le relais d'une partie de la vapeur nécessaire à l'équilibre en l'absence d'effet de surface.

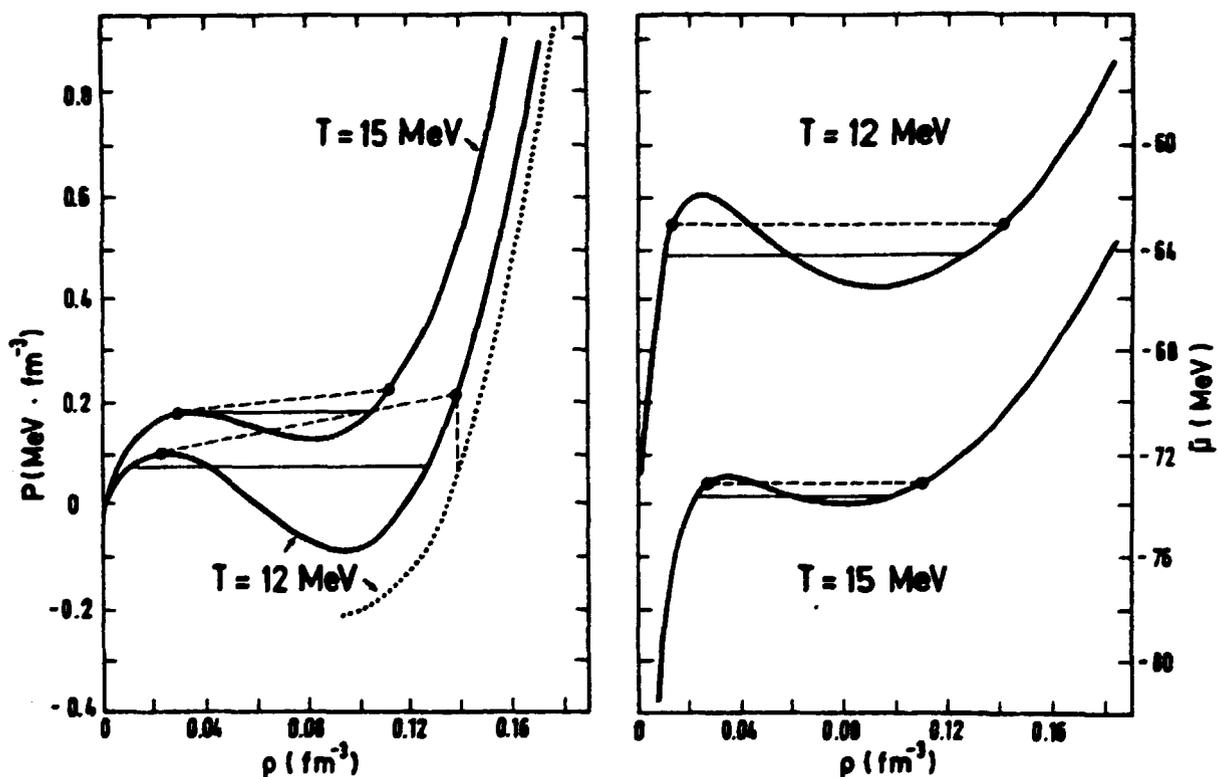


Fig. 11.8 - Isothermes de la Pression (à gauche) et du potentiel chimique (à droite) pour $T = 12 \text{ MeV}$ et $T = 15 \text{ MeV}$. Les paliers de coexistence horizontaux (trait plein) sont obtenus sans tension superficielle. Les points reliés par des tirets illustrent la coexistence d'une goutte non chargée ($A = 109, Z=0; {}^{109}\text{Ag}$ non chargé) avec la vapeur environnante. La courbe en pointillé ($T = 12 \text{ MeV}$) donne la pression totale de la goutte. La ligne verticale joint les points de coexistence sur les isothermes avec et sans terme de surface.

La tension superficielle $\alpha(T)$, et donc la pression induite $P_{\text{surf}}(T, \rho_n, A)$ tend vers 0 lorsque la température T approche de la température critique T_c . Par suite, la différence entre les points de coexistence pour un noyau non chargé avec et sans tension superficielle décroît lorsque T croît pour s'annuler à T_c . Les équations de coexistence peuvent donc avoir une solution pour toute température inférieure à T_c . En fait, la tension superficielle ne s'annule pas "assez vite" lorsque T tend vers T_c et il apparaît une température limite T_{lim} maximum inférieure à T_c au-delà de laquelle les équations de coexistence n'ont pas de solution. La figure 11.9 montre la variation de cette température limite avec le nombre de nucléons de la goutte nucléaire.

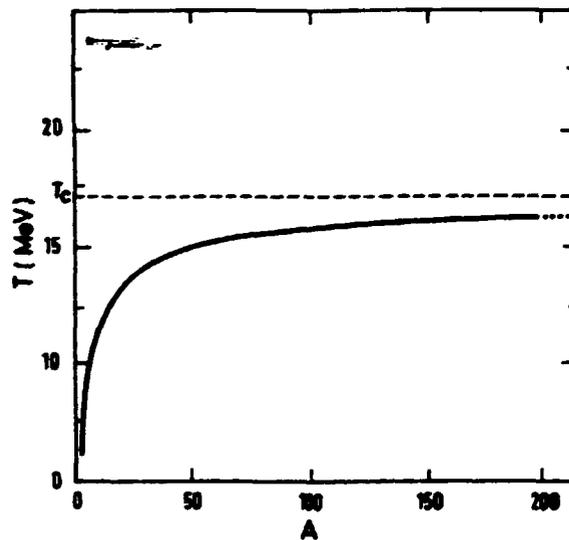


Fig. 11.9 - Température limite au-delà de laquelle les équations de coexistence n'ont plus de solution lorsque seule la tension superficielle est incluse. La ligne en tirets horizontale indique la température critique $T_c = 17.22$ MeV pour la transition de phase dans la matière nucléaire infinie.

La diminution de $T_c - T_{\text{lim}}$ lorsque A augmente est en accord avec l'évolution de l'énergie de surface qui, ramenée à l'énergie de volume, décroît comme $A^{-1/3}$ et est donc de moins en moins efficace pour produire cette différence.

L'abaissement de la température de stabilité entre les deux phases, du à la tension superficielle est certes remarquable, cependant il n'a aucune implication expérimentale. En effet, comme nous allons le voir dans la section suivante, l'effet du ou champ coulombien sera bien plus important et va complètement masquer celui de l'énergie de surface.

II.8 - INFLUENCE DE LA CHARGE SUR L'EQUILIBRE

Pour observer les changements dus à la charge, nous avons considéré le même noyau ^{109}Ag , mais chargé. Avec $\alpha(T)$ toujours donné par l'expression (II.30), les isothermes P et μ sont dessinées pour deux températures sur les figures II.10 et II.11. Analysons tout d'abord les parties gauches de ces figures (isothermes $T = 5 \text{ MeV}$). Comme précédemment (cf. fig. II.8), les points sur les isothermes de volume représentent les points de coexistence. Pour la phase liquide, à l'intérieur du noyau, les lignes en pointillés représentent les isothermes $P_{0n} + \delta P_n$ (fig. II.10) et $\mu_{0n} + \delta \mu_n$ (fig. II.11). Les lignes horizontales correspondent à la construction de Maxwell usuelle en l'absence de tension superficielle ($\alpha(T) = 0$) et de champ coulombien ($Z = 0$) tandis que la ligne en tiret joint les points de coexistence lorsque ces effets sont inclus. Les lignes verticales permettent de mieux voir l'équilibre entre les phases et les contributions δP_n et $\delta \mu_n$ à la pression et au potentiel chimique de la goutte dans la phase liquide.

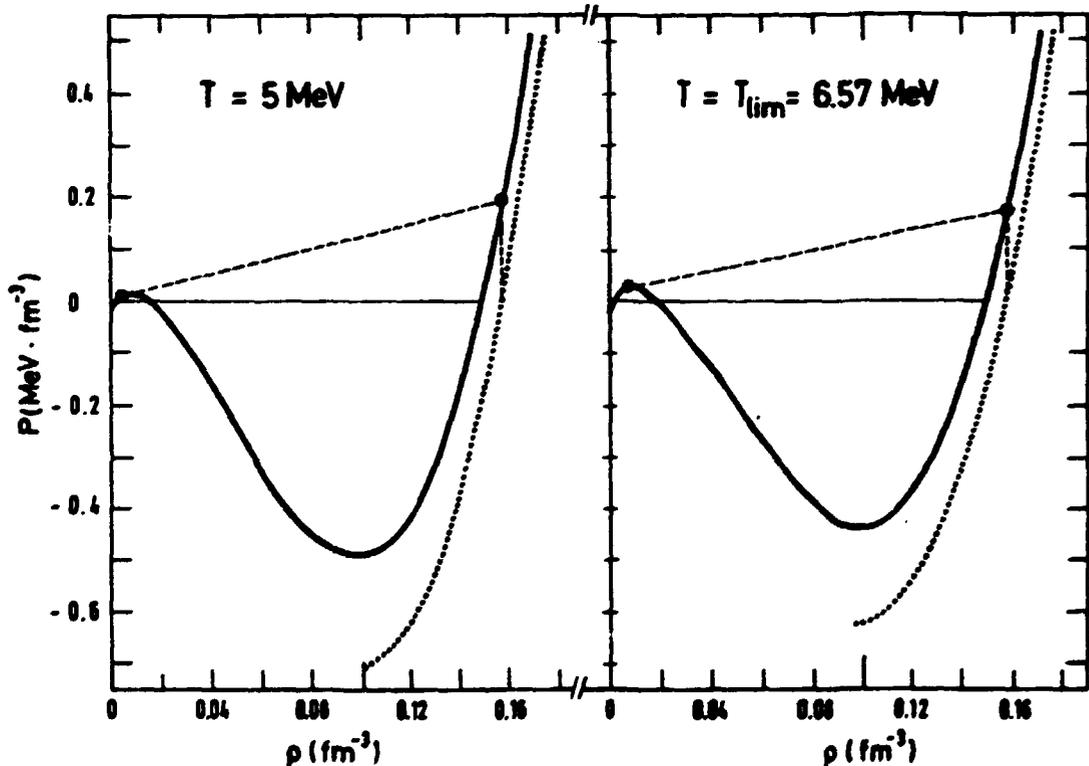


Fig. II.10 - Isothermes de pression pour un noyau chargé ^{109}Ag à $T = 5 \text{ MeV}$ et à la température limite $T = 6.57 \text{ MeV}$. Les isothermes de volume sont en traits pleins, celles de la phase liquide chargée avec tension superficielle sont en pointillés. Les points de coexistence sont reliés par les lignes obliques en tirets.

Si maintenant on augmente la température au-delà de 5 MeV pour essayer d'atteindre la température critique T_c , ou tout-au-moins la limite due aux effets de surface (voir section précédente), la tension superficielle $\alpha(T)$ diminue bien mais les contributions à la pression et au potentiel chimique provenant de la charge ne diminuent pas lorsque T augmente et tend vers T_c . Comme les isothermes de volume s'aplatissent - la différence entre maximums et minimums disparaît - on doit donc s'attendre à ce qu'à une température T_{lim} inférieure à T_c , les points de coexistence de la vapeur atteignent sur l'isotherme le maximum de la phase, i.e. le maximum de l'isotherme. En d'autres termes, à cause de l'intensité du champ coulombien répulsif, il arrive un moment en température où la pression de vapeur qui serait nécessaire à maintenir confinée la goutte devient supérieure à la plus grande valeur possible qui est celle au maximum de $P_{ov}(p)$. Cette situation est illustrée sur les parties droites des figures II.10 et II.11: la valeur de la température limite est de 6.57 MeV soit nettement inférieure à la température critique ($T_c = 17.22$ MeV) et aussi à la température limite prévue à cause des effets de surface seulement (cf. fig. II.9). Au-dessus de T_{lim} , les équations de coexistence n'ont plus de solutions.

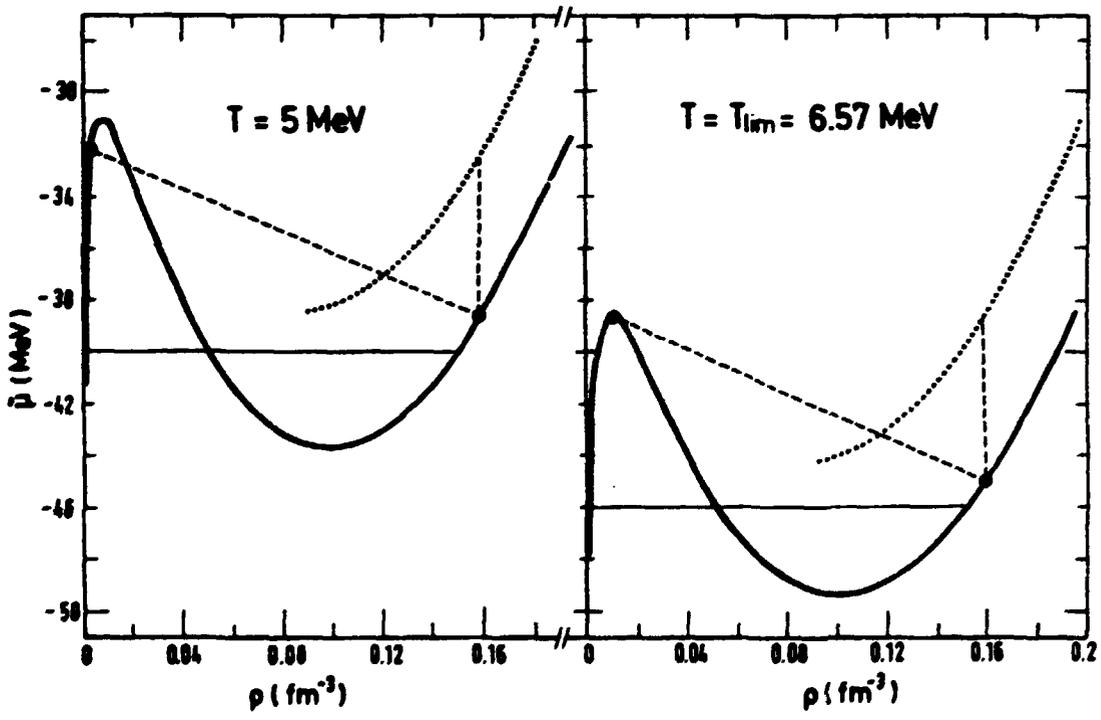


Fig. II.11 - Figure semblable à la précédente pour le potentiel chimique. Les courbes en traits pleins représentent les isothermes de volume et celles en pointillés les isothermes de la phase liquide chargée avec tension superficielle et champ coulombien.

Pour voir plus clairement la disparition de la solution, nous avons dessiné (fig. II-12) les isothermes $T = 5$ MeV, $T = 6.57$ MeV et $T = 8$ MeV dans le plan (P, μ) . Cette représentation est bien adaptée puisque la solution est représentée par un seul point dans ce plan. Les courbes en traits pleins montrent les isothermes avec les trois branches vapeur, non physique (concave) et liquide (voir section II-3 et les figures II-2 et II-4).

