

FR 8900469

CEA-N-2560

Note CEA-N-2560

Centre d'Etudes de Bruyères-le-Châtel

ISOMERES DE FORME DANS LES NOYAUX PAIRS-PAIRS : PREMIERE SELECTION DE CANDIDATS DANS LA REGION DE MASSES A < 208

par

Michel GIROD, Jean-Paul DELAROCHE, et Jean-François BERGER

— MAI 1988 —

Note CEA-N-2560

Cote-metiere de cette note : A33

MOTS CLEFS (extraits du theseurus INIS)

en francais

en anglais

NOYAUX LOURDS NOYAUX PAIR-PAIRS ISOTOPES DE TRANSITION ISOMERIQUE POTENTIEL DE SURFACE THEORIE DE HARTREE-FOCK-BOGOLYUBOV THEORIE DE STRUTINSKY HAMILTONIENS OSCILLATEURS HARMONIQUES DONNEES EVALUEES

HEAVY NUCLEI EVEN-EVEN NUCLEI ISOMERIC TRANSITION ISOTOPES SURFACE POTENTIAL HARTREE-FOCK-BOGOLYUBOV THEORY STRUTINSKY THEORY HAMILTONIANS HARMONIC OSCILLATORS EVALUATED DATA Note CEA-N-2560 Michel Girod, Jean-Paul Delaroche, et Jean-François Berger

"ISOMERES DE FORME DANS LES NOYAUX PAIRS-PAIRS: PREMIERE SELECTION DE CANDIDATS DANS LA REGION DE MASSES A < 208 "

Sommaire – Cette étude théorique a pour but d'établir une première sélection de noyaux pairspairs non fissiles de masses A < 208 dont les surfaces d'énergie potentielle $V(\beta)$ présentent un minimum secondaire en fonction d'un paramètre d'élongation β . Notre sélection est faite à partir d'une procédure qui combine les méthodes Hartree-Fock-Bogoliubov et de Strutinsky. L'existence de minima secondaires dans les cartes $V(\beta)$ est nécessaire à la formation d'états excités de longue durée de vie (i.e. isomères de forme) qui se désexciteraient préférentiellement dans la voie γ . Il résulte de notre étude qu'approximativement soixante dix noyaux proches de la vallée de stabilité pourraient développer un isomérisme de forme.

"SHAPE ISOMERS IN EVEN-EVEN NUCLEI: PRELIMINARY SELECTION OF CANDIDATES IN THE MASS REGION A < 208 "

Summary – This theoretical study is intended to establish a preliminary selection of non fissible even-even nuclei with mass number A < 208 for which the potential energy surfaces $V(\beta)$ display a secondary minimum along an elongation coordinate β . Our selection relies upon a joint use of the Hartree-Fock-Bogoliubov and Strutinsky methods. The occurrence of secondary minima in $V(\beta)$ maps is of critical importance for the formation of long life excited states (i.e. shape isomers) which most likely would decay into the γ channel. Our study shows that more than seventy nuclei in the vicinity of the stability line might develop shape isomerism.

Commissariat à l'Energie Atomique - France.

109 p.

Note CEA-N-2560

Centre d'Etudes de Bruyères-le-Châtel

.

ISOMERES DE FORME DANS LES NOYAUX PAIRS-PAIRS : PREMIERE SELECTION DE CANDIDATS DANS LA REGION DE MASSES A < 208

par

.

Michel GIROD, Jean-Paul DELAROCHE, et Jean-Fraziois BERGER

I.INTRODUCTION

Le phénomène d'isomérisme est connu depuis longtemps en spectroscopie nucléaire. Il est admis qu'un état isomérique est un niveau excité du noyau dont la durée de vie est longue par rapport aux temps caractéristiques des transitions électromagnétiques les plus favorisées (i.e. transitions électriques dipolaires, quadrupolaires et octupolaires). Ce phénomène se manifeste sous la forme d'isomérisme de spin ou de forme. Les isomères de spin, que l'on observe à la fois dans les noyaux pairs-pairs et pairs-impairs, sont des états excités de spin et parité I dont la décroissance vers des niveaux moins excités de spin et parité l's'accomplit soit par émission de photons γ de multipolarité élevée, soit par conversion interne ou émission de paire $e^+ - e^-$. Un exemple bien connu d'isomère de spin est le premier état excité ($E_{\pi} = 75 \text{ eV}$, $I^{\pi} = 1/2^+$) de ²³⁵U qui a une durée de vie de l'ordre de 26 mn¹). L'isomérisme de forme correspond à la formation d'un minimum secondaire dans la surface d'énergie potentielle des noyaux. L'existence d'une telle forme a été suggérée pour la première fois en vue d'expliquer la fission retardée de ²⁴² Am²). Depuis lors, une quarantaine d'états isomériques de forme a été identifiée dans la région des actinides ³). Tandis que tous ces états se désexcitent dans la voie fission, leur décroissance dans la voie γ n'a pu être mise en évidence que dans un seul noyau: ²³⁸ U⁴).

Il est intéressant de constater qu'aucun isomère de forme n'a pu être identifié de façon certaine dans les autres régions de masse où la fission est très peu probable. La raison principale de cet échec tient sans doute au fait que (i) l'excitation de ces états passe par une modification considérable du champ moyen du noyau, et (ii) les techniques actuellement disponibles pour la détection de rayons γ émis par des isomères de forme ne sont pas assez performantes. Cette remarque soulève les questions suivantes qui bien sûr sont liées: quelle doit être la structure d'un noyau pour que l'observation d'un isomère de forme y soit a priori possible? Quels sont les meilleurs candidats parmi tous les noyaux stables ou voisins de la vallée de stabilité dont le mode de décroissance privilégié serait l'émission de rayons γ ?

