

UNIVERSITÉ DE NANTES
FACULTÉ DES SCIENCES ET DES
TECHNIQUES

Dynamique de la fragmentation nucléaire : étude
des transitions de structure au sein des astres
compacts

Thèse de Doctorat
Discipline: Physique
Spécialité: Physique Subatomique

Présentée et soutenue publiquement par
Sébastien Figerou

Le 12 Mai 2010 devant le jury ci-dessous

Président: Monsieur EUDES Philippe, PU, Nantes
Rapporteur: Madame COLONNA Maria, DR, INFN Catane (Italie)
Rapporteur: Monsieur CHBIHI Abdelouahad, DR, GANIL, Caen
Examineur: Monsieur MARGUERON Jérôme, CR , IPNO Orsay
Examineur: Monsieur BASRAK Zoran, PU, Zagreb(Croatie)
Directeur de thèse: Monsieur SEBILLE François, PU ,Nantes
Co-Directeur de thèse: Madame De La MOTA Virginia, MC , Nantes

Table des matières

1	Physique des étoiles à neutrons	3
1.1	Historique et généralités sur les étoiles à neutrons	3
1.2	Equation d'état	4
1.3	Composition	7
1.4	Formation	8
1.5	Observation	10
1.5.1	X-Ray pulsar et radio pulsar	12
1.5.2	Masse	12
1.5.3	Rayon	12
1.6	Problématique du domaine	12
2	L'écorce des étoiles à neutrons : Etat de l'art	14
2.1	Ecorce externe	14
2.2	Ecorce interne	15
2.3	Synthèse et conclusion	16
3	Le modèle DYWAN	18
3.1	Introduction	18
3.2	Problème à N-corps	20
3.2.1	Introduction	20
3.2.2	Hiérarchie BBGKY	21
3.2.3	Approximation ETDHF	24
3.3	Ondelettes et décomposition en ondelettes	27
3.3.1	Echantillonnage	27
3.3.2	Gaborette	28
3.3.3	Transformée en ondelettes	29
3.3.4	Transformée en ondelette discrète	31
3.4	Etats cohérents généralisés	38
3.5	Le Modèle Dywan appliqué à la matière d'étoile	41
3.5.1	Présentation	41
3.5.2	Conditions initiales	41

3.5.3	Equations d'évolution	45
3.6	Interaction nucléaire : Interaction de Zamick généralisée	53
3.6.1	Propriété en matière nucléaire infinie	54
4	Interaction à longue portée et modélisation de la matière infinie	62
4.1	Modélisation de l'écorce d'une étoile à neutrons sous forme de matière infinie	62
4.1.1	Réseau cubique simple	65
4.1.2	Réseau face centrée	66
4.1.3	Réseau cubique centré	67
4.2	Modélisation d'une interaction de portée infinie : l'interaction Coulombienne	69
4.2.1	Généralités	69
4.2.2	Décomposition d'Ewald	70
4.2.3	Terme Direct	72
4.2.4	Terme Réciproque	74
4.2.5	Implémentation numérique	76
4.2.6	Compensation Direct-Reciproque	78
5	Le modèle DYWAN appliqué à la matière d'étoile	88
5.1	Visualisation de la matrice densité et des structures formées	88
5.1.1	Isosurface	88
5.1.2	Fonctionnelle de Minkowski	88
5.2	Exemple de simulation	90
5.3	Influence de l'équation d'état et sensibilité à la partie isovectorielle de l'interaction	94
5.4	Fluctuations et perturbations du réseau cristallin initial	97
6	Conclusions et Perspectives	107
7	Annexe A : Les fonctionnelles de Minkowski	110
7.0.1	Présentation rapide des fonctionnelles de Minkowski	110
7.1	Cadre Formel	112
7.1.1	Quelques notions de topologie	112

Chapitre 1

Physique des étoiles à neutrons

1.1 Historique et généralités sur les étoiles à neutrons

Indépendamment de Chandrasekhar, L.Landau calcula dans un article publié en 1931 [1] la masse maximale d'une naine blanche. Ce qui le conduisit, un an avant la découverte du neutron par J.Chadwick, à anticiper le concept d'astre d'une densité proche de celle de la matière nucléaire. Il fera l'analogie avec de gigantesques noyaux. Il se trouve que si l'on calcule le rayon d'une étoile à neutrons en utilisant la formule $R = r_0 A^{1/3}$ provenant du modèle nucléaire de la goutte liquide, on trouve le bon ordre de grandeur. La non connaissance du neutron, obligea Landau à ne pas respecter le principe de Pauli.

C'est en 1934 dans une publication de W.Baade *et al.* [2] que le concept théorique d'étoile à neutrons comme astre dense et froid, composé de neutrons et se formant dans les supernovae de type II, est discuté pour la première fois. C'est ce qui marqua le début des études théoriques réalisées sur le sujet.