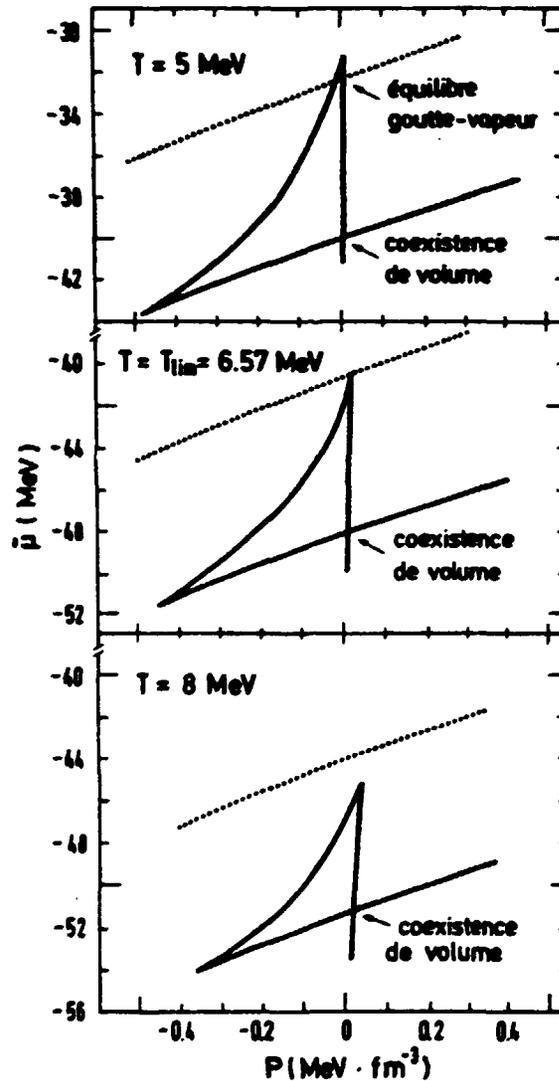


Fig. II-12 - Isothermes $T = 5$ MeV, $T = 6.57$ MeV, $T = 8$ MeV. Les courbes en traits pleins sont les isothermes de volume. Les courbes en pointillés sont celles de la phase liquide chargée avec tension superficielle et champ coulombien.

Le point de coexistence en volume (pour la matière nucléaire infinie) est à l'intersection des deux branches stables pour le liquide et la vapeur. Pour observer la coexistence d'une goutte chargée dans la vapeur, on a reporté en

46

pointillés sur la figure II-12. la pression totale ($P_{0n} + \delta P_n$) en fonction du potentiel chimique total ($\mu_{0n} + \delta \mu_n$) pour le noyau ^{109}Ag . L'intersection de cette courbe avec la branche verticale de la vapeur définit la nouvelle solution des équations de coexistence (II.28). On voit comment à T_{lim} , cette intersection atteint la frontière de la phase vapeur et qu'aucune solution n'existe au-delà de T_{lim} .

La disparition de la solution pour $T > T_{lim}$ implique qu'aucun équilibre où coexistent les deux phases vapeur et liquide n'est possible. Si l'on essaie donc de préparer un noyau à une température supérieure à T_{lim} , la pression interne ne pourra être équilibrée et il s'en suivra une expansion hors d'équilibre accompagnée d'émission de particules chargées ou pouvant provoquer la fragmentation du noyau²⁻³¹. Le processus d'émission de particules ne pourra s'arrêter que lorsque les conditions d'équilibre, à des températures plus basses, seront à nouveau réalisées pour les fragments ou le noyau résiduels. L'étude de la dynamique d'un tel processus n'entre pas dans le cadre de la présente étude.

II.9 - VARIATION DE LA TEMPERATURE LIMITE AVEC A ET Z

De la discussion précédente il ressort que quel que soit le noyau considéré la température limite est toujours plus basse que la température critique. Cependant, contrairement au caractère universel de la température critique, la température limite dépend, elle, du noyau étudié par sa masse et sa charge. La figure II-13 montre cette dépendance le long de la ligne de stabilité que l'on a approchée par la relation entre Z et A:

$$Z = \frac{A}{2} - 0,3 \cdot 10^{-2} A^{3/2} \quad (II.33)$$

La valeur de T_{lim} diminue de façon appréciable avec A mais le taux de décroissance est plus faible lorsque A est grand. Cela peut se comprendre à partir des expressions (II.29) pour les différences de pressions et de potentiels chimiques par rapport aux effets de volume: la partie coulombienne P_{coul} de δP_n , de même que $\delta \mu_n$, dépend du rapport $Z^2/A^{4/3}$. Pour des noyaux symétriques avec $Z = A/2$, cette dépendance entraîne l'augmentation usuelle des effets coulombiens pour A grand, ce qui implique une diminution de la température à laquelle les noyaux deviennent instables. Le long de la ligne de stabilité, le même effet demeure quoique légèrement atténué.

Pour un noyau donné, la valeur de la température limite dépend cruciallement de la tension superficielle. Sur la figure II-13, on a reporté la température limite calculée avec les expressions (II.30) et (II.32) de la tension superficielle (courbe en traits pleins et en pointillés respectivement). Dans la seconde expression, la tension $\alpha(T)$ décroît plus vite à basse température ce qui augmente la contribution δP_n à la pression et la température limite est plus élevée. On voit sur la figure II-12 qu'une augmentation de δP_n à $\delta \mu_n$ fixé (la tension superficielle ne contribue pas à $\delta \mu_n$) va déplacer l'isotherme (en pointillés) de la goutte nucléaire vers la droite et le point de coexistence va

redescendre: le noyau deviendra instable à une température plus élevée. Remarquons que le comportement en $\alpha_0(1-T^2)$ de l'expression (II.30) de $\alpha(T)$ à basse température est plus raisonnable que le comportement linéaire en T de (II.32).

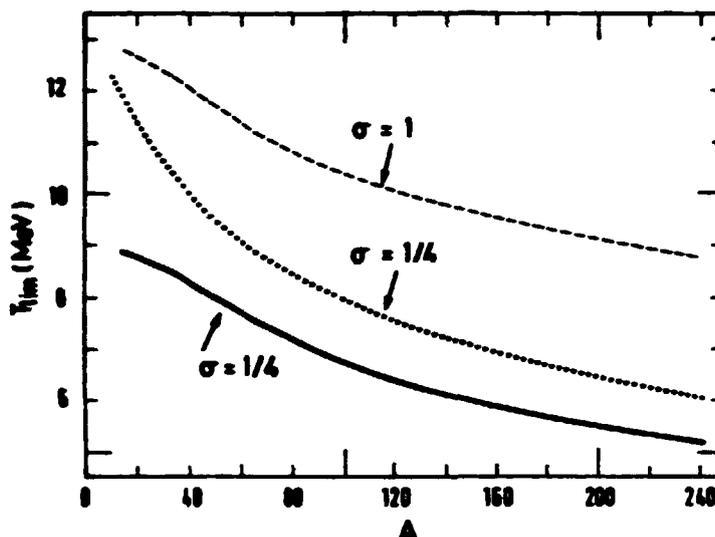


Fig. II.13 - Variation de T_{lim} le long de la vallée de stabilité. La ligne en trait plein et celle en pointillés ont été obtenues avec les mêmes paramètres (II.23) et avec les tensions superficielles (II.30) et (II.32) respectivement. Pour la ligne en tiret, $\alpha(T)$ est définie par (II.30) mais l'équation d'état est plus rigide ($\sigma = 1$).

La température limite va dépendre aussi des paramètres de l'équation d'état pour la matière nucléaire infinie qui détermine les fonctions P_{on} , P_{ov} , μ_{on} , μ_{ov} dans les équations de coexistence. Dans l'expression (II.19), on peut varier le paramètre σ qui contrôle la rigidité de l'équation d'état. La figure II.13 montre (ligne en tirets) la température limite obtenue avec la tension superficielle donnée par (II.30) et pour $\sigma = 1$. Les mêmes valeurs de E_0 (16 MeV) et de E_x (24 MeV) ont été utilisées mais le paramètre d'incompressibilité K a été porté à 384 MeV ce qui donne la valeur 1 pour σ (cf. (II.21)). On voit sur la figure II.13 que la température limite le long de la ligne de stabilité a considérablement augmenté et donc qu'une équation d'état plus rigide entraîne une température d'instabilité plus grande, surtout pour les grandes masses. Cette conclusion est en accord avec les calculs de la réf. 23. Pour l'interaction de type Skyrme S_{II} , qui y était utilisée, on a un module d'incompressibilité voisin de $K = 384$ MeV avec une dépendance en densité de type $\sigma = 1$, et la température limite correspondante est nettement plus grande que celle obtenue avec l'interaction dite SKM qui conduit à un module d'incompressibilité beaucoup plus faible.

Soulignons toutefois que le changement substantiel de température limite dans la comparaison ci-dessus provient pour l'essentiel du changement induit sur

la température critique qui de 17,22 MeV avec $\sigma = 1/4$ ($K = 222$ MeV) est passée à 22,90 MeV avec $\sigma = 1$ ($K = 384$ MeV). Ce changement de T_c modifie implicitement la tension superficielle $\epsilon(T)$ qui en dépend quelle que soit la forme analytique utilisée (II.30) ou (II.32).

La valeur $\sigma = 1$ correspond à un module d'incompressibilité beaucoup trop grand. Cependant, des changements de K raisonnables étant donné la situation expérimentale, soit par exemple pour K variant de 200 à 240 MeV, changent la température limite de près d'un MeV pour le Plomb 208: pour $K = 200$, $T_{lim} = 4,93$ MeV et pour $K = 240$ MeV, $T_{lim} = 5,77$ MeV.

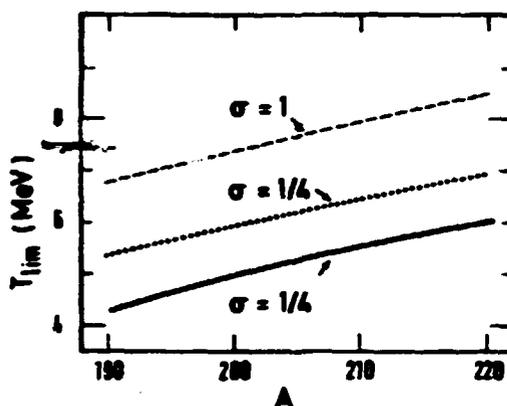


Fig. II.14 - Variation de T_{lim} avec A pour une série d'isotopes du Plomb. Les conventions du dessin sont celles de la figure II.13.

Enfin, sur la figure II.14, nous avons donné un exemple de la façon dont T_{lim} dépend du nombre de masse pour une série isotopique donnée. L'exemple choisi est le Plomb et l'on voit que de l'isotope $A = 190$ déficient en neutrons au Plomb 220 riche en neutrons, la température limite augmente régulièrement de plus de 1,5 MeV aussi bien pour les choix (II.30) et (II.32) de la tension superficielle avec $\sigma = 1/4$ que pour l'équation d'état modifiée ($\sigma = 1$). Cette variation est en accord qualitatif avec l'augmentation comparable de la température d'instabilité coulombienne observée dans les calculs microscopiques de la réf. 23 pour les noyaux ^{190}Pb et ^{200}Pb .

II.10 - RESUME

Dans un modèle thermodynamique simple, nous avons cherché à étudier la possibilité d'une transition de phase liquide-gaz pour les noyaux composés à haute température. En fait nous avons observé l'existence d'une température limite bien inférieure à la température critique et à laquelle le noyau devient instable à cause du champ coulombien. Cette température limite T_{lim} dépend fortement des deux caractéristiques fondamentales de la matière nucléaire à haute température: son équation d'état et la dépendance en température de ses propriétés de surface. On peut étudier en principe cette dépendance dans différentes régions en

43

température par la mesure de T_{110} dans des noyaux composés de masses et de charges différentes.

Plusieurs effets importants n'ont pas été pris en compte dans notre discussion qualitative. Tout d'abord la dépendance en isospin a été traitée de façon approchée. Un traitement plus correct de l'isospin peut se faire en introduisant explicitement la contribution des protons et des neutrons dans l'énergie libre par le biais de leur densité respective et en tenant compte de l'énergie de symétrie. Le traitement de la tension superficielle doit être modifié en conséquence (voir réf.27). Le mode de fission n'a pas non plus été inclus alors que la barrière de fission dépend elle aussi de la compétition entre le terme de surface et l'énergie coulombienne.

Même si le modèle devait être ainsi enrichi, il resterait très qualitatif, en effet le remplacement de la distribution de matière dans un noyau par une densité à bord franc est certainement une simplification qui rend abusive toute comparaison quantitative avec l'expérience. Cependant un bon accord qualitatif avec les calculs microscopiques²²⁻²³, donne un bon degré de confiance dans la valeur prédictive du modèle qui apparaît ainsi être capable de fournir un guide pour des calculs futurs de noyaux composés à haute température et aussi pour des expériences où ces mêmes noyaux sont formés et excités.

Pour terminer ce chapitre, trois commentaires s'imposent:

1) Expérimentalement, l'instabilité coulombienne que nous étudions doit se traduire par une chute soudaine du taux de formation du noyau composé à T_{110} avec une augmentation rapide de l'émission de particules ne provenant pas de processus équilibrés. Les mécanismes de fragmentation^{21,22} devraient se produire à partir de températures supérieures à T_{110} .

2) On peut se poser la question de savoir si cette instabilité coulombienne est en fait la manifestation d'une transition de phase. Cette question a déjà été abordée dans la réf. 23. On a alors montré que si le noyau composé est enfermé dans une boîte de taille finie, alors l'instabilité coulombienne correspond bien à une transition de phase du premier ordre vers un état où toute la matière, qui était à l'intérieur du noyau, est maintenant uniformément "collée" sur la surface de la boîte. Cette transition est semblable à la transition noyau-bulle trouvée dans le cœur des étoiles de type supernova^{28,29}, où le milieu nucléaire est localement électriquement neutre. Elle est par contre tout-à-fait irréaliste pour les réactions nucléaires.

3) Quelques mots enfin sur des approches différentes. Dans la réf. 14, les effets de taille finie et du champ coulombien ont été inclus directement de façon adéquate dans l'équation d'état de la matière nucléaire infinie, ce qui a pour effet d'abaisser la température critique T_c . A notre avis, à cause de sa longue portée, - plus grande que la taille du noyau - et de son caractère non-saturant, l'interaction coulombienne ne doit pas en principe être incluse de cette façon dans l'équation d'état. L'analogie avec la gravitation universelle illustre

51

suffisamment ce point. Le traitement séparé de la force de Coulomb que nous proposons montre bien comment cela conduit à une instabilité qui n'est pas d'origine thermodynamique et non pas à une modification de la température critique.

Dans un autre travail³⁴, la force coulombienne a été introduite séparément mais le noyau est artificiellement inclus dans une boîte sans tenir compte des voies de désexcitation ouvertes par émission de particules. Dans notre approche, les niveaux à une particule non-liés par lesquels peut s'effectuer cette émission sont inclus grâce à la vapeur saturante externe qui définit de façon self-consistante les conditions aux limites du noyau. L'instabilité coulombienne se déclenche lorsque ces conditions ne peuvent être satisfaites.

Enfin, dans les références 20 et 21, la force de Coulomb est apparemment ignorée.

III. DESCRIPTION MICROSCOPIQUE DES NOYAUX CHAUDS

Dans le chapitre précédent, nous avons proposé une description d'un noyau très excité en équilibre thermique au sein de la vapeur de nucléons qu'il évapore en terme de coexistence d'une phase dense et d'une phase diluée. Nous nous proposons maintenant de reprendre cette même démarche dans un contexte complètement microscopique.

On montre tout d'abord comment se met en oeuvre le formalisme développé dans la première partie du cours pour un noyau décrit dans un modèle de particules indépendantes. L'hamiltonien contient alors simplement un potentiel à un corps décrivant un ensemble d'états à une particule dont les énergies ne dépendent pas de la température. Cette première approche vers un calcul microscopique a l'avantage de la simplicité. Elle permet de dériver les nombres d'occupation sans avoir à se soucier de la complexité liée à l'emploi de forces à deux corps. De plus, les difficultés liées à la présence des états du continu sont déjà présentes, et l'on peut deviner la méthode adéquate qui permettra de traiter ces états.

Enfin, revenant à l'opérateur densité exprimé en fonction de l'hamiltonien complet avec un terme à deux corps, on fait l'approximation de champ moyen avant d'effectuer la méthode variationnelle décrite dans la première partie, ceci conduit aux équations de Hartree-Fock à température finie. Avec une interaction effective à deux corps de type Skyrme, des applications concrètes sont présentées pour le calcul des propriétés des noyaux chauds en fonction de la température: rayon carré moyen, potentiel chimique - lié à l'énergie de séparation d'un nucléon -, entropie - permettant le calcul des paramètres de densité de niveaux -, profil des densités de charges et de matière, limite de stabilité et enfin temps de vie.

III.1. BASE DE FOCK

Dans la section I.1 nous avons introduit la notion d'espace de Fock: c'est l'espace de Hilbert \mathcal{F} formé par la somme directe des espaces de Hilbert $\mathcal{X}^{(0)}, \mathcal{X}^{(1)}, \dots, \mathcal{X}^{(N)}, \dots$ à 0, 1, ..., N, ... particules. Nous nous proposons maintenant

de choisir, dans cet espace, une base qui permette de classer simplement les états pour un système de particules sans interactions.