L'objet de cette étude est de fournir une première réponse théorique à ces questions. Elle s'appuie sur la méthode des corrections de couches de Strutinsky ⁵) qui utilise comme données de base der niveaux de particule individuelle réalistes, c'est à dire issus de calculs Hartree-Fock-Bogoliubov ⁶), plutôt que ceux provenant — selon une habitude très répandue — de modèles en couches déformées. Mis à part l'intérêt fondamental que représente la prédiction d'un isomérisme de forme pour des noyaux qui présenteraient une décroissance inhibée dans la voie de fission, notre étude s'inscrit aussi parmi les efforts visant à concevoir un schéma réaliste de fonctionnement pour un laser γ (i.e.graser). Dans ce contexte, un isomère de forme dont la durée de vie est assez longue pourrait servir de niveau de stockage pour l'énergie électromagnétique ⁷).

II. DYNAMIQUE NUCLEAIRE A BASSE ENERGIE

La dynamique des excitations collectives à basse énergie est souvent décrite à l'aide d'un Hamiltonien exprimé en termes de variables collectives ⁸). Parmi celles-ci, la variable liée à l'élongation du noyau, et donc au mode quadrupolaire, est la mieux étudiée. Cette variable peut être représentée par le paramètre de déformation β utilisé tout au long de ce travail. Bien que la détermination précise des modes collectifs dépende à la fois des paramètres d'inertie et des potentiels collectifs, il est souvent utile de considérer unique.nent la dépendance du potentiel V en fonction de β pour acquérir une connaissance grossière du caractère d'un noyau. Par exemple, un potentiel $V(\beta)$ présentant un minimum profond au voisinage de $\beta = 0$ indique l'existence de vibrations autour d'une forme d'équilibre sphérique. Si maintenant $V(\beta)$ a un minimum prononcé pour $\beta \neq 0$, le spectre du noyau est de type rotationnel. Ces deux exemples ont principalement une valeur pédagogique car le potentiel collectif d'un noyau a généralement un profil plus compliqué dû aux effets de couches variant en fonction de la déformation. Le choix d'une variable collective unique est, lui aussi, peu réaliste. En effet, le seul degré de liberté β défini ci-dessus est bien incapable de décrire la richesse des modes collectifs observés dans les noyaux. En particulier, il sera toujours nécessaire de tester aussi le degré de liberté triaxia! γ pour s'assurer qu'un minimum du potentiel à un degré de liberté β ne devient pas un simple col lorsque l'on prend simultanément en compte les degrés β et γ . Quoi qu'il en soit, l'image du potentiel d'un noyau représenté en fonction du paramètre de déformation β est très utile et d'un usage répandu. Cette image servira également de guide dans notre travail.

Pour faciliter la compréhension de notre démarche et établir nos critères de choix, il est utile de montrer ici l'énergie potentielle $V(\beta)$ d'un noyau déformé lourd hypothétique qui subirait, par exemple, la fission retardée comme mode favorisé de décroissance. Cette énergie potentielle montrée en Fig.1 présente deux minima, l'un situé à petite déformation et l'autre à grande déformation. Les premiers états excités du système doivent apparaître comme des niveaux de rotation dans le premier puits. Ensuite, si le deuxième puits est suffisamment profond, il est possible que des états quasi stationnaire - des isomères de forme - s' y développent. Une fois esquissé ce schéma général, examinons les conditions physiques qui favoriseraient la marche d'un isomère soit vers la fission soit vers la voie de décroissance γ , l'émission de particules étant exclue si l'isomère a une énergie d'excitation inférieure au seuil de ces émissions. Le premier cas considéré, celui où la décroissance γ est très peu probable, est réalisé lorsque la première barrière (voir Fig.1) est de loin la plus difficile à traverser. Cela implique que cette barrière est soit élevée, soit épaisse ou bien les deux à la fois par rapport à la seconde. La situation où la fission retardée serait favorisée implique que les propriétés énumérées ci-dessus soient inversées. On se rend donc bien compte qu'une première condition favorisant l'émission γ est d'avoir une barrière de fission quasiment infranchissable. Cette condition permet d'exclure de notre étude préliminaire tous les noyaux qui ont la

possibilité de se désexciter par fission, c'est à dire tous ceux dont la masse est supérieure à A = 208.

Une fois ce choix établi, il s'agit de trouver les conditions qui rendent favorable l'émission de rayons γ à partir du deuxième puits vers le premier. Ces conditions sont plus difficiles à cerner, mais nous pensons qu'un cas favorable consisterait à disposer d'une première barrière pas trop haute c'est à dire de l'ordre de quelques MeV tout au plus. Cette condition certes primordiale mais pas trop restrictive laisserait à l'isomère la possibilité de suivre plusieurs étapes dans son chemin de désexcitation vers l'état fondamental du noyau. En fait, les propriétés (i.e. énergie, intensité,...) que l'on attend des rayons γ émis par l'isomère vont dépendre de la structure de la carte $V(\beta)$. Ce débat intéressant est loin de nos préoccupations immédiates, puisqu'il s'agit tout d'abord de proposer ici des noyaux susceptibles de développer un isomérisme de forme qui soit identifiable expérimentalement. Cette contrainte supplémentaire sur la forme que doit avoir $V(\beta)$ oblige la différence d'énergie entre les fonds du deuxième et du premier puits à être égale au plus à quelques MeV. Ces deux conditions requises sur la profondeur relative des puits et sur la barrière qui les sépare sont les seuls critères retenus dans notre étude qui a été étendue de façon systématique à de nombreux noyaux. Dans ce contexte, il est intéressant de noter qu'un novau satisfaisant les critères énoncés a déjà été identifié sur le plan expérimental et théorique dans une étude indépendante. Il s'agit du ⁶⁸Ni qui pourrait être le premier noyau situé en dehors de la région des actinides à présenter un état isomérique de forme ⁹).