Il faut attendre l'émergence de l'astronomie X-ray par fusées et ballons pour les premières observations sur le sujet. Hewish et son étudiante Bell détectèrent une source radio pulsante en 1967, résultats publiés en 1968 [3]. C'est Gold qui interpréta ces sources radio comme des étoiles à neutrons tournant sur elle même [4].

Comme nous le disions précédemment, les étoiles à neutrons sont des astres compacts, froids, et essentiellement composés de neutrons. La table (1.1) compare diverses grandeurs caractéristiques de ces astres à celles du soleil. Nous pouvons retrouver ces grandeurs dans [5].

Pour des masses semblables à celle du soleil, le rayon des étoiles à neutrons (une dizaine de kilomètres) est de plusieurs ordres de grandeur inférieur à celui du soleil (6×10^5 km), ce qui en fait des astres extrêmement compacts aux densités pouvant dépasser celle de la saturation de la matière nucléaire.

Les étoiles à neutrons possèdent des périodes de rotation de l'ordre de la seconde, alors que le soleil met plus de 24 jours pour effectuer une révolution complète. De plus, ces étoiles créent des champs magnétiques d'une puissance phénoménale, de 12 ordres de grandeur supérieur au champ magnétique du soleil (15 pour les magnétars).

L'idée de classer les étoiles à neutrons comme "astres froids" provient de leurs faibles températures, inférieures de deux ordres de grandeur à celle du soleil. En utilisant l'importante densité des astres, si on traduit ces températures en énergie par particule, on obtient un résultat légèrement supérieur au niveau de Fermi, atteint dans l'état fondamental microscopique¹ d'un système.

TAB. 1.1 – Comparaison de diverses grandeurs physiques caractéristiques entre le soleil et une étoile à neutrons

Grandeurs Physiques	Etoile à neutrons	Soleil
Masse	1 Masse solaire	1 Masse solaire
Rayon	10km	6×10^5 km
Densité	$\rho_{ns} = 10^{14} - 10^{15} g.cm^{-3}$	$\rho = 1 - 150 g.cm^{-3}$
Température	$T = 10^6 K$	$T = 10^8 K$
Période de révolution	$T_\omega = 10^{-3} - 10$ S	$T_\omega = 25.4$ Jours
Champ magnétique	$10^{12} - 10^{15}$ G	1 G

1.2 Equation d'état

Le paramètre de relativité est défini comme le rapport entre le rayon de l'objet considéré et du rayon de Schwarzschild. Il permet de donner un ordre d'idée sur l'intensité des effets relativistes. Celui des étoiles à neutrons, égal à 0.2, est bien plus élevé que celui des étoiles de la séquence principale (comme le soleil 10^{-6}), mais légèrement inférieur à celui d'un trou noir (égal à l'unité par définition du

¹De nombreuses études ont été réalisées sans température (T=0) et ce, avec de très bonnes approximations [20]

rayon de Schwarzschild). Ceci justifie l'utilisation de la relativité générale pour décrire ces astres compacts[7] .

La résolution de l'équation d'Einstein, dans le cas d'un système à symétrie sphérique se ramène à la résolution du système d'équation différentielle suivant :

$$\frac{dm}{dr} = 4\pi r^2 \rho \quad (1.1)$$

$$\frac{d\phi}{dr} = \left(1 - \frac{2Gm}{r^2}\right)^{-1} \left(\frac{Gm}{r^2} + 4\pi G \frac{P}{c^2} r\right) \quad (1.2)$$

$$\frac{dP}{dr} = -\left(\rho + \frac{P}{c^2}\right) \frac{d\phi}{dr} \quad (1.3)$$

Ce système d'équations est appelé système Tolman-Oppenheimer-Volkoff (TOV)[8]. En prenant la limite newtonienne on reconnaît les équations de l'hydrostatique. Dans cette limite $m(r)$ est la masse comprise dans la sphère de rayon r , et $\phi(r)$ est le potentiel gravitationnel.

Ce système est un système ouvert, nous avons 3 équations pour 4 fonctions inconnues (m, P, ϕ, ρ). Pour le rendre solvable il est nécessaire d'introduire une quatrième équation liant P à ρ . Une telle équation est appelée équation d'état. La pression étant définie comme la variation de l'énergie par rapport au volume ($\frac{\partial U}{\partial V}$) nous pouvons utiliser la densité d'énergie $\epsilon(\rho)$, ou l'énergie par particule $\omega(\rho)$ pour discuter de l'équation d'état, dans la suite de ce manuscrit. Cette dernière prend en compte toutes les contributions internes du système (interactions internes et énergie cinétique).