Partons de l'espace $\mathcal{X}^{(1)}$ des états à une particule et choisissons pour base de cet espace l'ensemble des vecteurs propres de l'hamiltonien $H^{(1)}$ à un corps que l'on suppose donné³⁵. Soit i l'ensemble des nombres quantiques caractérisant chacun de ces vecteurs et ϵ_i la valeur propre correspondante de l'énergie. A partir de ces états (i) à une particule, on peut construire une base dans l'espace $\mathcal{X}^{(1)}$. Pour cela on ordonne arbitrairement l'ensemble des états (i) , par exemple par énergie croissante: on définit un ket de $\mathcal{X}^{(1)}$ en spécifiant dans la suite des états lequel est occupé par la particule. On introduit alors les nombres d'occupation n_i que l'on range dans l'ordre choisi pour les états, le vecteur de $\mathcal{X}^{(1)}$ où l'état i est occupé s'écrit:

$$|0, \dots, 0, n_i = 1, 0, \dots\rangle \quad (III.1)$$

où tous les nombres d'occupation n_j pour $j \neq i$ sont nuls.

Pour un système de fermions, l'espace de Hilbert $\mathcal{X}^{(2)}$ est l'espace des états antisymétriques

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (i(1)j(2) - i(2)j(1)) \quad (III.2)$$

où le symbole $i(n)$ signifie que la $n^{i\text{ème}}$ ($n = 1$ ou 2) particule est dans l'état i . On peut le caractériser en introduisant le ket qui généralise l'expression (III.1)

$$|0, \dots, 0, n_i = 1, 0, \dots, 0, n_j = 1, 0, \dots\rangle \quad (III.3)$$

Cette fois-ci tous les nombres d'occupation sont nuls sauf deux: $n_i = n_j = 1$. La généralisation à l'espace de Hilbert $\mathcal{X}^{(N)}$ est maintenant immédiate, soit le ket:

$$|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle \quad (III.4)$$

où exactement N nombres d'occupation correspondant à des états distincts sont égaux à 1 et tous les autres sont nuls, ce ket est un des vecteurs de la base qui sous-tend $\mathcal{X}^{(N)}$.

Ces mêmes états (III.4) où maintenant un nombre quelconque de n_i sont égaux à 1 forment une base complète de l'espace de Fock \mathcal{X} à un nombre quelconque de particules:

$$\mathcal{X} = \mathcal{X}^{(0)} + \mathcal{X}^{(1)} + \mathcal{X}^{(2)} + \dots \quad (III.5)$$

Remarquons que la construction de la base de l'espace de Fock (III.4) à partir des états à une particule de $\mathcal{X}^{(1)}$ nous a naturellement amenés à introduire l'espace vide, sans particules, $\mathcal{X}^{(0)}$, sous-tendu par l'unique vecteur (III.4) où tous les n_i sont nuls.

Dans cette base, l'écriture des opérateurs se simplifie, en particulier

on peut définir l'opérateur nombre d'occupation \hat{n}_i dans un état i avec les valeurs propres $n_i = 0$ ou 1 suivant que l'état est vide ou occupé. L'opérateur nombre total de particules est alors:

$$\hat{N} = \sum_i \hat{n}_i \quad (III.6)$$

et le nombre N de particules d'un ket (III.4) est la somme $\sum_i n_i$. De même, l'hamiltonien des particules sans interactions s'écrit:

$$\hat{H} = \sum_i \epsilon_i \hat{n}_i \quad (III.7)$$

dans l'espace de Fock tout entier. L'énergie d'un ket de la base est alors:

$$E = \sum_i \epsilon_i n_i \quad (III.8)$$

Si l'on utilise le formalisme des opérateurs de création a_i^\dagger et d'annihilation a_i d'une particule dans l'état i , les opérateurs \hat{n}_i , \hat{N} et \hat{H} se mettent sous forme:

$$\hat{n}_i = a_i^\dagger a_i \quad (III.9a)$$

$$\hat{N} = \sum_i a_i^\dagger a_i \quad (III.9b)$$

$$\hat{H} = \sum_i \epsilon_i a_i^\dagger a_i \quad (III.9c)$$

ou les opérateurs a_i et a_i^\dagger obéissent aux relations d'anticommuation des fermions:

$$[a_i a_j] = [a_i^\dagger a_j^\dagger] = 0$$

$$[a_i a_j^\dagger] = \delta_{ij} \quad (III.10)$$

C'est la première fois où nous introduisons explicitement la statistique de Fermi-Dirac. Pour des bosons, on aurait des résultats tout-à-fait analogues: dans la base (III.4) les nombres d'occupation peuvent alors prendre toutes les valeurs entières positives ou nulles. Les expressions (III.6) à (III.9) sont toujours correctes mais il faut remplacer les relations d'anticommuation des fermions (III.10) par les relations équivalentes de commutation des bosons pour achever d'explicitier la statistique de Bose-Einstein.

III.2. CAS D'UN HAMILTONIEN A UN CORPS

Ayant maintenant défini la base de Fock, nous voulons calculer l'opérateur densité dans l'ensemble grand canonique:

$$\hat{D} = \frac{1}{Z_0} \exp(-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})) \quad (III.11)$$

dans le cas où \hat{H} est un opérateur à un corps, c'est-à-dire dans le cas où \hat{H} est précisément donné sous l'une ou l'autre des formes (III.7) ou (III.9c). L'opérateur \hat{D} peut alors se réécrire:

$$\hat{D} = \frac{1}{Z_0} \exp \left\{ -\sum_i \alpha_i a_i^\dagger a_i \right\} \quad (III.12)$$

avec

$$\alpha_i = \beta(\epsilon_i - \mu) \quad (III.13)$$

La fonction de partition

$$Z_0 = \text{Trace} \exp \left\{ -\sum_i \alpha_i a_i^\dagger a_i \right\} \quad (III.14)$$

se calcule en utilisant la base de Fock (III.4) associée à l'hamiltonien \hat{H} du système:

$$Z_0 = \sum_{(n_j=0,1)} \langle n_1, n_2, \dots, n_j, \dots | \exp \left\{ -\sum_i \alpha_i a_i^\dagger a_i \right\} | n_1, n_2, \dots, n_j, \dots \rangle \quad (III.15)$$

Remarquons incidemment que dans le cas des bosons, la sommation sur les nombres d'occupation n'est pas limitée aux valeurs 0 et 1 comme on l'a vu dans la section précédente, mais que chaque n_j peut prendre toutes les valeurs 0, 1, 2, ...

Revenons au cas des fermions et calculons Z_0 en effectuant explicitement la somme sur n_1 :

$$\begin{aligned} Z_0 &= \sum_{(n_{j \neq 1}=0,1)} \langle n_1=0, n_2, \dots | \exp \left\{ -\sum_i \alpha_i a_i^\dagger a_i \right\} | n_1=0, n_2, \dots \rangle \\ &+ \sum_{(n_{j \neq 1}=0,1)} \langle n_1=1, n_2, \dots | \exp \left\{ -\sum_i \alpha_i a_i^\dagger a_i \right\} | n_1=1, n_2, \dots \rangle \end{aligned}$$

Soit :

$$Z_0 = \sum_{n_1=0,1} \langle n_1 | \exp(-\alpha_1 a_1^\dagger a_1) | n_1 \rangle \cdot \sum_{(n_j)_{j=1}} \langle n_2, \dots, n_j, \dots | \exp \left(- \sum_{j>1} \alpha_j a_j^\dagger a_j \right) | n_2, \dots, n_j, \dots \rangle \cdot$$

En itérant ce calcul pour n_2, n_3, \dots , on obtient pour Z_0 :

$$Z_0 = \prod_i \left(\sum_{n_i=0,1} \langle n_i | \exp(-\alpha_i a_i^\dagger a_i) | n_i \rangle \right) \tag{III.16}$$

et enfin

$$Z_0 = \prod_i (1 + e^{-\alpha_i}) \tag{III.17}$$

La factorisation (III.16) de la fonction de partition Z_0 vient du fait que l'espace de Fock a une structure simple de produit direct d'espaces relatifs à chaque état i à une particule.

Calculons maintenant la valeur moyenne f_i de l'opérateur nombre d'occupation \hat{n}_i :

$$f_i = \langle \hat{n}_i \rangle = \text{Trace} (\hat{D} a_i^\dagger a_i) = - \frac{\partial}{\partial \alpha_i} \text{Log } Z_0 = \frac{1}{1 + e^{-\alpha_i}} \cdot$$

En remplaçant α_i par sa valeur (III.13), on obtient:

$$f_i = \frac{1}{1 + e^{\beta(\epsilon_i - \mu)}} \tag{III.18}$$

Ces valeurs moyennes sont aussi appelées facteurs de Fermi ou nombres d'occupation.

Le grand potentiel s'exprime alors simplement en fonction des f_i :

$$A = -kT \text{Log } Z_0 = -kT \sum_i \text{Log}(1 + e^{-\alpha_i}) = kT \sum_i \text{Log}(1 - f_i) \tag{III.19}$$

de même que le nombre de particules

$$N = \langle \hat{N} \rangle = \sum_i f_i \tag{III.20}$$

que l'énergie interne

$$E = \langle \hat{H} \rangle = \sum_i \epsilon_i f_i \tag{III.21}$$

et que l'entropie

$$S = \frac{1}{T} (E - \mu N - A) = k \sum_i (f_i \alpha_i + \text{Log}(1-f_i)) \quad (\text{III.22})$$

Dans cette dernière expression on peut éliminer α_i en remarquant que:

$$\alpha_i = \beta(\epsilon_i - \mu) = \text{Log} \frac{1-f_i}{f_i} \quad (\text{III.23})$$

L'entropie prend alors la forme usuelle en fonction des facteurs de Fermi:

$$S = -k \sum_i (f_i \text{Log} f_i + (1-f_i) \text{Log}(1-f_i)) \quad (\text{III.24})$$

Etant donné que le nombre d'occupation n_i d'un état i ne peut prendre que les deux valeurs 0 et 1, le facteur de Fermi f_i est nécessairement compris entre 0 et 1 puisqu'il en est la valeur moyenne. Comme fonction de l'énergie ϵ_i des états i , le facteur de Fermi est une fonction décroissante: les états de haute énergie sont moins peuplés que les états de basse énergie. La courbe $f(\epsilon)$, que l'on a illustrée par la figure III.1, présente un point d'inflexion autour de la valeur $\epsilon_i = \epsilon_f = \mu$ où l'énergie de l'état à une particule est égale au potentiel chimique que l'on appelle encore énergie ou niveau de Fermi. La décroissance de $f(\epsilon)$ de 1 à 0 est d'autant plus rapide que la température est plus basse.

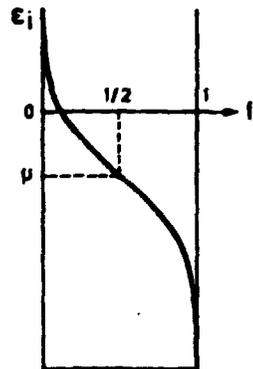


Fig. III.1 - Facteur de Fermi en fonction de l'énergie de particule indépendante pour une température et un potentiel chimique donnés.

La courbe $f(\epsilon)$ est symétrique autour du niveau de Fermi, il en résulte un changement de signe de $\alpha_i = \beta(\epsilon_i - \mu)$ pour deux niveaux situés de part et d'autre et à égale distance du potentiel chimique, cette symétrie transforme f en $1-f$. A la limite de basse température les α_i tendent vers l'infini avec le signe de $\epsilon_i - \mu$. Ainsi, pour tous les états situés au-dessous de ϵ_f , f tend vers 1 tandis que pour tous ceux situés au-dessus, f tend vers zéro. On retrouve à cette limite un état pur correspondant au déterminant de Slater où tous les états situés en-dessous du niveau de Fermi sont occupés et tous ceux situés au-dessus sont vides. On peut aussi vérifier sur l'expression (III.24) que l'entropie est bien nulle à la limite

de température nulle.

III-3. TRAITEMENT DES ETATS DU CONTINU

Supposons que l'on veuille décrire un noyau par un modèle de particules indépendantes. Les orbites des nucléons sont alors données par un potentiel à un corps, par exemple le potentiel de Saxon-Woods. Le spectre des états liés est un spectre discret avec la séquence habituelle $0s, 1p, \text{etc.}$ du modèle en couche, les énergies à une particule sont négatives, la plus basse (ϵ_{0s}) étant supérieure au fond du puits de potentiel.

A température nulle, si le noyau a N nucléons, on place ces N particules dans les orbites les plus basses et l'énergie du système est:

$$E = \sum_i g_i \epsilon_i . \quad (\text{III.25})$$

La somme sur i comprend uniquement les orbites occupées et les coefficients g_i sont les facteurs de dégénérescence éventuels des orbites ($g_i=2j_i+1$ par exemple). On peut réécrire l'énergie sous la forme:

$$E = \sum_i g_i f_i \epsilon_i . \quad (\text{III.26})$$

où les f_i sont les limites des facteurs de Fermi à température nulle: $f_i=1$ pour un état occupé et $f_i=0$ si il est vide. La somme sur i se fait maintenant sur tous les états, il n'est plus nécessaire de la limiter aux seuls états occupés. Le nombre de nucléons N est alors relié aux f_i par la somme:

$$N = \sum_i g_i f_i . \quad (\text{III.27})$$

Remarquons que les expressions que nous venons d'écrire pour l'énergie (III.26) et pour le nombre de nucléons (III.27) sont tout-à-fait analogues aux expressions (III.21) et (III.20) mais cette fois nous avons explicitement tenu compte de la dégénérescence des orbites.

Des que l'on élève la température, ces expressions (III.26) et (III.27) donneront encore l'énergie et le nombre de nucléons du noyau avec les facteurs de Fermi donnés par (III.18). Pour un noyau à N nucléons, l'équation (III.27)

$$N = \sum_i \frac{g_i}{1 + e^{(\epsilon_i - \mu)/kT}} , \quad (\text{III.28})$$

est une équation implicite pour le potentiel chimique $\mu = \epsilon_p$ dont la résolution donne par voie de conséquence tous les facteurs de Fermi f_i , et donc l'énergie interne E .

La difficulté, immédiatement visible sur la figure III.1 vient des états d'énergie positive, c'est-à-dire des états du continu. La figure a été dessinée pour un potentiel type d'une profondeur de -40 MeV, le potentiel chimique est de -10 MeV et la température de 8 MeV. On voit dans ce cas que le nombre de

25

particules dans le continu, proportionnel à $\int_0^\infty f(\epsilon) d\epsilon$, est déjà très important. Lorsqu'un état du continu est peuplé avec une probabilité non négligeable, on a un état du continu de diffusion et on ne peut plus traiter le noyau dans une approximation stationnaire.

Cependant, à plus basse température, le nombre de nucléons dans le continu devient négligeable. En effet, la température caractérise la façon dont les facteurs de Fermi décroissent de 1 à 0: autour de la valeur 1/2, ils passent de 0.9 à 0.1 sur un intervalle d'énergie sensiblement égal à 4.4 T. On s'attend donc à ce qu'à température suffisamment basse, on puisse négliger la contribution des états du continu.

Dans une première approximation, on peut définir comme contribution au noyau uniquement celle provenant des états liés et associer au gaz la contribution des états d'énergie positive:

$$E_{\text{total}} = E_{\text{noyau}} + E_{\text{vapeur}} \quad (III.29)$$

$$N_{\text{total}} = N_{\text{noyau}} + N_{\text{vapeur}} \quad ,$$

avec,

$$E_{\text{noyau}} = \sum_{i: \epsilon_i < 0} g_i f_i \epsilon_i \quad (III.30a)$$

$$N_{\text{noyau}} = \sum_{i: \epsilon_i < 0} g_i f_i \quad (III.30b)$$

Dans cette approximation, la contribution éventuelle du continu via les résonances est complètement éliminée et le noyau est déterminé indépendamment du gaz qui l'entoure. L'équation (III.30b) fixe le potentiel chimique μ à une température donnée T. A partir de μ et de T, on peut calculer les propriétés du gaz nécessaire à l'équilibre.