III CALCUL DE L'ENERGIE POTENTIELLE $V(\beta)$

III.1.Méthode auto-cohérente de Hartree-Fock-Bogoliubov

La façon la plus fondamentale utilisée pour construire les surfaces d'énergie potentielle consiste à déterminer le champ moyen du noyau en présence d'un champ externe. Cette méthode auto-cohérente est connue sous le nom de méthode Hartree-Fock (HF) avec contraintes. Lorsque le champ d'appariement est également traité, cette méthode porte le nom de méthode Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB) avec contraintes ⁶). Cette méthode que nous utilisons ici sert à minimiser l'énergie totale du système à l'aide d'un príncipe variationnel. La minimisation s'écrit:

$$\delta[\langle \phi | H - \lambda_Z \hat{Z} - \lambda_N \hat{N} - \mu_0 \hat{Q}_{20} - \mu_2 \hat{Q}_{22} | \phi \rangle] = 0, \qquad (1)$$

avec les contraintes suivantes:

Dans l'équation (1), $\lambda_Z, \lambda_N, \mu_0$ et μ_2 sont des multiplicateurs de Lagrange, et \hat{Z} , \hat{N} et H les opérateurs qui respectivement représentent le nombre de protons et de neutrons ainsi que le Hamiltonien nucléaire effectif. \hat{Q}_i (i = 20,22) est un opérateur qui simule l'action d'un champ externe quadrupolaire appliqué au noyau. L'équation (2) signifie que le nombre de protons et de neutrons est conservé en moyenne, et que le noyau est déformé de telle sorte que sa distribution de masse ait des moments quadrupolaires égaux à q_{20} et q_{22} . Ici, q_{22} mesure la déviation de la forme de cette distribution par rapport à la symétrie axiale, et q_{20} son élongation le long d'un axe de symétrie. Finalement, l'énergie potentielle du noyau s'exprime en fonction de ces variables comme la valeur moyenne de H:

$$V(q_{20}, q_{22}) = \langle \phi | H | \phi \rangle$$

Puisque les moments quadrupolaires q_{20} et q_{22} peuvent être exprimés en fonction des variables collectives β et γ introduites par Bohr¹⁰) pour caractériser la forme triaxiale des noyaux, l'énergie potentielle peut s'écrire de façon équivalente comme $V(\beta, \gamma)$. Cette notation est systématiquement utilisée dans ce travail.

Tous les calculs HFB présentés utilisent la force effective à deux corps de portée finie D1S¹¹).Cette force a la même représentation fonctionnelle que la force D1 de Gogny ¹²) et a été construite de façon identique. Bien que les valeurs prises par les paramètres définissant cette force soient très différentes de celles de D1, ces deux forces ont des propriétés très proches dans la matière nucléaire ainsi que dans les noyaux. Cependant leur comportement diffère essentiellement à grande déformation, ($\beta > 0, 6$) où le terme de surface joue un rôle important. Les propriétés de surface de D1S ont été ajustées en se basant sur les barrières de fission des actinides qui est la seule région où des résultats expérimentaux concernant les grandes déformations peuvent donner des indications sur la valeur du paramètre de surface. Ainsi, la force D1S n'est pas une nouvelle interaction effective mais plutôt une forme améliorée de la force de Gogny.

La technique utilisée pour résoudre l'équation (1) repose sur le développement des fonctions d'onde ϕ sur la base des états de l'oscillateur harmonique à trois dimensions. Afin de minimiser les effets de troncation liés au choix d'une base, il faut s'assurer au préalable que la base choisie est assez grande. Le résultat de cette étude montre que 13 couches majeures suffisent pour traiter les noyaux les plus lourds de masse A < 208, et que 9 couches majeures conviennent au traitement des noyaux les plus légers (A $\simeq 40$).

La résolution numérique de l'équation (1), qui s'effectue au moyen d'une méthode itérative, demande un temps de calcul non négligeable même sur les ordinateurs les plus puissants. C'est pourquoi les calculs HFB avec contraintes n'ont été effectués que pour un nombre restreint de noyaux judicieusement choisis, comme cela est discuté dans la section suivante. Pour la même raison, ils ont aussi été réduits à la configuration qui préserve la symétrie axiale. Malgré cette dernière restriction, il est encore possible d'apprécier la mollesse d'un noyau dans la direction γ de déformation en observant la différence entre les minima principaux de $V(\beta)$ obtenus pour des déformations prolates ($\beta > 0$) et oblates ($\beta < 0$). Ainsi, un noyau sera d'autant plus mou dans la direction γ (i.e.triaxiale) que cette différence est faible.