En utilisant cette approximation, M.Brach et P.Quentin^{26,27} ont effectué des calculs microscopiques de type Hartree-Fock. Dans la mesure où la température reste suffisamment basse pour que la contribution du continu soit essentiellement celle de la vapeur, même si l'occupation des états non liés n'est plus négligeable, cette approximation devrait être satisfaisante. De ce fait, on verra dans la suite que c'est bien le cas jusqu'à des températures de l'ordre de 2 à 3 MeV.

A plus haute température, il devient nécessaire de traiter correctement la contribution au noyau des états du continu, par exemple par un calcul dynamique de désexcitation. Au lieu d'effectuer un tel calcul qui pourrait fournir une réponse au problème, mais de façon probablement prohibitive, nous nous proposons plutôt d'obtenir une bonne description du noyau dans l'état qu'il occupe avant désexcitation. Pour cela on étudie un noyau en équilibre thermique au sein de la vapeur de nucléons qu'il évapore. En quelque sorte, on bloque l'évaporation,

décrivant une sorte de régime permanent où les particules évaporées, constituant le gaz, sont continuellement remplacées. Une autre façon de décrire cette approche consiste à dire que l'on fait une "photographie instantanée" d'un noyau chaud en train d'évaporer des nucléons et que "l'image" obtenue est traitée comme un état stationnaire représentant le noyau en équilibre dans sa vapeur.

Pour qu'une telle méthode soit relevante, il faut pouvoir identifier sans ambiguïté la contribution du noyau sous peine de décrire un système idéal non physique. En particulier, il faut savoir reconnaître dans la contribution des états du continu, ce qui relève du gaz de ce qui provient de la perturbation apportée au continu par la présence du noyau, c'est-à-dire des résonances.

Nous considérons maintenant un système noyau plus vapeur à l'équilibre thermique dans une enceinte. Le rôle de l'enceinte est de permettre de travailler plus simplement dans un volume fini. Supposons que l'on sache calculer l'opérateur densité $\hat{D}_{\text{noyau-vapeur}}$ d'un tel système ainsi que sa fonction de partition $Z_{\text{noyau-vapeur}}$. On veut pouvoir extraire de cette information l'opérateur densité du noyau \hat{D}_{noyau} et celui du gaz \hat{D}_{gaz} . On a vu (cf. section I.2 et I.4) que pour un système composite en l'absence de corrélations, l'opérateur densité total se factorise exactement:

$$\hat{D}_{\text{noyau-vapeur}} = \hat{D}_{\text{noyau}} \otimes \hat{D}_{\text{vapeur}} \quad (III.31)$$

et qu'il en est de même pour les fonctions de partition:

$$\text{Log } Z_{\text{noyau-vapeur}} = \text{Log } Z_{\text{noyau}} + \text{Log } Z_{\text{vapeur}} \quad (III.32)$$

Dans l'ensemble grand canonique, cette dernière relation se traduit par l'égalité entre grand potentiel

$$k_{\text{noyau-vapeur}} = k_{\text{noyau}} + k_{\text{vapeur}} \quad (III.33)$$

puisque le grand potentiel est proportionnel au logarithme de la fonction de partition.

Sans préjuger de l'absence ou de l'existence de corrélations entre la vapeur et le noyau, on peut définir les propriétés du noyau par soustractions:

$$k_{\text{noyau}} = k_{\text{noyau-vapeur}} - k_{\text{vapeur}} \quad (III.34)$$

et minimiser le grand potentiel soustrait ainsi défini, laissant chacun des systèmes noyau+vapeur et vapeur seule s'ajuster pour définir au mieux les propriétés du noyau. Le grand potentiel total et celui de la vapeur doivent être définis pour le même volume, le même potentiel chimique et la même température.

On peut justifier cette procédure de soustraction à partir de l'étude des contributions des états du continu faite dans un cadre très général^{38,39} en terme des déphasages et des applications qui en ont été faites au calcul de la fonction de partition nucléaire⁴⁰⁻⁴². Montrons brièvement comment ce calcul se met en

oeuvre pour un potentiel à courte portée et à une dimension.

Soit $V(x)$ un potentiel défini sur un segment de longueur $2R$. Nous imposons aux fonctions d'onde de s'annuler à $x = +R$ et $x = -R$. Pour une valeur donnée du potentiel chimique, le grand potentiel est donné par (cf. eq. (III.19))

$$\mathcal{A} = kT \sum_i \text{Log}(1-f_i) \quad (III.35)$$

La somme sur i porte sur tous les états propres de l'équation de Schrödinger:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right\} \psi(x,E) = E \psi(x,E) \quad (III.36)$$

Pour des valeurs positives de E , et si R est suffisamment grand devant la portée du potentiel, les solutions de (III.36) qui s'annulent à $x = -R$ auront un comportement en

$$\psi(x,E) \sim \sin(kx + kR + \delta) \quad (III.37)$$

au voisinage de $x = R$. Dans cette expression, k est le nombre d'ondes $(2mE/\hbar^2)^{1/2}$ et $\delta(E)$ est le déphasage qui dépend de l'énergie E et du potentiel $V(x)$. Les états d'énergie positive sont donnés par l'équation:

$$2kR + \delta(E) = n\pi \quad (III.38)$$

Par suite, on peut réécrire la densité d'état d'énergie positive:

$$f(E) = \frac{dn}{dE} = \frac{2R}{\pi} \frac{dk}{dE} + \frac{1}{\pi} \frac{d\delta}{dE} \quad (III.39)$$

En reportant $f(E)$ dans le grand potentiel et en écrivant explicitement la contribution des états liés, on obtient:

$$\begin{aligned} \mathcal{A} = kT \sum_{i: \epsilon_i < 0} \text{Log}(1-f_i) + \frac{kT}{\pi} \int_0^{\infty} \text{Log}(1-f(E)) \frac{d\delta}{dE} dE \\ + 2R \frac{kT}{\pi} \int_0^{\infty} \text{Log}(1-f(E)) \frac{dk}{dE} dE \end{aligned} \quad (III.40)$$

Dans cette équation, le premier terme est la contribution des états liés, le second représente la contribution finie au grand potentiel des états du continu. Pres d'une résonance d'énergie E_r et de largeur Γ , le déphasage δ peut s'écrire:

$$\delta = \delta_0 + \text{Arctg} \left(\frac{\Gamma/2}{E_r - E} \right) \quad (III.41)$$

et, si la résonance est suffisamment étroite:

$$\frac{d\bar{\epsilon}}{dE} = \frac{\Gamma/2}{(E-E_p)^2 + (\Gamma/2)^2} \approx \pi\delta(E-E_p) \quad (III.42)$$

La contribution au grand potentiel est alors:

$$\bar{\epsilon}_p = kT (1-f(E_p)) \quad (III.43)$$

ce qui est exactement la forme de la contribution d'un état lié.

Par opposition aux deux premiers termes, le dernier terme de l'expression (III.40) du grand potentiel diverge linéairement avec la taille du segment. Ce dernier terme n'est rien d'autre que le grand potentiel que l'on obtiendrait en l'absence du potentiel $V(x)$ pour la même température et le même potentiel chimique. Dans le cas d'un potentiel à courte portée, on obtient donc la procédure suivante pour extraire la partie finie $\bar{\epsilon}$ du grand potentiel décrivant le noyau:

$$\bar{\epsilon} = \bar{\epsilon}(V) - \bar{\epsilon}(V=0) \quad (III.44)$$

Le grand potentiel décrivant le noyau excité en équilibre au sein d'une vapeur apparaît donc comme la différence entre le grand potentiel du système total noyau plus vapeur et le grand potentiel de la vapeur seule (le potentiel nucléaire est mis à zéro). On trouvera une justification plus détaillée de cette méthode dans la ref.22. En particulier, on y trouvera une discussion analogue amenant à un résultat similaire pour le champ coulombien dans un modèle à trois dimensions. Quoiqu'il en soit le résultat (III.44) que nous venons d'obtenir par cette étude des déphasages est rigoureusement identique à celui que nous avons obtenu plus haut (cf. eq.(III.34)) à partir d'arguments généraux. Nous verrons plus loin comment inclure le champ coulombien dans le calcul.

III.4. EQUATION DE HARTREE-FOCK A TEMPERATURE FINIE

Revenons maintenant au cas général où l'hamiltonien du système contient un potentiel à deux corps. Dans l'ensemble grand canonique, on connaît au moins formellement l'expression de l'opérateur densité:

$$\hat{D} = \frac{1}{Z_0} \exp(-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})) \quad (III.45)$$

L'hamiltonien s'écrit en second quantification:

$$\hat{H} = \sum_{i,j} \langle i|t|j\rangle a_i^\dagger a_j + \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \langle ij|v|kl\rangle a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k \quad (III.46)$$

où nous utilisons pour \hat{H} les éléments de matrice non antisymétrisés du potentiel v .

L'expression de \hat{D} est beaucoup trop compliquée car elle met en jeu

l'exponentiel d'un opérateur à deux corps. Nous allons faire sur \hat{D} l'approximation du champ moyen. Pour cela nous revenons au principe variationnel qui nous a permis dans la première partie de calculer l'opérateur \hat{D} par maximisation de l'entropie, ou de façon équivalente par minimisation du grand potentiel:

$$\begin{aligned} \mathcal{F} &= E - TS - \mu N \\ &= \text{Trace} (\hat{H} \hat{D} - \mu \hat{N} \hat{D} + kT \hat{D} \text{Log} \hat{D}) \end{aligned}$$

L'approximation du champ moyen revient à minimiser \mathcal{F} dans la classe restreinte des opérateurs densité ayant la forme d'une exponentielle d'un opérateur à un corps:

$$\hat{D}_0 = \frac{1}{Z_0} \exp \left(- \sum_i a_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \right) \quad (III.47)$$

Lorsqu'on compare cette expression avec l'expression exacte (III.45), on voit qu'il s'agit de remplacer l'opérateur à deux corps $\hat{D}(\hat{H} - \mu \hat{N})$ par un opérateur à un corps qui après minimisation de \mathcal{F} deviendra le champ moyen le plus adapté à la description du noyau. Remarquons que la formule (III.47) de \hat{D} est identique à celle que nous avons obtenue pour un hamiltonien à un corps dans la section III.2. et tous les résultats précédents qui ne font pas intervenir la relation entre les a_i et les ϵ_i (cf. eq. (III.13)) sont valables, en particulier:

$$Z_0 = \prod_i (1 + e^{-\epsilon_i}) \quad (III.48a)$$

$$f_i = \langle \hat{n}_i \rangle = - \frac{\partial}{\partial a_i} \text{Log} Z_0 = \frac{1}{1 + e^{-\epsilon_i}} \quad (III.48b)$$

$$N = \langle \hat{N} \hat{D} \rangle = \sum_i f_i \quad (III.48c)$$

$$S = -k \text{Trace} (\hat{D} \text{Log} \hat{D}) = -k \sum_i (f_i \text{Log} f_i + (1-f_i) \text{Log}(1-f_i)) \quad (III.48d)$$

Par contre, l'énergie interne $E = \text{Trace}(\hat{H} \hat{D})$ est donnée par:

$$E = \sum_i f_i \langle i|t|i \rangle + \frac{1}{2} \sum_{ij} f_i f_j (\langle ij|V|ij \rangle - \langle ij|V|ji \rangle) \quad (III.49)$$

Et le grand potentiel s'écrit:

$$\mathcal{F} = \sum_i f_i t_i + \frac{1}{2} \sum_{ij} f_i f_j V_{ij} - \mu \sum_i f_i + kT \sum_i (f_i \text{Log} f_i + (1-f_i) \text{Log}(1-f_i)) \quad (III.50)$$

ou nous avons utilisé les notations plus transparentes $t_i = \langle i|t|i \rangle$ et $V_{ij} = \langle ij|V|ij \rangle - \langle ij|V|ji \rangle$. Le mérite de la seconde quantification est simplement de permettre une dérivation formelle aisée des expressions (III.48) et (III.49).

Nous devons maintenant minimiser \mathcal{F} par rapport aux paramètres qui

63

décrivent la classe des opérateurs densités d'essai \hat{D}_0 défini par (III.47). On trouvera dans les références 33 et 43 une bonne description de la méthode que nous suivons. Tout d'abord, pour minimiser par rapport aux états $|i\rangle$ à une particule, il est nécessaire d'introduire une contrainte supplémentaire de normalisation. Ceci se fait à l'aide d'un paramètre de Lagrange additionnel λ_i et en minimisant

$$\tilde{\mathcal{K}} = \mathcal{K} - \sum_i \lambda_i \langle i|i \rangle \quad (III.51)$$

Définissant l'hamiltonien à un corps h par

$$h_{ij} = \langle i|h|j \rangle = \langle i|t|j \rangle + \sum_k f_k (\langle i|k|V|j \rangle - \langle i|k|V|k \rangle) \quad (III.52)$$

on trouve que la condition $\delta \tilde{\mathcal{K}} / \delta \varphi_i$, où φ_i est la fonction d'onde décrivant l'état $|i\rangle$, impose : $\langle i|h|j \rangle = e_i \delta_{ij}$ soit encore :

$$h|i\rangle = e_i |i\rangle \quad (III.53)$$

ou les énergies de particules indépendantes sont reliées aux λ_i par $\lambda_i = f_i e_i$.

Il reste maintenant à minimiser par rapport aux e_i . Comme l'expression (III.48b) définit les f_i comme fonction monotone des e_i et que le grand potentiel n'est fonction que des f_i , il est plus simple de minimiser $\tilde{\mathcal{K}}$ par rapport aux f_i et la condition $\partial \tilde{\mathcal{K}} / \partial f_i = 0$ entraîne :

$$\frac{\partial \tilde{\mathcal{K}}}{\partial f_i} = \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial f_i} - \mu + kT \text{Log} \frac{f_i}{1-f_i} = 0 \quad (III.54)$$

Les équations (III.49) et (III.53) permettent de calculer $\partial \mathcal{E} / \partial f_i$:

$$\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial f_i} = t_i + \sum_j f_j v_{ij} = e_i \quad (III.55)$$

et ainsi,

$$f_i = \frac{1}{1 + e^{\beta(e_i - \mu)}} \quad (III.56)$$

et

$$e_i = \beta^{-1} \ln \left(\frac{1}{f_i} - 1 \right) + \mu \quad (III.57)$$

Nous retrouvons exactement les exemples obtenus pour un potentiel à un corps dans la section III.2 pour le potentiel

$$\hat{h} = \sum_i e_i a_i^\dagger a_i \quad (III.58)$$

Il y a toutefois une différence essentielle dans la détermination de l'hamiltonien \hat{h} lui-même à partir de la solution des équations non linéaires (III.53) que l'on peut résoudre par itération de la façon suivante. Supposons que

l'on connaisse une approximation \hat{h}_p de l'hamiltonien, la résolution des équations (III.53) permet de calculer le spectre et les fonctions d'onde de particules indépendantes (e_i, φ_i) . Pour un nombre donné de nucléons N , et à une température fixée T , l'équation (III.48c) (ou (III.28)) donne le potentiel chimique et les facteurs de Fermi f_i . On peut alors recalculer une nouvelle approximation $\hat{h}_{p,1}$ de \hat{h} par (III.52) et itérer le processus jusqu'à convergence. Ces équations (III.53) et (III.48c), avec la définition (III.52) de \hat{h} sont les *équations de Hartree-Fock à température non nulle*. On peut vérifier que l'on retrouve les équations Hartree-Fock usuelles à la limite de la température nulle.