III.2. Méthode phénoménologique de Strutinsky

Pour l'exploration systématique de plusieurs centaines de noyaux, nous avons adopté une méthode moins fondamentale mais beaucoup plus légère que la méthode HFB, et cependant capable de donner des indications suffisamment fiables dans la perspective de cette étude. Cette méthode phénoménologique, la méthode de Strutinsky ⁵), eut son heure de gloire il y a vingt ans environ pour expliquer la formation d'isomères de forme ainsi que la fission retardée dans la région des actinides (consulter, par exemple, les Refs. 13 et 14). Puisque cette méthode permet le calcul des cartes $V(\beta)$ en des temps très courts, son emploi rend possible l'étude systématique ¹⁵) d'un très grand nombre de noyaux, par exemple ceux qui sont rassemblés en Ref.16. Nous avons pu ainsi obtenir rapidement une masse de résultats qui a permis de faire une première sélection de noyaux pairs-pairs dont les potentiels $V(\beta)$ ont un profil qui satisfasse les critères définis en Sec.II. Là s'arrête notre intérêt pour la méthode de Strutinsky.

Cette méthode repose sur l'hypothèse que l'énergie de déformation $V(\beta)$ d'un noyau peut être décomposée en deux contributions:

$$V_{Z,N}(\beta) = \overline{V}_{Z,N}(\beta) + \delta V_{Z,N}(\beta), \tag{3}$$

où $\overline{V}_{Z,N}(\beta)$ est l'énergie de déformation d'une goutte liquide chargée comprenant la variation de son énergie de surface et la variation de l'énergie coulombienne en fonction de β^{17} , et $\delta V_{Z,N}(\beta)$ est une correction provenant de la variation des effets de couches et d'appariement avec β .

Dans notre mise en oeuvre de la méthode de Strutinsky, il est supposé que le terme d'appariement est faible devant le terme de correction de couches qui joue un rôle déterminant dans la formation des minima de $V(\beta)$ et des barrières qui les séparent ¹⁸). Cette approximation n'est pas critique dans la mesure où a priori l'on s'attend à des prédictions qualitatives pour les cartes de potentiel. Pour que, malgré tout, ces cartes soient les plus réalistes possibles, le terme de correction de couches est déterminé à partir de spectres à une particule pour les protons et les neutrons, qui sont issus de calculs

HFB avec β pour contrainte. Du fait de l'auto-cohérence de la méthode, les autres paramètres de déformation tels que β_4 et β_6 se trouvent automatiquement optimisés, et sont fonctions de β . Cette procédure qui, à notre connaissance, n'a jamais été utilisée permet de réintroduire implicitement des effets d'appariement dans la détermination de $V(\beta)$ défini en (3).

En vue de calculer le terme de correction de couches relatif à un grand nombre de noyaux, il est nécessaire de choisir avec soin les spectres à une particule HFB qui serviront de 'souche' pour le calcul des noyaux voisins. Pour cela, la région de masse définie par A < 208 a été divisée en sept zones dont les centroïdes définissent les noyaux 'souches'. Ces noyaux sont : ⁴⁶Ti, ⁸⁰Sr, ¹⁰²Ru, ¹²⁴Te, ¹⁴⁴Nd, ¹⁷⁰Yb, et ²⁰⁰Hg. Leurs spectres à une particule ont été obtenus par des calculs HFB sous contrainte. Les bases d'oscillateur utilisées avaient respectivement 9, 11, 11, 11, 11, 13 et 13 couches majeures. Les surfaces d'énergie potentielle sont montrées en Fig.2 pour des valeurs de β comprises entre -0, 4 et +0, 8.

La fiabilité de la méthode de Strutinsky peut être mesurée par son aptitude à d'une part reproduire la carte de potentiel HFB des noyaux souches et d'autre part prédire correctement $V(\beta)$ pour un noyau différent du noyau souche, dont on connait l'énergie potentielle HFB. De telles comparaisons sont présentées en Fig.3. Le haut de cette figure montre les surfaces $V(\beta)$ pour ²⁰⁰ Hg qui sont obtenues respectivement par la méthode HFB (trait plein) et la méthode de Strutinsky (ligne pointillée) basée sur l'utilisation de niveaux de particules issus de calculs HFB effectués pour le noyau souche ²⁰⁰ Hg. On peut voir que, à l'exception de la région proche du point sphérique, l'accord est raisonnablement bon entre les deux courbes. Le deuxième test est présenté au bas de la Fig.3 où l'on montre en pointillés le profil de $V(\beta)$ obtenu pour ¹¹⁴ Cd à partir du noyau souche ¹⁰⁴ Ru, et en trait plein l'énergie potentielle du même noyau telle que calculée par la méthode HFB. A nouveau, il y a un bon accord qualitatif entre les deux courbes sauf au voisinage du point sphérique, ainsi qu'à grande déformation.

Ces deux exemples montrent que la méthode de Strutinsky dont la mise en oeuvre s'appuie sur des niveaux de particule individuelle issus de calculs HFB donne des prédictions raisonnables pour $V(\beta)$ sauf pour les déformations où l'effet des corrélations d'appariement est sous-estimé. D'une manière générale, les calculs "à la Strutinsky" exagèrent les structures des surfaces d'énergie potentielle HFB. La validité de cette observation s'étend aux noyaux de masses supérieures à A \simeq 40. Pour tous les noyaux dont la masse est plus légère, notre étude montre que la méthode de Strutinsky n'est pas très fiable. Des lors, seule la méthode HFB est capable de fournir des cartes de potentiel réalistes pour ceux-ci.

IV.RESULTATS

Les niveaux de particule de chaque noyau souche (Z_0, N_0) servent au calcul de $\delta V_{Z,N}(\beta)$ pour tous les noyaux adjacents (Z,N) choisis de telle sorte que les conditions :

$$|N - N_0| < 12$$
 et $|Z - Z_0| < 12$,

soient réalisées. La détermination de $\delta V_{Z,N}(\beta)$ dépend directement de la condition de plateau⁵). Celle-ci est le plus souvent réalisée pour des polynômes de degré 4 et 6 qui servent à définir la fonction de lissage des densités, et pour des valeurs de l'ordre de 10 à 12 MeV pour la largeur en énergie Γ de cette fonction. La stabilité des résultats est assurée en choisissant un nombre de niveaux de particule au dessus de l'énergie de Fermi qui soit de l'ordre du triple du nombre de niveaux liés (voir Appendice).

L'ensemble des cartes $V(\beta)$ est présenté en Figs.4-73. En guise de résumé de ces résultats, mentionnons que (i) tous les minima secondaires des surfaces $V(\beta)$ sont obtenus de façon sûre pour des formes prolates correspondant à des valeurs de β comprises entre 0,4 et 0,7, (ii) les noyaux candidats à l'isomérisme de forme qui ne soient pas trop exotiques sont pratiquement tous pauvres en neutrons, et (iii) il existe des indications que d'autres isomères puissent exister à plus grandes déformations ($\beta > 0, 7$).

Il faut signaler que la méthode de Strutinsky tend à exagérer considérablement les effets de couches dans certains noyaux pour les déformations oblates ($\beta < 0$). Il est surprenant de constater que des noyaux bien connus pour être prolates dans leur état fondamental, présentent des surfaces d'énergie potentielle semblant favoriser la forme oblate, alors que certaines fines transitions oblate-prolate sont par ailleurs parfaitement reproduites (région des Osmium-Platine par exemple). C'est pourquoi les minima secondaires de V(β) sont essentiellement recherchés pour des valeurs positives de β .

Avec les critères de choix retenus en Sec.II, qui pour l'essentiel se ramènent à la condition que la différence d'énergie entre les minima des puits secondaire et principal d'un noyau doit être inférieure à 5 MeV, plus de 70 noyaux situés pour la plupart au voisinage de la vallée de stabilité pourraient présenter un isomérisme de forme. Cette sélection est résumée en Fig.74 où l'on peut voir que la plupart des candidats se regroupent au voisinage des valeurs (Z,N) suivantes: (40,40), (64,80), et (80,110). La fermeture de couches conduisant à la formation d'isomère de forme aux déformations β inférieures à 0,7 est la plus forte pour Z ou N égal à 80.

V.CONCLUSION

Un inventaire de noyaux pairs-pairs susceptibles de présenter des isomères de forme a été établi dans toute la région de masse où la fission comme voie de désexcitation de ces états est peu probable, une caractéristique qui devrait favoriser leur décroissance γ . L'ensemble de nos résultats a été obtenu grâce à l'usage systématique de la méthode de Strutinsky qui, ici, utilise des niveaux de particule individuelle provenant de calculs Hartree-Fock-Bogoliubov avec contraintes. Cette procédure qui renforce la crédibilité des prédictions basées sur cette méthode phénoménologique n'a évidemment pas la prétention de remplacer une approche entièrement microscopique. C'est pourquoi il \cdot y a lieu de considérer l'ensemble des résultats obtenus comme préliminaires, et aussi comme points de départ à des calculs auto-cohérents reposant sur la méthode Hartree-Fock-Bogoliubov étendue aux coordonnées collectives β et γ . Cette extension de notre étude est en cours.

En guise de remarque finale, mentionnons que l'ensemble des cartes $V(\beta)$ peut apporter d'utiles indications pour d'autres études, et en général toutes celles visant à apprécier la réponse d'un noyau à un champ externe (ici quadrupolaire), que ce noyau soit à l'intérieur ou en dehors de la vallée de stabilité.

APPENDICE

CALCUL DE LA CORRECTION DE COUCHES $\delta V_{Z,N}(\beta)$

A.Introduction

La correction de couches s'appuie sur l'observation que la densité de niveaux de particule individuelle dans les noyaux n'est pas uniforme. Pour les protons et les neutrons d'un noyau donné, cette densité g(E) s'exprime à chaque déformation β par :

$$g(E) = \sum_{i} \delta(E - E_i), \qquad (A - 1)$$

où E_i est l'énergie du $i^{i \ell m e}$ niveau de particule d'un type donné.

Avant d'entrer plus avant dans la méthode, il est utile d'établir nos notations. On introduit tout d'abord une densité de niveaux continue $\overline{g}(E)$ qui est sensée reproduire aussi bien que possible les grosses structures de g(E). Par exemple, on impose que les premiers moments :

$$\overline{\mu}_{k} = \int_{-\infty}^{\infty} E^{k} \overline{g}(E) dE \qquad (A-2)$$

de la distribution $\overline{g}(E)$ soient identiques aux moments correspondants de la distribution g(E):

$$\mu_{k} = \int_{-\infty}^{\infty} E^{k} g(E) dE. \qquad (A-3)$$

On calcule ensuite la correction de couches comme:

$$\delta V = \int_{-\infty}^{\lambda} Eg(E)dE - \int_{-\infty}^{\overline{\lambda}} E\overline{g}(E)dE, \qquad (A-4)$$

où λ et $\overline{\lambda}$, paramètres apparentés à des énergies de Fermi, sont tels que:

$$\int_{-\infty}^{\lambda} g(E)dE = \int_{-\infty}^{\overline{\lambda}} \overline{g}(E)dE = Z \text{ ou } N.$$
 (A - 5)