Une autre différence vient du calcul de l'énergie interne et du grand potentiel ou de la fonction de partition. En effet, l'opérateur densité \hat{D}_0 (cf. (III.47)) que nous avons obtenu s'écrit en rassemblant les résultats (III.57) et (III.58):

$$\hat{D}_0 = \frac{1}{Z_0} e^{-\beta(\hat{h}-\mu N)} \quad (\text{III.59})$$

et les résultats de la section III.2 conduisent à l'expressio. suivante de l'énergie interne:

$$E_0 = \sum_i f_i e_i \quad (\text{III.60})$$

alors que l'énergie interne Hartree-Fock du système s'écrit d'après (III.49):

$$E_{HF} = \sum_i f_i e_i - \frac{1}{2} \sum_{ij} f_i f_j V_{ij} = E_0 - \langle V \rangle \quad (\text{III.61})$$

Le terme supplémentaire, égal à la valeur moyenne du potentiel, est la généralisation du terme équivalent déjà présent à température nulle dans l'énergie Hartree-Fock. Le grand potentiel, à l'approximation Hartree-Fock du champ moyen s'écrit donc:

$$\mathcal{K} = \mathcal{K}_0 - \langle V \rangle \quad (\text{III.62})$$

où \mathcal{K}_0 est le grand potentiel associé au problème à un corps défini par \hat{h} , par suite, si Z_0 est la fonction de partition telle que l'opérateur densité \hat{D}_0 est normé à l'unité et est donnée par (III.48), l'approximation Hartree-Fock Z_{HF} à la fonction de partition exacte s'écrit alors :

$$Z_{HF} = Z_0 \exp(\beta \langle V \rangle) \quad (\text{III.63})$$

Ces modifications à E_0 et Z_0 sont la conséquence directe de la non-linéarité des équations de Hartree-Fock résultant de l'approximation du champ moyen.

Il est important de ne pas oublier cette correction à la fonction de partition pour le calcul des paramètres de densité de niveaux par transformée de Laplace inverse sur Z , sinon on ne retrouverait pas le résultat classique donnant

la densité de niveaux à une énergie donnée comme proportionnelle à l'exponentielle de l'entropie. On trouvera une dérivation de la densité de niveaux dans les références 44 et 45. La différence entre Z_{hp} et Z_0 est bien discutée dans la réf. 45.

III.5. APPLICATION AU NOYAU

Dans les calculs Hartree-Fock effectués à l'intérieur d'une cellule de rayon R pour une température finie donnée, il existe en général deux solutions distinctes pour des valeurs données du potentiel chimique. L'une d'elle est obtenue en commençant à partir d'un potentiel de Saxon-Woods le processus itératif décrit dans la section précédente. Elle décrit un noyau situé au centre de la cellule et entouré d'un gaz externe. L'autre, qui ressemble à une matière nucléaire diluée de type vapeur, s'obtient en commençant les itérations à partir d'un potentiel nul. En l'absence de force coulombienne, la densité de matière de cette solution est pratiquement uniforme et à grande distance, elle est égale à la densité de la solution précédente de type noyau. Dans la suite nous appelons ρ et $\tilde{\rho}$ les matrices densité à un corps correspondant aux solutions de type noyau et de type vapeur respectivement, de plus nous distinguons explicitement les neutrons des protons en introduisant deux potentiels chimiques distincts μ_n et μ_p .

Dans la ligne de la discussion de la section III.3, il est naturel de définir le grand potentiel d'un noyau chaud comme la différence entre les grands potentiels $\tilde{\mathcal{K}}$ et \mathcal{K} calculés avec les matrices densité à un corps ρ et $\tilde{\rho}$ respectivement. En l'absence de champ coulombien, cette définition est satisfaisante car la différence $\tilde{\mathcal{K}} = \mathcal{K} - \tilde{\mathcal{K}}$ définissant le noyau converge vers une valeur indépendante de la cellule lorsque son rayon R augmente.

Le champ coulombien introduit une difficulté supplémentaire: lorsque la taille de la cellule augmente, la répulsion coulombienne devient si forte qu'elle chasse tous les protons et les colle sur la surface de la cellule. La même difficulté se produit en thermodynamique usuelle: en présence du champ coulombien, les fonctions thermodynamiques dépendent linéairement du volume, à moins que la charge totale du système ne soit nulle.

Pour tenir compte de l'interaction coulombienne sans introduire de divergences parasites et sans que la description physique des noyaux ne dépende du modèle, il nous faut revenir à l'origine de la méthode. S'il n'existe pas de vapeur de protons à l'extérieur du noyau, il n'y a aucun problème: seule la matière nucléaire infinie chargée présente des divergences. La présence d'une vapeur de protons est l'indice d'une évaporation de particules chargées puisque nous remplaçons un mode dynamique d'évaporation par un calcul en régime permanent ou la vapeur représente les particules évaporées. Comme il est tout-à-fait raisonnable de négliger l'interaction coulombienne entre deux protons évaporés, ce qui revient à négliger une partie de l'interaction dans l'état final, nous allons négliger l'interaction coulombienne dans la phase vapeur: les protons évaporés n'interagissent pas entre eux via le champ coulombien et sont seulement sensibles à la charge du noyau.

Cette hypothèse se met en oeuvre en calculant l'énergie coulombienne à partir de la densité de protons soustraite $\rho_p - \tilde{\rho}_p$ et en laissant le potentiel résultant agir sur les configurations noyau plus vapeur et vapeur seule. Nous définissons ainsi le grand potentiel soustrait par

$$\tilde{\mathcal{E}} = \mathcal{E}_N(\rho) - \mathcal{E}_N(\tilde{\rho}) + \frac{1}{2} \int [\rho_n(r) - \tilde{\rho}_n(r)] \frac{e^2}{|r-r'|} [\rho_p(r') - \tilde{\rho}_p(r')] dr dr' + E_{CX}. \quad (III.64)$$

Le terme E_{CX} tient compte des termes d'échange du potentiel coulombien à l'approximation de Slater. L'indice N rajouté aux grands potentiels $\mathcal{E}(\rho)$ et $\mathcal{E}(\tilde{\rho})$ signifie qu'ils ne contiennent que l'interaction nucléon-nucléon.

Si l'on minimise $\tilde{\mathcal{E}}$ à la fois par rapport à ρ et à $\tilde{\rho}$ comme on l'a fait dans la section précédente, on obtient deux jeux d'équations Hartree-Fock couplés tout à fait semblables à l'équation (III.53). La solution noyau contient un potentiel coulombien obtenu par variation à partir de l'énergie coulombienne incluse dans (III.64), le même pour la solution vapeur. Pour un noyau de masse A et de charge Z, les potentiels chimiques μ_n et μ_p sont solutions des équations:

$$\begin{aligned} A &= \int dr (\rho(r) - \tilde{\rho}(r)) \\ Z &= \int dr (\rho_p(r) - \tilde{\rho}_p(r)) \end{aligned} \quad (III.65)$$

Les nombres des neutrons et de protons en excès dans la solution noyaux plus vapeur sont égaux à ceux de la solution vapeur:

$$\begin{aligned} \Delta N &= \int dr \tilde{\rho}_n(r) \\ \Delta Z &= \int dr \tilde{\rho}_p(r) \end{aligned} \quad (III.66)$$

Nous terminons cette section en rappelant brièvement les propriétés des forces effectives nucléon-nucléon de type Skyrme^{46,47} que nous utilisons dans la suite. Ces interactions se présentent sous la forme d'une somme d'une force à deux corps qui s'écrit dans l'espace des moments:

$$\langle k|v|k' \rangle = t_0(1 + \alpha_0 P_\sigma) + \frac{1}{2} t_1(k^2 + k'^2) + t_2 k \cdot k' + iW_0(\sigma_1 + \sigma_2) \cdot k \times k', \quad (III.67)$$

et d'une force de portée nulle dépendant de la densité donnée dans l'espace des coordonnées par:

$$U(\rho) = \frac{1}{6} t_3(1 + \alpha_3 P_\sigma) \rho^{\alpha} \left(\frac{1}{2} (r_1 + r_2) \right) \quad (III.68)$$

Dans (III.67) k et k' sont les vecteurs nombres d'ondes, P_σ l'opérateur d'échanges de spin, σ les matrices de Pauli, le terme en W_0 est un terme d'interaction spin-orbite à deux corps de portée nulle. Dans (III.68), ρ est la densité totale. Les équations de Hartree-Fock (III.53) s'écrivent alors dans l'espace des

coordonnées:

$$\left\{ -\nabla \frac{\hbar^2}{2m^*(r)} \cdot \nabla + U(r) - i\nabla U(r) \cdot (\nabla \times \sigma) \right\} \varphi_i(r) = \epsilon_i \varphi_i(r) \quad (\text{III.69})$$

ou nous n'avons pas inclue le champ coulombien. Pour alléger l'écriture, nous donnons ci-dessous les expressions du champ central U , de la masse effective m^* et du potentiel spin-orbite pour un noyau ayant même nombre de protons et de neutrons.

$$U(r) = \frac{3}{4} t_0 \rho + \frac{1}{16} (2+t_1) t_3 \rho^{1+\alpha} + \frac{1}{16} (3t_1+5t_2) \tau - \frac{1}{32} (9t_1-5t_2) \nabla^2 \rho - \frac{3}{4} U_0 \text{div } J$$

$$\frac{\hbar^2}{2m^*} = \frac{\hbar^2}{2m} + \frac{1}{16} (3t_1+5t_2) \rho \quad (\text{III.70})$$

$$U(r) = \frac{3}{4} U_0 \rho$$

Dans ces expressions, ρ , τ et J sont données par:

$$\rho(r) = \sum_i f_i |\varphi_i(r)|^2$$

$$\tau(r) = \sum_i f_i |\nabla \varphi_i(r)|^2 \quad (\text{III.71})$$

$$J(r) = -i \sum_i f_i \varphi_i^*(r) (\nabla \times \sigma) \varphi_i(r)$$

L'énergie interne est égale à $E = \int E(r) dr$ où la densité d'énergie $E(r)$ vaut:

$$E(r) = \frac{\hbar^2}{2m} \tau + \frac{3}{8} t_0 \rho^2 + \frac{1}{16} t_3 \rho^{2+\alpha} + \frac{1}{16} (3t_1+5t_2) \rho \tau + \frac{1}{64} (9t_1-5t_2) (\nabla \rho)^2 - \frac{3}{4} U_0 \rho \text{div } J \quad (\text{III.72})$$

Pour un noyau ayant un nombre différent de protons et de neutrons, ces formules sont un peu plus compliquées, elles sont données dans la référence 33 pour des forces de Skyrme de structure un peu plus générale. La forme précise du champ coulombien pour chacune des solutions noyau plus vapeur est vapeur est détaillée dans la référence 22.

Notons enfin que pour un noyau chargé, il faut introduire séparément les facteurs de Fermi des protons f_i^p et ceux des neutrons f_i^n et l'on a:

$$N = \sum_i f_i^n = \sum_i \frac{1}{1 + \exp((\epsilon_i^n - \mu_n)/kT)}$$

$$Z = \sum_i f_i^p = \sum_i \frac{1}{1 + \exp((\epsilon_i^p - \mu_p)/kT)} \quad (\text{III.73})$$

ce qui définit les potentiels chimiques μ_n et μ_p en fonction des nombres N de neutrons et Z de protons. Dans ces deux expressions, il faut bien sûr tenir compte des dégénérescences des orbites comme nous l'avons fait dans la section III.3 (cf. eq.(III.28)).

Enfin, le tableau II.1 donne les paramètres des deux forces que nous allons utiliser pour le calcul explicite des propriétés des noyaux.

Tableau II.1 - Paramètres des forces de Skyrme utilisées

	t_0 [MeV.fm ³]	x_0	t_1 [MeV.fm ⁵]	t_2 [MeV.fm ⁵]	t_3 [MeV.fm ⁶]	x_0	α	W_0 [MeV]
SKM	-2645.0	0.09	385.0	-120.0	15595.0	0.0	$\frac{1}{6}$	130.0
SIII	-1128.75	0.34	395.0	-95.0	14000.0	1.00	$\frac{1}{3}$	120.0

III.6. CONDITIONS DE VALIDITE

Elles sont de deux ordres. Tout d'abord, il faut s'assurer que la méthode de soustraction que nous avons définie décrit bien la physique d'un noyau chaud et non pas la physique de l'enceinte dans laquelle nous l'avons placé pour pouvoir faire le calcul de façon pratique.

Le tableau II.2 montre les résultats obtenus pour le ²⁰⁸Pb à la température de 4 MeV avec la force de Skyrme SKM (voir tableau II.1) pour différentes valeurs du rayon R de la cellule allant de 12 à 18 Fm.

Tableau II.2

Valeurs soustraites de l'entropie S (en unité de la constante de Boltzmann), de l'énergie de liaison E⁰ (en MeV) des rayons de neutrons r_n et de protons r_p (en fermi) en fonction du rayon R (en Fm) de la cellule. Le noyau étudié est le ²⁰⁸Pb pour T = 4 MeV avec l'interaction SKM. Les valeurs de la densité au bord de la cellule sont aussi indiquées pour la solution noyau: ρ_n et ρ_p et pour la solution vapeur: $\tilde{\rho}_n$ et $\tilde{\rho}_p$ (en unité 10⁻⁴ Fm⁻³).

R	S	E ⁰	r _n	r _p	ρ _n	ρ _p	$\tilde{\rho}_n$	$\tilde{\rho}_p$
12	130.75	280.14	5.785	5.607	8.80	0.92	8.26	0.78
14	130.71	280.06	5.784	5.606	8.16	1.15	8.13	1.14
16	130.65	279.86	5.784	5.606	8.0814	1.5139	8.0811	1.5136
18	130.70	280.02	5.784	5.606	8.0745	1.8821	8.0741	1.8820

On peut facilement se convaincre que la convergence est excellente pour les valeurs soustraites de l'entropie, de l'énergie et des rayons carré moyen. La qualité de la convergence, au sens du processus itératif décrit dans la section III.4 est tout à fait comparable à celle que l'on atteint usuellement dans les calculs Hartree-Fock à température nulle. Le tableau II.2 montre aussi les valeurs non soustraites des densités de neutrons et de protons au bord de la cellule pour les deux solutions noyau et gaz. On peut remarquer que ces densités sont déjà très

proches l'une de l'autre ($\rho_n \sim \tilde{\rho}_n$ et $\rho_p \sim \tilde{\rho}_p$) pour une cellule de 14 Fermi et que l'écart diminue rapidement lorsque la taille de la cellule augmente. La cellule $R = 12$ Fm est trop petite par rapport à la taille d'un noyau de ^{208}Pb et dans la pratique la plupart des calculs ont été conduits dans une boîte de 16 Fm.

Cette première condition de validité avait trait à la justification de la procédure de soustraction utilisée. La seconde que nous allons présenter tient à la physique du noyau: pour que cette description ait une quelconque utilité, il faut que le temps de vie du noyau soit plus long que le temps de réaction nécessaire pour le former. On peut obtenir une estimation du temps de vie du noyau par évaporation de la façon suivante.

Pour pouvoir utiliser une approximation Hartree-Fock statique pour décrire un noyau chaud, nous avons été amenés à ajouter un gaz externe. Ce gaz produit exactement la pression nécessaire pour obtenir un équilibre avec le noyau. On peut illustrer cette remarque à partir de l'expression $\bar{\mathcal{E}}$ du grand potentiel que nous minimisons. En effet pour un milieu homogène comme le serait la phase gaz en l'absence de champ coulombien, le grand potentiel $\bar{\mathcal{E}}$ vapeur est égal à l'opposé de la pression multipliée par le volume et l'on peut écrire:

$$\bar{\mathcal{E}} = \mathcal{E}(\rho) + PV \quad . \quad (III.74)$$

On peut réinterpréter la minimisation de $\bar{\mathcal{E}}$ comme celle de $\mathcal{E}(\rho)$ avec comme contrainte que le système occupe le volume V , le paramètre de Lagrange associé est alors $-P$.

Il résulte de ces remarques que les propriétés du gaz externe donnent des informations sur la stabilité des noyaux chauds. Qualitativement, une pression plus élevée correspond à un noyau moins stable. Quantitativement, le temps de vie du noyau composé s'obtient par la formule standard donnant les taux de réaction nucléaire en nucléosynthèse⁴⁸

$$\frac{1}{\tau} = n \langle \sigma v \rangle = \langle \sigma j \rangle \quad . \quad (III.75)$$

Dans cette formule, n est la densité du gaz externe, σ la section efficace de capture de nucléon, v la vitesse des nucléons externes et j leur courant. La notation $\langle \sigma v \rangle$ représente la moyenne statistique sur les états du gaz. Remarquons tout d'abord que le temps de vie est inversement proportionnel à la densité du gaz.