Autrement dit, δV est la différence entre l'énergie obtenue en remplissant les Z(N)premiers niveaux de la distribution vraie g et celle obtenue en remplissant les Z(N)premiers niveaux de la distribution continue \overline{g} . Ceci est répété séparément pour les protons et neutrons, si bien que la correction de couches totale est:

$$\delta V_{Z,N}(\beta) = \delta V_Z(\beta) + \delta V_N(\beta). \tag{A-6}$$

B.Détermination de $\overline{g}(E)$

Dans un premier temps, on souhaiterait construire $\overline{g}(E)$ en 'élargissant' chaque niveau d'énergie E_i de la distribution g(E) à l'aide d'une distribution gaussienne de largeur Γ choisie de façon à ce qu'elle soit supérieure aux espacements entre couches majeures (i.e. $\Gamma \simeq 10$ MeV). Le résultat se présenterait sous la forme:

$$\overline{g}(E) = \sum_{i} g_{i} exp\left[-\left(\frac{E-E_{i}}{\Gamma}\right)^{2}\right]. \qquad (A-7)$$

L'expérience montre que ce choix n'est pas le meilleur possible. C'est pourquoi on adopte la forme plus générale:

$$\overline{g}(E) = \sum_{i} P_n\left(\frac{E-E_i}{\Gamma}\right) exp\left[-\left(\frac{E-E_i}{\Gamma}\right)^2\right], \qquad (A-8)$$

où P_n est un polynôme de degré n, l'équation (A-7) étant un cas particulier de l'équation (A-8) lorsque n = 0.

Il faut maintenant ajuster les paramètres n et Γ de telle sorte que $\overline{g}(E)$ soit suffisamment lisse et que μ_k et $\overline{\mu}_k$ aient des valeurs aussi proches que possible. Les moments s'écrivent respectivement:

$$\mu_{k} = \sum_{i} (E_{i})^{k},$$

$$\overline{\mu}_{k} = \int_{-\infty}^{\infty} E^{k} \overline{g}(E) dE. \qquad (A-9)$$

Avec le changement de variable:

$$x=\frac{(E-E_i)}{\Gamma},$$

l'équation (A-9) s'écrit:

$$\overline{\mu}_k = \sum_i \sum_{l=0}^k E_i^{k-l} C_k^l \ I_{l,n}$$

avec :

et :

$$I_{l,n} = \Gamma \int_{-\infty}^{\infty} (\Gamma x)^l P_n(x) e^{-x^2} dx, \qquad (A-10)$$

et C_k^l étant un coefficient binomial.

Si P_n est choisi de telle sorte que :

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^{l} P_{n}(x) e^{-x^{2}} dx = \Gamma^{-(l+1)} \delta_{l,0}, \qquad (\Lambda - 11)$$

alors :

$$\overline{\mu}_{k}=\mu_{k},$$

pour k tel que $k \leq n$. Dans la situation inverse (i.e. k > n), μ_k n'est jamais égal à $\overline{\mu}_k$.

La condition (A-11) représente (n-1) équations pour les (n+1) coefficients inconnus du polynôme P_n . Elle permet donc en principe de déterminer P_n complètement. Il est à remarquer que si l'équation (A-7) avait été retenue pour $\overline{g}(E)$, c'est à dire l'équation (A-8) avec n = 0, seuls les moments μ_0 et $\overline{\mu}_0$ auraient pu être rendus égaux. D'où l'intérêt de choisir l'équation (A-8) avec n > 0. Il reste à déterminer le polynôme P_n . Pour cela, on tire avantage du fait que le membre de gauche de l'éq.(A-11) contient le terme $e^{-x^2} dx$ qui est la mesure d'intégration pour les polynômes d'Hermite. Ceci conduit à chercher P_n sous la forme:

$$P_n(x) = \sum_{m=0}^n d_m H_m(x), \qquad (A - 12)$$

où $H_m(x)$ est un polynôme d'Hermite. Maintenant, $d_0, d_1, ..., d_n$ sont les coefficients inconnus à déterminer. Rappelons que:

(i)

$$H_{k}(x) = \sum_{j=0}^{k} h_{kj} x^{j}, \qquad (A-13)$$

où h_{ki} représente les coefficients des polynômes d'Hermite :

$$h_{kj} = \frac{(-1)^{\frac{(k-j)}{2}} 2^j k!}{j! \frac{(k-j)}{2}!}$$

avec

 $(-)^j = (-)^k$

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} H_k(x) H_m(x) dx = \delta_{k,m} \sqrt{\pi} \ 2^k \ k!. \tag{A-14}$$

Pour trouver les coefficients d_m , on multiplie chaque équation (A-11) par h_{kl} (k = 0, 1,...,n) et on effectue la sommation sur l, (l = 0, 1,...k). Le résultat obtenu s'écrit:

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_k(x) P_n(x) e^{-x^2} dx = \Gamma^{-1} h_{k0}, \ k = 0, 1, \dots, n$$

On utilise ensuite (A-12) et (A-14) pour déduire:

$$d_k \sqrt{\pi} \ 2^k \ k! = \Gamma^{-1} \ h_{k0}.$$

Ainsi:

$$d_{k} = \frac{1}{\Gamma\sqrt{\pi}} \frac{h_{k0}}{2^{k}k!} = \begin{cases} 0 & \text{si } k \text{ est impair,} \\ \frac{(-1)^{\frac{k}{2}}}{\Gamma\sqrt{\pi}2^{k}(k/2)!} & \text{si } k \text{ est pair.} \end{cases}$$