Si l'on calcule explicitement cette moyenne pour les neutrons, on obtient:

$$\frac{1}{\tau} = 4\pi g \frac{1}{h^3} 2m \int_0^{\infty} \sigma(E) f(E) E dE \quad , \quad (III.76)$$

où $g = 2s+1$ est le facteur de dégénérescence de spin, m la masse du neutron, $\sigma(E)$ la section efficace de capture à l'énergie E et $f(E)$ le facteur de Fermi. Comme l'intégration se fait à partir de 0, on peut estimer (III.76) à basse température en remplaçant $f(E)$ par $\exp(-\beta(E-\mu_n))$. En négligeant la dépendance en énergie de

$\sigma(E)$ on obtient:

$$\frac{1}{\tau} = 4\pi g \frac{1}{h^3} 2m (kT)^2 \sigma \exp(\mu_n/kT) \quad (III.77)$$

On pourra comparer utilement cette formule avec celle obtenue par Ericson à partir du principe de la balance détaillée⁴⁹. Si l'on prend pour σ la section efficace géométrique $\sigma = \pi R^2$, où R est le rayon du noyau, on trouve pour le ²⁰⁸Pb ($R = 7$ Fm, $\mu_n = -8$ MeV) les valeurs suivantes

$$\begin{aligned} T = 1 \text{ MeV} & : \tau = 2.0 \cdot 10^{-20} \text{ s} \\ T = 2 \text{ MeV} & : \tau = 0.9 \cdot 10^{-20} \text{ s} \\ T = 5 \text{ MeV} & : \tau = 1.3 \cdot 10^{-22} \text{ s} \end{aligned} \quad (III.78)$$

Pour que la méthode de soustraction qui nous a conduit à ces temps de vie soit utilisable, il est souhaitable que le temps de vie du noyau composé soit plus grand que le temps de thermalisation de formation du système. Cette hiérarchie de temps semble bien être observée expérimentalement au moins jusqu'à des températures de 5 à 6 MeV, 5 MeV pour les noyaux plus lourds, (cf. ref. 5 par exemple) et 6 MeV pour les plus légers⁶.

Une estimation plus précise des temps de vie par l'éq.(III.76) a été faite²² à partir des facteurs de Fermi calculés à l'approximation Hartree-Fock, elle donne des résultats tout-à-fait similaires à (III.78). Par contre, la section efficace de capture $\sigma(E)$ décroît très fortement avec l'énergie⁴⁸ de sorte qu'un calcul plus complet avec une bonne approximation pour $\sigma(E)$ devrait conduire à des temps de vie plus longs. Ce calcul reste à faire.

III.7. RESULTATS

Les résultats que nous présentons dans cette section ont été obtenus pour le plomb et le fer avec les forces SKM et SIII dont les paramètres ont été donnés dans le tableau II.1. Les calculs sont faits à l'intérieur d'une cellule sphérique de rayon R donné dans le cadre de l'approximation Hartree-Fock que nous avons décrite dans la section III.4. Pour toutes les températures supérieures à 2 MeV la méthode de soustraction est utilisée. A $T = 1$ MeV la densité du gaz externe est quasiment nulle et aucun état dans le continu n'est peuplé de façon significative. Aucune correction due au mouvement du centre de masse n'est faite, les noyaux sont sphériques et les effets de déformation ne sont pas pris en compte.

Tout d'abord, la figure III.2 montre l'évolution des rayons carré moyen de neutrons et de protons lorsque l'on chauffe un noyau de ²⁰⁸Pb. La comparaison avec les calculs antérieurs de Brack et Quentin²⁷ montre un bon accord jusqu'à des températures de l'ordre de 3 MeV avec des déviations faibles à 4 MeV et très significatives dès 5 MeV, signature de l'importance des effets du continu dans cette région.

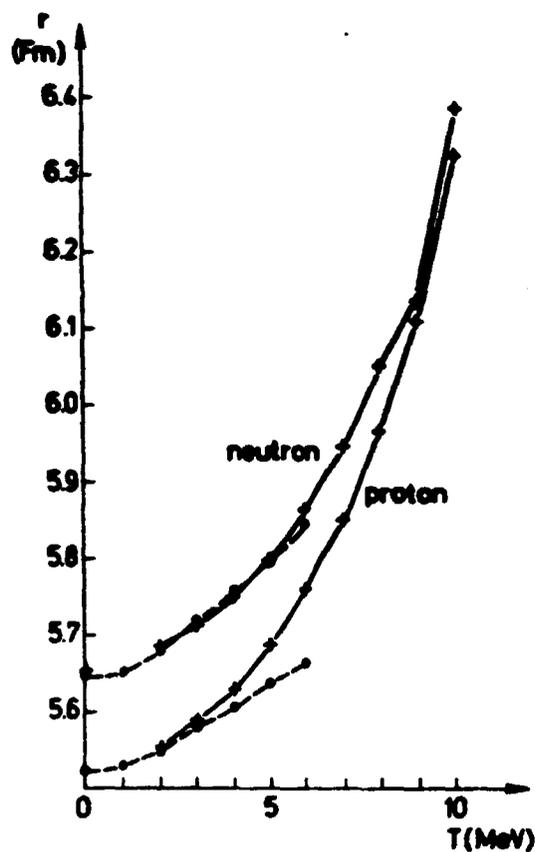


Fig. III.2 - Rayons carré moyen de neutrons et de protons (Fm) calculés pour le ^{208}Pb avec S11 en fonction de la température (MeV). Les résultats de la ref. 37, pour la même interaction sont indiqués par des points.

Ces déviations sont plus importantes pour les protons, cela s'explique par le fait que dans la ref. 37, l'espace accessible aux orbites est limité aux états liés et quasi-liés par la barrière coulombienne, tandis que dans notre cas il n'y a aucune limitation et la répulsion coulombienne repousse plus efficacement les protons vers l'extérieur.

Les densités soustraites de neutrons et de protons sont tracées sur la figure III.3 à quatre températures différentes, toujours pour le ^{208}Pb et avec la même interaction. On observe que l'épaisseur de surface augmente avec la température plus rapidement pour les protons que les neutrons. Cette différence est encore une manifestation de l'importance du champ coulombien. De plus, dans la ref. 37, l'épaisseur de surface des neutrons ne dépend pas de la température, l'augmentation que nous observons sur la figure III.3 souligne cette fois l'importance des effets du continu.

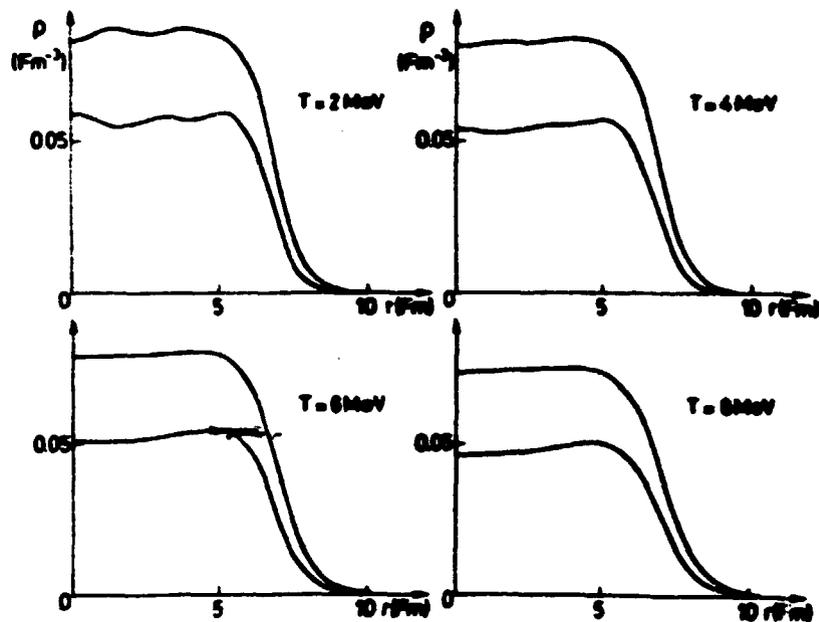


Fig. III.3 - Profils des densités de matière pour le ^{208}Pb calculés avec SIII pour quatre valeurs différentes de la température.

Comme dans les calculs précédents³⁷, nous pouvons remarquer que les oscillations de densité dues aux effets de couches disparaissent lorsque la température augmente et devient plus grande que la distance entre les couches. De même, la densité centrale de protons décroît si T augmente, ce comportement particulier provient de l'occupation d'orbitales de plus en plus élevées et surtout du dépeuplement de l'orbite $3s_{1/2}$ qui n'est plus occupée qu'à environ 70 % dès 2 MeV de température. Remarquons que les densités de protons dessinées ne représentent pas les densités de charge : il reste à les convoluer avec la distribution de charge du proton, ce qui adoucirait encore les oscillations.

Les spectres de particules indépendantes de protons et de neutrons pour le ^{208}Pb sont tracés en fonction de la température sur les figures III.4 pour l'interaction SIII et III.5 pour SKM. Remarquons tout d'abord que les niveaux restent répartis en couche jusqu'aux plus hautes températures. La disparition des effets de couches n'est donc pas liée à la disparition des couches mais à l'augmentation de la température qui devient grande devant l'espacement moyen des niveaux.

Pour des températures inférieures à 4 MeV, on n'observe que de faibles variations dans les spectres, en accord avec la réf. 37. A plus haute température, par contre, une compression importante se produit. Nous reviendrons dans un instant sur l'interprétation physique de ce résultat. On peut aussi observer une variation systématique des potentiels chimiques qui décroissent fortement lorsque la température augmente. On trouvera réf.23 une étude détaillée de cette variation pour différents noyaux.

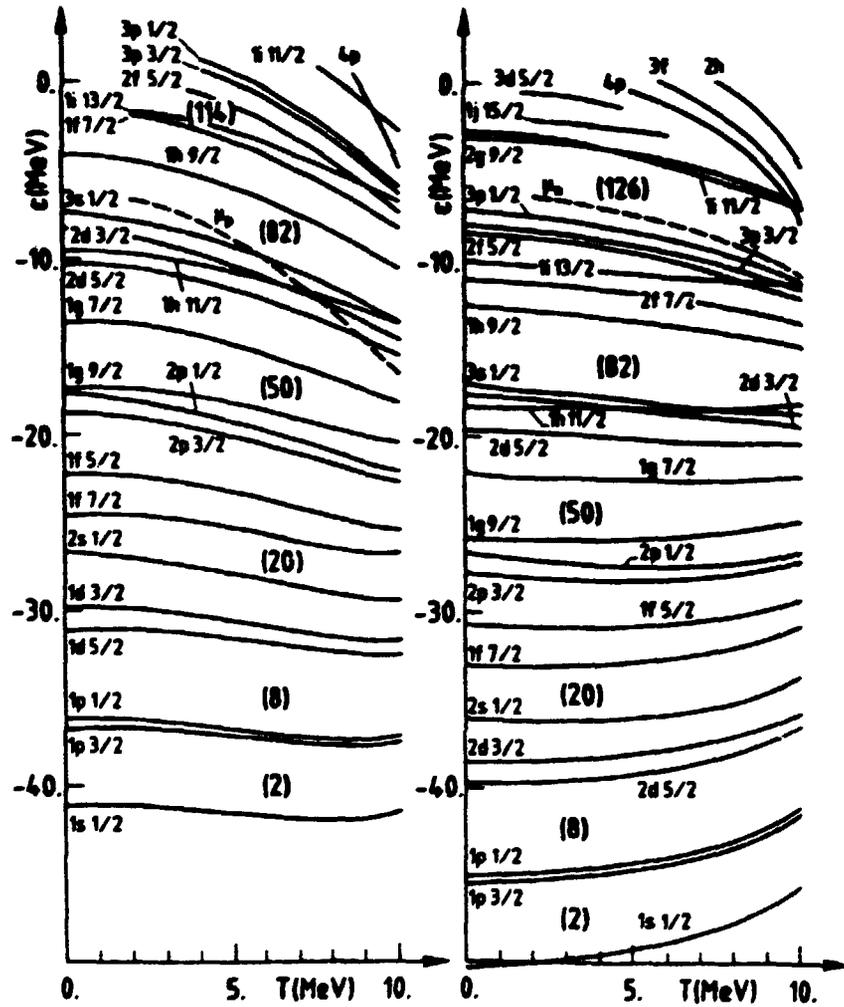


Fig. III.4 - Spectres à un corps pour les protons et les neutrons calculés pour le ^{208}Pb avec SIII en fonction de la température.

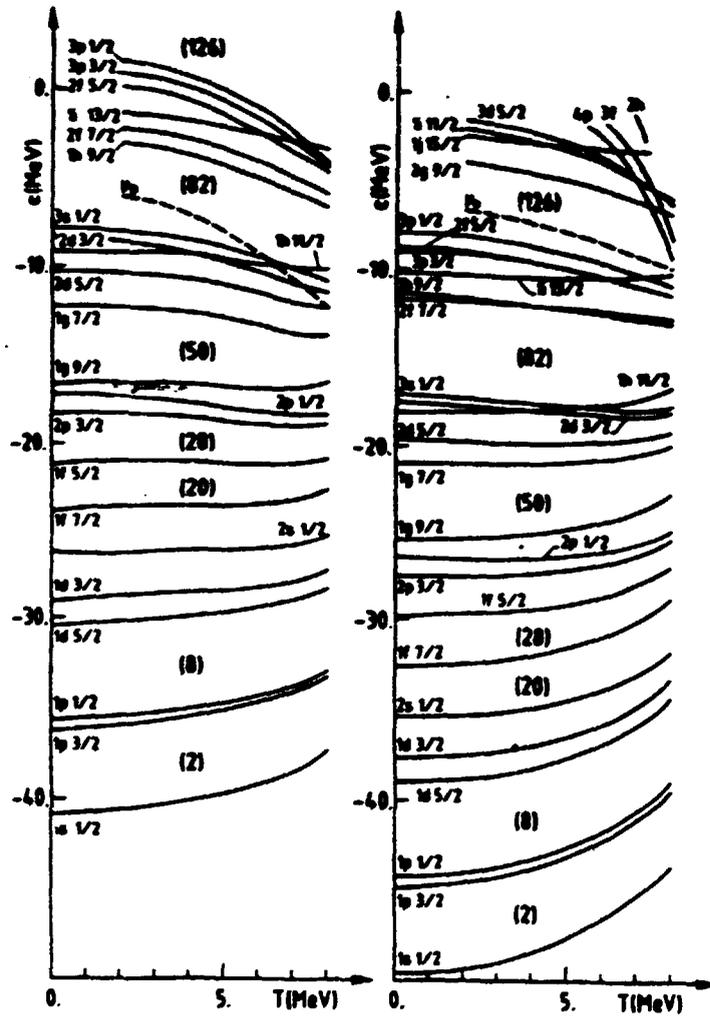


Fig. III.5 - Spectres à un corps pour les protons et les neutrons calculés pour le ^{208}Pb avec SKM en fonction de la température.

Pour pouvoir comparer plus quantitativement l'influence du choix de la force nous avons résumé sur le tableau III.3 pour le ^{208}Pb les principaux résultats obtenus avec SKM et SIII. Le tableau III.4 donne les mêmes informations pour le ^{56}Fe .

Tableau III.3

Energie d'excitation E^* , entropie S , potentiel chimique de proton μ_p et de neutron μ_n , rayons carré moyen de proton r_p et de neutron r_n pour le ^{208}Pb avec SIII et SKM. L'énergie de liaison du fondamental à température nulle est de -1618,32 MeV pour SIII et -1634,22 MeV pour SKM. L'absence d'information pour SKM à 9 et 10 MeV signifie que le noyau n'est pas stable.

T (MeV)	E^* (MeV)		S		μ_p (MeV)		μ_n (MeV)		r_p (fm)		r_n (fm)	
	SIII	SKM	SIII	SKM	SIII	SKM	SIII	SKM	SIII	SKM	SIII	SKM
0	0	0	0	0	-5,75	-5,21	-4,95	-5,81	5,53	5,44	5,65	5,62
1	14,65	14,12	20,40	18,95	-6,30	-5,67	-5,80	-6,22	5,53	5,45	5,66	5,63
2	74,18	79,90	60,41	63,14	-6,58	-6,00	-6,24	-6,54	5,56	5,49	5,68	5,66
3	154,83	168,37	92,86	98,73	-7,07	-6,47	-6,57	-6,90	5,59	5,54	5,71	5,72
4	255,96	279,95	121,79	130,65	-7,81	-7,17	-6,90	-7,31	5,63	5,61	5,75	5,78
5	379,14	418,96	149,19	161,56	-8,79	-8,11	-7,28	-7,80	5,69	5,71	5,80	5,88
6	523,30	587,71	175,42	192,26	-9,98	-9,28	-7,73	-8,38	5,76	5,85	5,87	6,01
7	688,00	788,24	200,78	223,12	-11,36	-10,69	-8,25	-9,06	5,85	6,05	5,95	6,19
8	870,36	1039,58	225,11	256,56	-12,91	-12,35	-8,87	-9,86	5,97	6,45	6,06	6,57
9	1068,05		248,36		-14,61		-9,56		6,12		6,19	
10	1291,50		271,93		-16,51		-10,34		6,33		6,39	

Tableau III.4

Energie d'excitation E^* , entropie S , potentiel chimique de proton μ_p et de neutron μ_n , rayons carré moyen de proton r_p et de neutron r_n pour le ^{56}Fe avec SIII et SKM. L'énergie de liaison du fondamental à température nulle est de -468,76 MeV pour SIII et -481,90 MeV pour SKM. L'absence d'information pour SKM à 9 et 10 MeV signifie que le noyau n'est pas stable.

T (MeV)	E^* (MeV)		S		μ_p (MeV)		μ_n (MeV)		r_p (fm)		r_n (fm)	
	SIII	SKM	SIII	SKM	SIII	SKM	SIII	SKM	SIII	SKM	SIII	SKM
0	0	0	0	0	-8,64	-8,83	-8,46	-9,65	3,70	3,65	3,73	3,69
1	1,79	1,62	9,96	9,33	-7,64	-7,80	-9,12	-9,85	3,70	3,65	3,74	3,69
2	16,88	17,20	19,11	19,47	-7,75	-7,53	-9,69	-10,41	3,71	3,68	3,77	3,72
3	41,24	45,27	29,25	30,73	-7,86	-7,88	-10,58	-10,89	3,75	3,73	3,78	3,77
4	74,58	81,49	38,55	41,09	-8,85	-8,51	-10,79	-11,42	3,78	3,80	3,84	3,83
5	112,78	124,66	47,05	50,69	-9,69	-9,34	-11,37	-12,03	3,83	3,88	3,88	3,92
6	154,71	174,41	54,84	59,75	-10,34	-10,37	-12,36	-12,75	3,90	4,00	3,92	4,03
7	202,43	231,02	62,19	68,44	-11,48	-11,57	-13,13	-13,60	3,98	4,16	4,00	4,18
8	253,56	294,53	69,01	76,90	-12,76	-12,99	-14,00	-14,54	4,08	4,41	4,09	4,42
9	307,26		75,33		-14,17		-14,96		4,20		4,21	
10	366,49		81,58		-15,73		-16,01		4,38		4,38	

Jusqu'à une température de 8 MeV, les deux interactions donnent des résultats qualitativement similaires. On observe cependant des différences systématiques. Dans les deux noyaux, l'énergie d'excitation E^* et l'entropie S sont plus grandes pour SKM que pour SIII dès que la température dépasse 2 MeV. Cette tendance peut se relier au comportement des rayons carré moyen. Bien qu'à $T=0$, ils soient plus petits pour SKM, ils croissent plus vite avec la température pour l'interaction SKM. A 8 MeV de température, ils dépassent les valeurs obtenues pour SIII de 10 % environ. A l'augmentation des rayons carré moyen correspond une évolution des potentiels moyens Hartree-Fock vers des puits moins profonds et de plus grand rayon ce qui explique en partie la compression des spectres de particules indépendantes observées sur les figures III.4 et III.5 où la densité d'états de particules indépendantes augmente d'environ 20 % au voisinage de la mer de Fermi lorsque T augmente de 0 à 8 MeV. Cet effet est plus accentué pour l'interaction SKM, ce qui explique l'augmentation plus rapide avec T de l'énergie d'excitation et de l'entropie. Cette différence de comportement des rayons carré moyen est corrélée avec la valeur du module d'incompressibilité nettement plus faible pour SKM ($K \sim 220$ MeV) que pour SIII ($K \sim 380$ MeV). Enfin la différence la plus spectaculaire entre ces deux interactions est la température à laquelle les noyaux deviennent instables ; nous y reviendrons dans la section suivante.

Tableau III.5

Propriétés du ^{190}Pb avec SKM. L'énergie du fondamental à $T=0$ est de $E_0 = -1470,95$ MeV.

T (MeV)	E^* (MeV)	S	μ_p (MeV)	μ_n (MeV)	r_p (Fm)	r_n (Fm)
0	0	9,56	-1,07	-9,84	5,35	5,42
1	13,30	32,06	-1,63	-9,58	5,36	5,43
2	58,24	61,87	-1,94	-9,45	5,38	5,45
3	134,67	92,46	-2,39	-9,67	5,43	5,49
4	239,27	122,37	-3,05	-10,09	5,49	5,56
5	371,18	151,71	-3,94	-10,61	5,59	5,65
6	531,17	180,81	-5,05	-11,24	5,72	5,77
7	717,50	209,44	-6,39	-11,96	5,91	5,95

Il est aussi intéressant d'étudier ce qui se passe loin de la ligne de stabilité. A cet effet, le tableau III.5 résume les propriétés au ^{190}Pb avec l'interaction SKM. Pour un tel noyau pauvre en neutrons, l'effet le plus marquant est l'abaissement de la température d'instabilité par rapport à celle observée pour le ^{200}Pb situé lui, sur la ligne de stabilité β , ce qui suggère fortement l'importance du champ coulombien dans ce phénomène. L'entropie non nulle que l'on trouve à $T=0$ correspond simplement à la description du ^{190}Pb comme noyau sphérique. La dernière couche à remplir à $13/2$ devrait être occupée par 8 neutrons et le ^{190}Pb devrait être déformé dans son état fondamental. On décrit cet état de façon approchée en remplissant les 14 niveaux dégénérés de façon équiprobable, de là l'entropie non nulle.

Si pour le ^{208}Pb on analyse plus précisément l'évolution de S et de E^* , on s'aperçoit que l'entropie croît linéairement avec la température tandis que l'énergie d'excitation croît quadratiquement, ceci dès que la température est suffisante. Ce comportement se vérifie sur la figure III.6 où sont dessinées les quantités $S/2T$, E^*/T^2 et $S^2/4E^*$. Pour un gaz de Fermi idéal ces quantités devraient être indépendantes de la température et égales au paramètre a de la formule de Bethe⁵⁰ pour la densité de niveaux:

$$\rho(E^*) = \frac{1}{12} \left(\frac{\pi^2}{a} \right)^{3/4} E^{*-3/4} \exp \sqrt{aE^*} \quad (III.79)$$

Pour un gaz de Fermi, a est donné par:

$$a = \frac{\pi^2}{6} g(\epsilon_F) = \frac{\pi^2}{4} \frac{2m^*}{\hbar^2} \frac{A}{k_F^2} \quad (III.80)$$

où $g(\epsilon_F)$ est la densité moyenne de niveau à une particule autour de l'énergie de Fermi ϵ_F , m^* est la masse effective, k_F le moment de Fermi et A le nombre de nucléons. Cette formule donne $a/A = 0,054 \text{ MeV}^{-2}$ pour SKM et $0,053$ pour SIII^{51,52}. Les valeurs asymptotiques extraites de la figure III.6 sont environ 50 % plus grandes. On peut attribuer cette différence au moins en partie à des effets de surface et de courbure⁵¹.

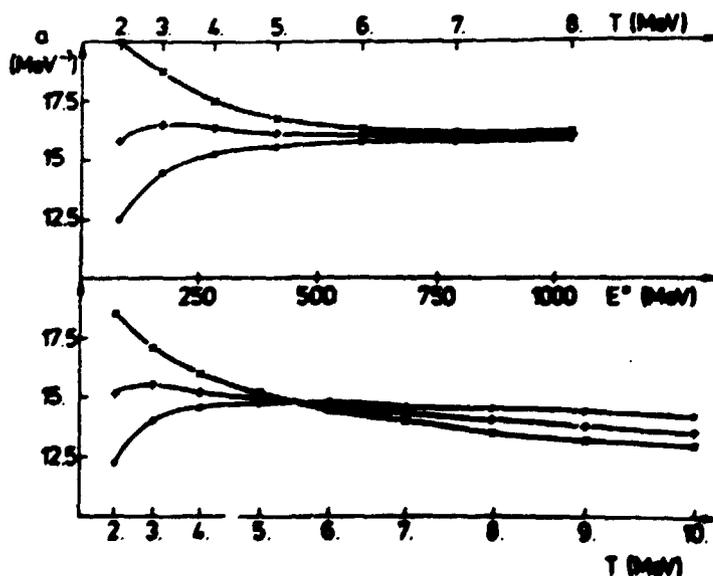


Fig. III.6 - Variation de E^*/T^2 (x), $S/2T$ (+) et $S^2/4E^*$ (o) pour le ^{208}Pb avec la température pour SKM (partie haute de la figure) et pour SIII (partie basse de la figure).

Dans les calculs que nous avons présentés, la dépendance linéaire de l'entropie avec la température est le résultat d'une compensation délicate entre deux effets. A haute température, le spectre devient plus dense, ce qui augmente

l'entropie. Cependant, par rapport à la formule $S = 2\alpha T$, on s'attend à une réduction de l'entropie car seul un nombre fini d'états et de résonances peut être peuplé alors que la formule $S = 2\alpha T$, dérivée à partir de développement de basse température, présuppose une infinité de niveaux équidistants. Cet effet est d'ailleurs dominant dans les calculs de la référence 37 qui n'inclut que les états liés et quasi-liés. Le traitement correct de la contribution des états du continu et la compression du spectre que nous observons compensent en partie cette diminution. La figure III.7 illustre l'importance relative des différents effets.

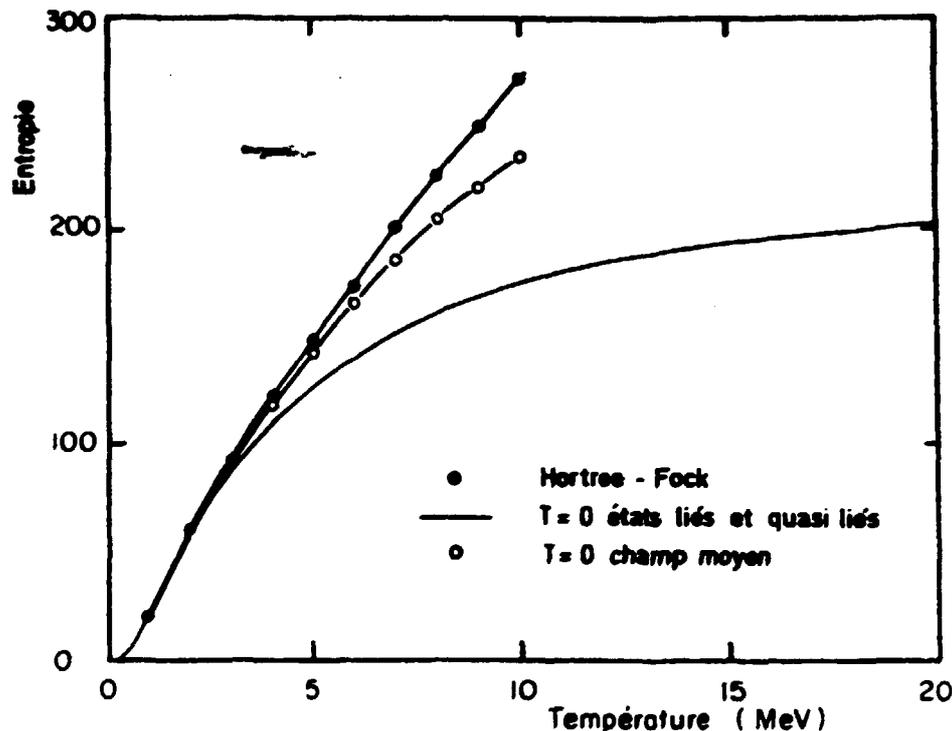


Fig. III.7 - Variation avec T de l'entropie du ^{208}Pb calculée avec SKM. Le calcul Hartree-Fock complet (courbe avec les points) est comparé avec deux calculs approchés à partir de spectre fixé à $T=0$, l'un néglige le continu (ligne continue), l'autre non (ligne avec des cercles).

Pour le ^{208}Pb avec l'interaction SIII, elle fournit une comparaison entre l'entropie calculée en fonction de la température (cf. tableau II.3) et deux approximations. La première, et la plus radicale, consiste à prendre seulement les états de particules indépendantes liés et quasi-liés tels qu'on les obtient à température nulle; le spectre est indépendant de la température et aucune résonance n'est inclut. La seconde consiste à prendre le même spectre indépendant de T mais à inclure par la méthode de soustraction les effets du continu. La différence la plus importante est observée entre les deux approximations, ce qui souligne encore davantage l'importance d'un traitement correct des états du continu et ce, dès 4 MeV de température. La différence restante entre le calcul

complet et la seconde approximation est due à la modification du champ moyen qui évolue lentement avec la température et produit la compression des spectres de particules indépendantes.

III.8. LIMITE DE STABILITE

Comme nous l'avons vu dans la section précédente, les calculs n'ont pu être faits que pour une certaine gamme de température. Dans les calculs numériques faits au-delà de cette température limite, les résultats se mettent à dépendre de la taille de la boîte dans laquelle les équations de Hartree-Fock sont résolues. La figure III.8 montre un exemple de profils de densité pour le ^{208}Pb avec l'interaction SIII à 11 MeV de température, c'est-à-dire à 1 MeV au-delà de la dernière température figurant dans le tableau II.3 pour SIII. Pour une cellule de 14 Fermi de rayon, on peut avoir l'illusion que le noyau est bien décrit par les densités soustraites puisqu'elles tendent bien vers 0 à la surface de la cellule. Mais le même calcul répété dans une cellule de 16 Fermi de rayon montre que la densité n'est pas stable et que les nucléons commencent à s'échapper du noyau vers la périphérie de la cellule.

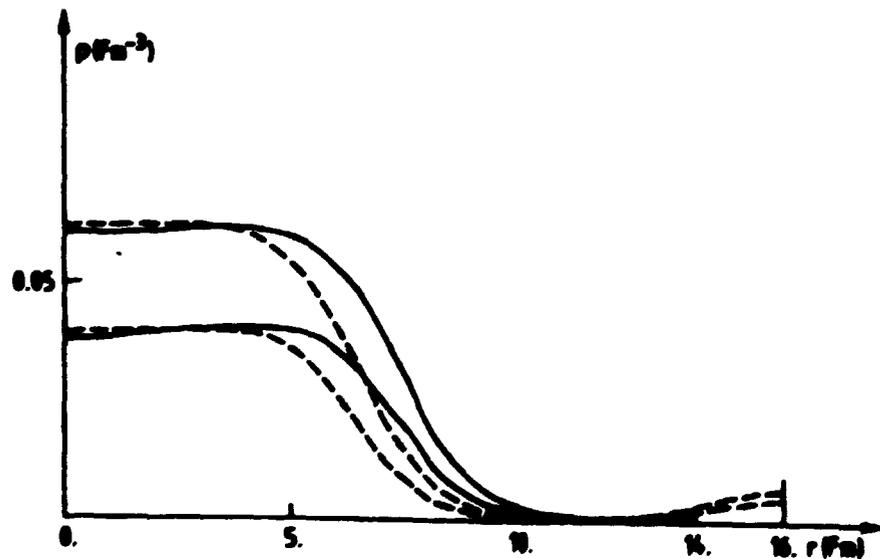


Fig. III.8 - Profils de densités soustraites de neutrons et de protons pour le ^{208}Pb à $T = 11$ MeV avec SIII dans des cellules de 14 Fm (traits pleins) et de 16 Fm (traits).