Finalement, P_n s'écrit:

$$P_n(x) = \sum_{p=0}^{\nu} \frac{(-1)^p}{\Gamma \sqrt{\pi} \ 2^{2p} \ p!} \ H_{2p}(x),$$

avec:

$$\nu =$$
 partie entière de $\frac{n}{2}$,

soit encore :

$$P_n(x) = \sum_{j=0}^{\nu} a_j x^{2j}, \qquad (A-15)$$

avec:

$$a_{j} = \frac{(-1)^{j} \ 2^{j-\nu} (2\nu+1)!!}{\Gamma \sqrt{\pi} \ j! (\nu-j)! (2j+1)!!},$$
 (A - 16)

où le symbole !! désigne une double factorielle.

C. Expression analytique pour δV

La correction de couches, eq.(A-4), pour les protons ou les neutrons peut aussi s'écrire:

$$\delta V = \int_{-\infty}^{\overline{\lambda}} E \,\overline{g}(E) \, dE - \sum_{i=0}^{i_F} E_i,$$

où i_F est le niveau de Fermi de la distribution initiale g(E). L'intégrale figurant dans cette définition peut être exprimée en fonction de la variable réduite $b = (\overline{\lambda} - E_i)/\Gamma$:

$$\delta V = \sum_{j=0}^{\nu} a_j \Gamma \sum_{i=0}^{\infty} \left\{ E_i \ I_j(b) + \Gamma \ J_j(b) \right\} - \sum_{i=0}^{i_F} E_i,$$

où:

$$I_{j}(b) = -\frac{1}{2}e^{b^{2}} \sum_{p=0}^{j-1} \frac{(2j-1)!!}{(2j-2p-1)!! \ 2^{p}} \ b^{2j-2p-1} + \frac{(2j-1)!!}{2^{j}} \frac{\sqrt{\pi}}{2} \ (1 + Erf(b)), \ (A-17)$$

et:

$$J_{j}(b) = -\frac{1}{2}e^{b^{2}} \sum_{p=0}^{j} \frac{j!}{(j-p)!} b^{2j-2p}.$$
 (A - 18)

D.Détermination de $\overline{\lambda}$.

L'équation (A-5) définit $\overline{\lambda}$. En reportant (A-15) pour P_n dans (A-5), on obtient après transformations:

$$\sum_{i}\sum_{j=0}^{\nu}a_{j} \Gamma I_{j}(b) = Z \text{ ou } N.$$

Cette équation qui est résolue par itérations accapare la plus grande partie du temps de calcul et contraint la sommation sur l'indice i à être étendue sur un grand nombre de niveaux de particules. Le nombre maximum considéré ici est égal au quadruple du nombre de niveaux liés pour un nucléon de type donné.

E.Discussion.

En adoptant pour $\overline{g}(E)$ la représentation (A-8) où P_n est défini en (A-15) et (A-16), on dispose d'une distribution qui est identique à g(E) dans la mesure où leurs premiers moments sont égaux. Cependant, il faut bien réaliser que $\overline{g}(E)$ doit reproduire les caractéristiques de g(E) seulement jusqu'à un certain point. S'il en était autrement, $\overline{g}(E)$ comporterait les rnêmes fluctuations en énergie que g(E). En effet, $\overline{g}(E)$ est construit de telle sorte que:

$$\lim_{n \to \infty} \overline{g}(E) = g(E). \tag{A-19}$$

Il faut donc choisir des valeurs de n qui ne soient pas trop grandes. En pratique, on trouve que les valeurs n = 4 et 6 conduisent à des corrections de couches qui sont stables lorsque la condition de plateau est réalisée elle aussi. Dans la majorité des cas étudiés, celle-ci est obtenue pour des valeurs de la largeur Γ comprises entre 10 et 12 MeV.

Comme on peut le constater, les paramètres clefs de la méthode de Strutinsky sont n et Γ . Pour s'en rendre compte, on effectue l'analyse de Fourier de $\overline{g}(E)$:

$$\overline{g}(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \overline{g}(\omega) e^{-i\omega E} d\omega. \qquad (A - 20)$$

Dans cette expression, la fonction $\tilde{g}(\omega)$ représente l'amplitude de la composante ω de g(E). Si l'on souhaite que $\bar{g}(E)$ varie peu sur un intervalle d'amplitude ΔE , il faut que les composantes $\tilde{g}(\omega)$ soient négligeables pour $|\omega| > \frac{1}{\Delta E}$. En insérant (A-8) dans (A-20), on obtient $\tilde{g}(\omega)$:

$$\tilde{g}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega E} \sum_{j} exp\left\{-\left[\frac{E-E_{j}}{\Gamma}\right]^{2}\right\} P_{n}\left(\frac{E-E_{j}}{\Gamma}\right) dE.$$

Après quelques transformations, $\tilde{g}(\omega)$ s'écrit:

$$\tilde{g}(\omega) = \sum_{j} e^{i\omega E_{j}} e^{-\frac{\omega^{2}\Gamma^{2}}{4}} \sum_{k=0}^{\nu} \left(\frac{\omega^{2}\Gamma^{2}}{4}\right)^{k} \frac{1}{k!}.$$

Ainsi, on trouve la propriété suivante:

$$\lim_{n\to\infty}\tilde{g}(\omega)=\sum_{j}e^{i\omega L_{j}},$$

qui, dans l'espace dual, est équivalent à (A-19).