Dans une cellule plus grande, les calculs conduisent à une solution de type bulle où la matière est collée à la surface de la cellule. Cette transition vers une solution de type bulle à l'intérieur d'une cellule de rayon donnée présente les caractéristiques d'une transition de phase du premier ordre²³ (cf. aussi les

refs. 27 et 28). On rencontre d'ailleurs une situation physique où cette transition se produit. Dans le coeur des supernovae, au cours de la phase d'effondrement, la structure du coeur se modifie profondément lorsque la densité moyenne atteint la moitié de la densité de matière nucléaire infinie. Il y a une transition entre une structure de type réseau cristallin où les nucléons sont concentrés en chaque site du réseau vers une structure de type réseau de bulle où les nucléons ont été en quelque sorte chassés dans les espaces interstitiels du réseau précédent^{33,33}. Du point de vue coulombien la situation est très particulière car l'étoile est un milieu électriquement neutre et le bain d'électrons supprime les effets à longue portée du champ coulombien, seules les fluctuations locales subsistent. Cette transition est par contre irrelevante pour un noyau isolé: aucun mécanisme n'existe dans la physique des ions lourds pour maintenir une cellule, ~~contenant~~ un "noyau bulle" et il n'y a pas de bain d'électrons qui puisse écranter le champ coulombien.

Revenons à la température limite que nous avons observée dans la section précédente. Deux faits saillants ont déjà été notés. Le premier est l'influence du choix de l'interaction, les différences de température limite étant alors essentiellement liées aux modules d'incompressibilité très différents. Le second est l'abaissement de la température limite lorsqu'on s'éloigne de la vallée de la stabilité. Ce dernier trait suggère l'origine coulombienne de l'instabilité. Nous avons de plus l'ensemble des résultats de la seconde partie qui nous pousse à chercher dans les effets coulombiens la cause de l'instabilité. Il faut cependant savoir que la démarche que nous avons suivie dans ce cours, du phénoménologique du chapitre précédent au microscopique de ce chapitre, est d'ordre purement pédagogique. Dans la pratique le modèle que nous avons décrit dans le chapitre II est venu après les calculs que nous présentons ici.

Cela étant, pour mettre pleinement en évidence le rôle du champ coulombien, il suffit de le supprimer !... tout au moins dans le calcul. Le tableau I.6 présente ainsi les résultats obtenus pour un noyau de ^{208}Pb avec l'interaction nucléaire SKM mais sans champ coulombien. Pour réaliser pratiquement un tel calcul, il suffit de prendre 126 neutrons et 82 protons et de mettre à zéro la charge dans l'expression (III.64) du grand potentiel soustrait et dans les équations Hartree-Fock qui en découlent après minimisation. Sur le tableau, aucune instabilité ne se manifeste jusqu'à des températures de l'ordre de 12,5 alors qu'avec la même interaction et en présence du champ coulombien, une instabilité se produit entre 8 et 9 MeV.

Tableau II.6

Propriétés du ^{208}Pb non chargé calculées avec l'interaction SKM. l'énergie Hartree-Fock du fondamental est -2449,23 MeV.

T (MeV)	E^0 (MeV)	S	μ_p (MeV)	μ_n (MeV)	r_p (Fm)	r_n (Fm)
0	0	0	-23,79	-5,06	5,23	5,52
1	12,40	16,46	-23,95	-5,37	5,24	5,53
2	74,52	57,98	-24,18	-5,58	5,26	5,56
3	157,97	91,60	-24,57	-5,90	5,30	5,60
4	259,81	120,75	-25,15	-6,29	5,35	5,66
5	383,97	148,36	-25,93	-6,74	5,42	5,73
6	530,60	175,03	-26,89	-7,26	5,52	5,82
7	697,39	200,71	-28,01	-7,88	5,66	5,95
8	883,09	225,49	-29,27	-8,60	5,85	6,11
9	1083,25	249,06	-30,65	-9,42	6,07	6,34
10	1296,05	271,48	-32,16	-10,33	6,41	6,67
11	1528,53	293,64	-33,74	-11,37	6,96	7,20
11,5	1656,46	304,97	-34,55	-11,92	7,42	7,66
12	1829,35	319,54	-35,34	-12,63	8,25	8,45
12,5	2041,24	337,06	-36,20	-13,44	9,98	10,02

L'augmentation des rayons carré moyen de neutrons (r_n) et de protons (r_p) est certes spectaculaire - de près d'un facteur deux - mais elle reste très régulière. Il en est de même pour les autres quantités: aucune irrégularité ne se produit entre 8 et 9 MeV où se situe la température d'instabilité dans le cas normal ou la charge est incluse. Pour mieux voir la différence avec le cas chargé, la figure III.9 montre les densités de matière soustraites pour le ^{208}Pb non chargé et celles du ^{208}Pb normal. Cette comparaison n'est évidemment possible que jusqu'à 8 MeV puisqu'au-delà le ^{208}Pb est instable. Le noyau non chargé continue lui d'exister à des températures nettement plus élevées mais il devient de moins en moins dense, sa surface est de plus en plus diffuse et son rayon devient plus grand. Si l'on augmente encore la température, on observe non pas une instabilité brutale mais une transition douce vers une matière nucléaire uniforme. A cause de difficultés techniques liées à la procédure de soustraction, il n'est pas possible de dépasser cette température de transition, aussi peut-on seulement en donner une estimation: entre 12,5 MeV et 13 MeV.

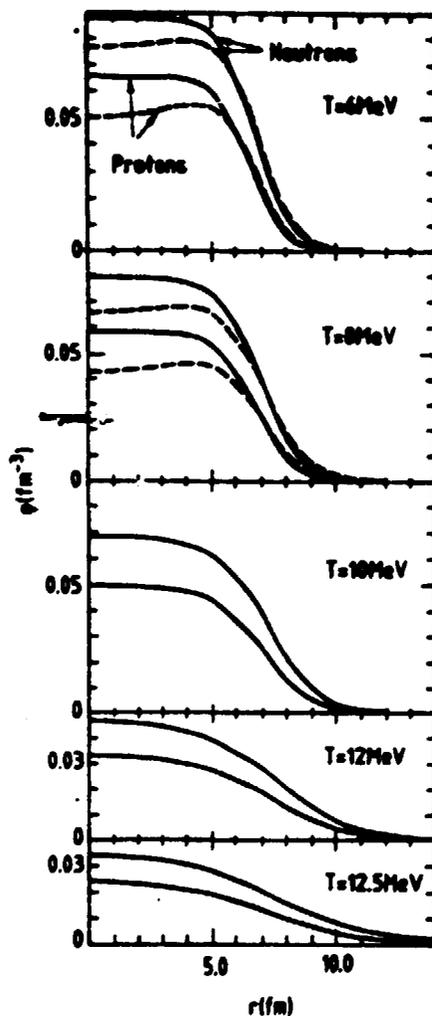


Fig. III.9 - Densités soustraites de neutrons et de protons à différentes températures pour le ^{208}Pb non chargé (trait continu) et pour le ^{208}Pb chargé (tireté). Le calcul est fait avec l'interaction SKM dans une cellule de 16 Fermi de rayon.

Pour l'interaction SKM, la température critique pour la transition de phase liquide gaz est $T_c = 13.22$ MeV. L'estimation que l'on vient de donner à partir des résultats sur le ^{208}Pb non chargé est légèrement inférieure. Cela est dû aux termes de surface qui sont inclus dans la force effective SKM. Conformément à l'analyse présentée dans la section III.7, ces termes tendent à abaisser la température limite (voir fig. II.9).

Si l'on peut dire que la transition de phase liquide gaz peut s'observer dans le cas non réaliste où l'interaction coulombienne est supprimée, par contre la situation pour un noyau normal est tout à fait différente. On peut suivre sur

la figure III.9 l'effet induit par le champ coulombien. Des $T = 6$ MeV, on observe en effet une dépression centrale dans la densité de protons causée par la répulsion coulombienne. A cause de l'interaction nucléaire, cet effet se retrouve sur la distribution de neutrons. Cette dépression se traduit en particulier par une augmentation du nombre de protons à la périphérie du noyau. A $T = 8$ MeV l'effet s'amplifie encore si bien qu'à température plus élevée, le nombre de protons dans la queue de la distribution de matière est devenu trop important. Le champ coulombien devient d'autant plus efficace et produit la rupture du noyau par dislocation bien avant que la température critique ne soit atteinte.

Nous retrouvons donc par un calcul microscopique, l'essentiel des résultats obtenus dans le modèle phénoménologique de la seconde partie, mais de façon beaucoup plus quantitative. La dépendance de la température limite avec la masse du noyau semble cependant moins marquée. Les calculs microscopiques avec SKM montrent que le ^{56}Fe et le ^{208}Pb sont tous deux stables à $T = 8$ MeV et instables à $T = 9$ MeV. Une étude plus fine a été faite à partir des rayons carré moyen²³; la température limite pour le ^{208}Pb est à peine supérieure à 8 MeV tandis que pour le ^{56}Fe elle avoisine les 9 MeV. Cette différence reste inférieure à celle prédite par le modèle phénoménologique et une étude systématique de la dépendance de la température limite reste à faire.

Les conséquences physiques de cette température limite dans les réactions entre ions lourds ont été présentées à cette école dans le cours de Babinet et le séminaire de Galin auxquels nous renvoyons pour les aspects expérimentaux. Soulignons cependant les limitations d'ordre théorique des calculs présentés.

1) Tous les calculs ont été conduits pour des noyaux sphériques. L'effet de la déformation peut être très important, en particulier les barrières de fission à température non nulle peuvent se trouver modifiées⁵⁴.

2) De même le moment angulaire n'a pas été inclus et l'on sait bien que les noyaux formés par réaction entre ions lourds emportent un moment angulaire non négligeable.

3) L'interaction effective qu'il faut utiliser dans les calculs est déterminée en général à partir des propriétés des noyaux à température nulle. Il n'y a pour l'instant aucune indication qu'elle soit valable à température non nulle et que la seule dépendance en température induite par la non linéarité soit suffisante. Il n'y a d'ailleurs pas plus d'évidence inverse.

En ce qui concerne les deux premiers points une remarque importante s'impose. Si on connaît l'énergie d'excitation d'un système composite et si on veut, à partir d'un paramètre de niveau supposé connu, extraire une température, il faut impérativement retrancher à l'énergie d'excitation toute énergie, non thermique ou collective, associée à des mouvements d'ensemble du noyau comme la déformation ou les rotations sous peine de surestimer grossièrement la température.

REFERENCES

1. R.Balian, Du microscopique au macroscopique, Ellipses 1982.
2. J.Aichelin et J.Müfner, Phys.Lett. 136B (1984) 15.
3. G.D.Westfall et al., Phys.Rev. C17 (1978) 1368.
4. J.E.Finn et al., Phys.Rev. 49 (1982) 1321.
5. S.Song et al., Phys.Lett. 130B (1984) 14.
6. G.Auger et al., Z.Phys. A321 (1985) 243.
G.Auger et al., preprint Orsay IPNO-ORE 85-28.
7. W.Mittig et al., Phys.Lett. 154B (1985) 259.
8. M.Fatyga, Phys.Rev.Lett. 55 (1985) 1376.
9. Y.Cassagnou et al. Preprint Saclay DPhN 21-98 et conférence invitée:
INS RIKEN, International Symposium on Heavy Ion Physics MONT FUJI -
Japon - Août 1984.
M.Conjeaud et al., Phys.Lett. 159B (1985) 244.
10. B.Borderie et M.F.Rivet, Z.Phys. A321 (1985) 703.
B.Borderie, Cours donné à "XVII Masurian School on Nuclear Physics"
MIKOLAJKI, Sept. 1985.
11. U.Mosel, P.-G.Zint et H.Passler, Nucl.Phys. A236 (1974) 252.
12. G.Sauer, H.Chandra et U.Mosel, Nucl.Phys. A264 (1976) 221.
13. U.A.Küpper, G.Wegmann et E.R.Hilf, Ann.Phys. 88 (1974) 454.
14. H.Jaqqan, A.Z.Mekjian et L.Zamick, Phys.Rev. C27 (1983) 2782.
15. M.W.Curtin, H.Toki et D.K.Scott, Phys.Lett. 123B (1983) 289.
16. D.G.Lamb, J.M.Lattimer, C.J.Pethick et D.G.Ravenhall, Nucl.Phys. A360
(1981) 459.
17. R.U.Minich et al., Phys.Lett. 118B (1982) 458.
18. H.H.Gutbrod, A.I.Warwick et H.Wieman, Nucl.Phys. A387 (1982) 177c.
19. C.B.Chitwood et al., Phys.Lett. 131B (1983) 289.
20. A.D.Panagiotou et al., Phys.Rev.Lett. 52 (1984) 496.
21. P.J.Siemens, Nature 305 (1983) 410.
22. P.Bonche, S.Levit et D.Vautherin, Nucl.Phys. A427 (1984) 278.
23. P.Bonche, S.Levit et D.Vautherin, Nucl.Phys. A436 (1985) 265.
24. S.Levit et P.Bonche, Nucl.Phys. A437 (1985) 426.
25. P.Bonche, Compte-Rendu de la 8^e Session d'Etudes Biennale de Physique
Nucéaire - Aussois - 1985.
26. G.Baym, H.A.Bethe et C.J.Pethick, Nucl.Phys. A175 (1971) 225.
27. D.G.Ravenhall, C.J.Pethick et J.M.Lattimer, Nucl.Phys. A407 (1983) 571.
28. D.G.Lamb, J.M.Lattimer, C.J.Pethick et D.G.Ravenhall, Nucl.Phys. A411 (1983)
449 et références citées.
29. Voir Référence 1. Tome I, Chapitre 8.
30. A.L.Goodman, J.I.Kapusta et A.Z.Mekjian, Phys.Rev. C30 (1984) 851.
31. X.Campi, J.Desbois et E.Lipparini, Phys.Lett. 142B (1984) 8 ; Nucl.Phys. A428
(1984) 327c.
32. J.Müfner, Physics Report 125 (1985) 129.

33. P.Bonche et D.Vautherin, Nucl.Phys. A372 (1981) 496.

34. H.R.Jaaman, A.Z.Mekjian et L.Zamick, Phys.Rev. C29 (1984) 2067.

35. Pour cette section et la suivante, on pourra se reporter au Chapitre 9 du Tome I de la Reference 1.

36. M.Brack et P.Quentin, Phys.Lett. 52B (1974) 159.

37. M.Brack et P.Quentin, Phys.Scripta 10A (1974) 163.

38. L.Landau et L.Lifshitz, Statistical Physics (MIR, Moscou 1967) sect.77

39. R.Dashen, S.Ma et H.J.Bernstein, Phys.Rev. 187 (1969) 345.

40. W.A.Fowler, C.A.Engelbrecht et S.E.Woosley, Astrophys.J. 229 (1979) 713.

41. D.L.Tubbs et S.E.Koonin, Astrophys.J. 232 (1979) L59.

42. A.K.Kerman et S.Levit, Phys.Rev. C24 (1981) 1029.

43. J.des Cloizeaux, dans Many-Body Physics, page 5, ed. C.de Witt et R.Balian, Gordon and Breach, 1968.

44. A.Bohr et B.R.Mottelson, Nuclear Structure, tome I, appendice 2B, page 281, Benjamin, New York, 1969.

45. J.P.Blazot et G.Ripka, Quantum Theory of Finite Systems, section 7.5, M.I.T. press, 1986.

46. T.H.R.Skyrme, Nucl.Phys. 9 (1959) 615.

47. D.Vautherin et D.M.Brink, Phys.Rev. C5 (1975) 626.

48. D.D.Clayton, Principles of stellar evolution and nucleosynthesis, Mc Graw-Hill, New York, 1968.

49. T.E.O.Ericson, Adv.in Phys. 9 (1960) 425.

50. H.A.Bethe, Rev.Mod.Phys. 9 (1937) 53 ; Phys.Rev. 50 (1936) 332.

51. M.Barranco et J.Treiner, Nucl.Phys. A351 (1981) 269.

52. X.Vines, M.Pi et M.Barranco, J.of Phys. 69 (1983) 1193.

53. P.Bonche et D.Vautherin, Astron.Astrophys. 112 (1982) 268.

54. J.Bartel et P.Quentin, Phys.Lett. 152B (1985) 29.