Pour que le lissage soit effectif, il faut donc que $|\tilde{g}(\omega)|$ soit négligeable pour $|\omega| > \frac{1}{\Delta E}$, où ΔE est de l'ordre de grandeur de l'espacement entre couches majeures, et que ν —donc n— ne soit pas trop grand. En pratique, δV est obtenu lorsque sa valeur est stable par rapport à des variations de n et Γ .

REFERENCES

- C.M.Lederer et V.S.Shirley, <u>Tables of Isotopes</u>, seventh Edition (John Wiley, New York, 1978)
- [2] S.Polikanov et al., Soviet Physics JETP 15 (1962) 1016
- [3] V.Metag, D.Habs et H.S.Specht, Phys.Rep.<u>65</u> (1980) 1
- [4] P.A.Russo, J.Perdersen et R.Vandenbosch, dans <u>Physics and Chemistry of Fission</u> 1973 (Rapport IAEA, Vienne, 1974) p.271
- [5] V.M.Strutinsky, Nucl.Phys. <u>A95</u> (1967) 420; ibid <u>A122</u> (1968) 1
- [6] M.Girod et B.Grammaticos, Phys.Rev. <u>C27</u> (1983) 2317
- [7] M.S.Weiss, Rapport UCRL-96673, contribution à "O-E LASE Conference", Los Angeles, Californie, 10-17 Janvier 1988
- [8] D.L.Hill et J.A.Wheeler, Phys.Rev. <u>89</u> (1953) 1102; J.J.Griffin et J.A.Wheeler, Phys. Rev. <u>108</u> (1957) 311
- [9] M.Girod, Ph.Dessagne, M.Bernas, M.Langevin, F.Pougheon, et P.Roussel, Phys. Rev. <u>C37</u> (1988) 2600
- [10] K.Kumar et M.Baranger, Nucl.Phys. <u>A92</u> (1967) 608
- [11] J.F.Berger, M.Girod et D.Gogny, Nucl. Phys. A428 (1984) 23c
- [12] J.Dechargé et D.Gogny, Phys.Rev. <u>C21</u> (1980) 1568
- [13] A.Michaudon, dans <u>Advances in Nuclear Physics</u>, ed. par M.Baranger et E.Vogt (Plenum, New York, 1973), p.1
- [14] S.Björnholm et J.E.Lynn, Rev.Mod.Phys. <u>52</u> (1980) 725
- [15] I.Ragnarsson et R.K.Sheline, Physica Scripta 29 (1984) 385
- [16] F.W.Walker, G.J.Kirouac, et F.M. Rourke, <u>Chart of the Nucleides</u>, twelfth Edition (General Electric Co., 1977)
- [17] A.Bohr et B.R.Mottelson, Nuclear Structure, W.A. Benjamin, Inc. 2 p.654 (1975)
- [18] M.Brack et al., Rev.Mod.Phys. 44 (1972) 320

Manuscrit reçu le 20 septembre 1988



DEFORMATION

<u>Fig 1</u> - Energie potentielle d'un noyau déformé non-fissile qui présenterait un isomère de forme à grande déformation.



Fig. 2 - Surfaces d'énergie potentielle HFB des noyaux "souches" en fonction de 2.



<u>Fig. 3</u> - Comparation des surfaces d'énergie potentielle HFB (trait plein) et SHFB (tirets) en fonction de 3 pour 200Hg en haut, 1140d en bas.

Figs. 4 ā 73

.

Ensemble des surfaces d'énergie potentielle SHFB en fonction de 3. Les noyaux sont classés par isotopes de Z = 10 & Z = 88, les valeurs de A nombre de masse et N nombre de neutrons sont notées & droite de chaque courbe.

Isotopes Z= 10



Figure 4

Isotopes Z= 12





T

Isotopes Z= 14





•

.



Isotopes Z= 18

•



Isotopes Z= 20





•

•

٠



Figure 10

Isotopes Z= 24



Figure 11

Isotopes Z= 24



Figure 12

Isotopes Z= 26

.



Figure 13

i.



Figure 14

Isotopes Z= 28



Isotopes Z= 28



Figure 16

•
Isotopes Z= 30



Figure 17

.





Figure 19

I

Isato,aes Z= 32



Figure 20



Figure 21



Isotopes Z= 36



Figure 23



Figure 24

Isotopes Z= 38





Figure 25

Isotopes Z= 40



Figure 27

I.



Figure 23

Isotopes Z= 42



Figure 29



Figure 30



Figure 31









Figure 33

Isotopes Z= 46



Figure 34

Isotopes Z= 42



Figure 35



Figure 36





Figure 38



Figure 39







Figure 42



Figure 44

















Figure 49





Figure 51

Isotopes Z= 64






Figure 53

Isotopes Z= 66



Figure 54





-



Figure 56



Figure 57



Figure 58



Figure 59



Figure 60



Figure 61



Figure 62



Figure 63



Figure 64

Isotopes Z= 78





Isotopes Z= 80





Figure 68





Figure 69



19. 19. s



Figure 71



Figure 72



Figure 73

ł



<u>Fig.74</u> - Inventaire des noyaux non-fissilles (A < 208) qui courraient présenter un isomère de forme. La courbe en trait plein représente la ligne de stabilité.

Edité per le Service de Documentation Centre d'Etudes Nucléaires de Saclay 91191 GIF-aur-YVETTE Cédex (France) .