Cette équation va donc permettre à partir d'une description microscopique et la résolution du système T.O.V de remonter à toute la structure de l'astre. Sur la figure 1.2 est tracé le rayon d'une étoile en fonction de sa masse pour différentes équations d'états, données tirées de l'article [9]. Les zones de couleur représentent des contraintes théoriques : on demande à la vitesse du son d'être inférieure à la vitesse de la lumière c , permettant ainsi à l'astre d'être causal (zone verte). Une deuxième est imposée par la relativité générale, pour que le rayon de l'étoile soit inférieur au rayon de Schwarzschild (zone bleue). Et enfin que les forces centrifuges soient inférieures à la gravité, pour que l'astre reste lié (zone rouge).

Au vu de l'importante densité de l'étoile, c'est l'interaction nucléaire et l'interaction coulombienne qui dominent. L'interaction coulombienne étant connue de

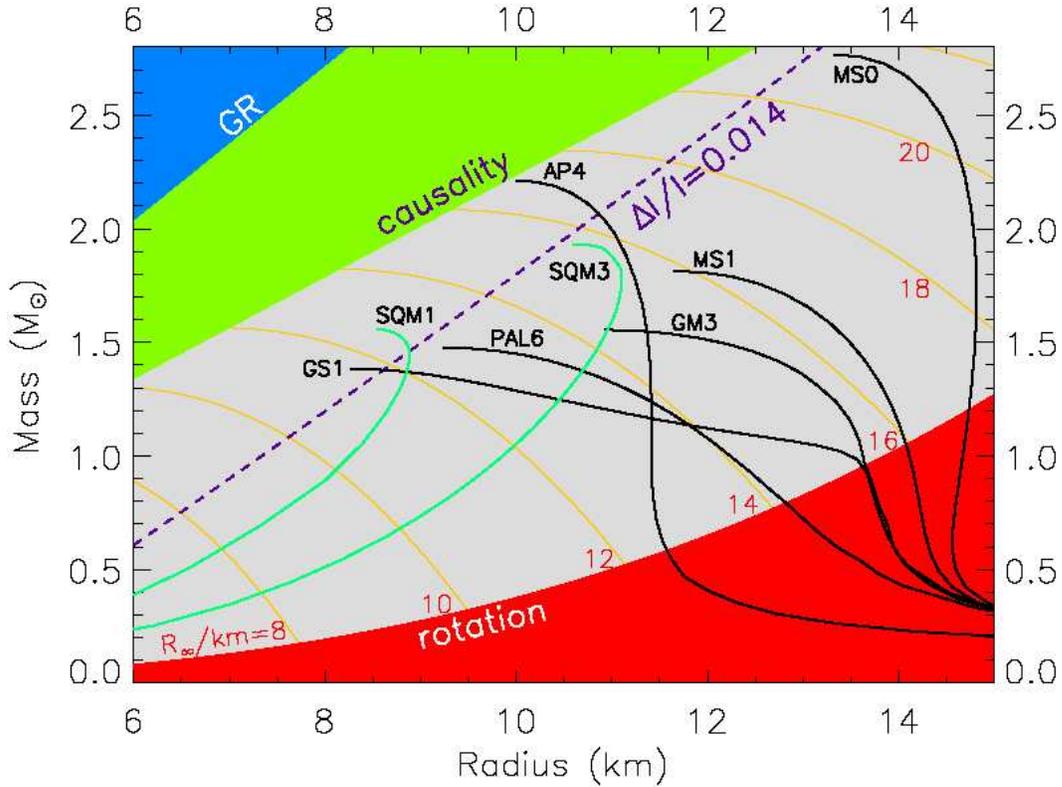


FIG. 1.1 – Diagramme Masse rayon présentant diverses équations d'états et les contraintes théoriques [9] imposées à celle-ci (Zone de couleur).

manière exacte, sa prise en compte ne pose pas de problèmes autres que numérique.

Pour la partie nucléaire, une telle équation s'obtient via plusieurs méthodes aussi bien expérimentales que théoriques (modélisation). Une force effective est généralement construite de manière à reproduire les propriétés de la matière nucléaire. Ce sont les collisions d'ions lourds réalisées dans les accélérateurs de particules tels que : GANIL, FAIR, Fermilab, LHC (Alice) qui permettent d'étudier ces dernières (Voir par exemple [10]). Tous ces instruments explorent différents domaines du diagramme de phases (ρ, T) de la matière nucléaire, mais aucun ne parvient à explorer ceux d'une étoile à neutrons, beaucoup trop dense. Les équations d'états utilisées sont donc une extrapolation des données recueillies. Bien qu'étant globalement en accord sur les domaines d'expérimentations, les différentes forces effectives utilisées donnent des résultats sensiblement différents, quand elles sont appliquées aux étoiles à neutrons. Leur composition exacte et la description des mécanismes physiques qui ont lieu en leur sein sont donc dépendantes du modèle

utilisé.

1.3 Composition

Dans la suite, une brève description de la composition d'une étoile sera donnée. Il faut bien garder à l'esprit que cette description est dépendante de la modélisation utilisée : en changeant de modèle, la description des phénomènes peut être elle aussi modifiée. C'est par exemple le cas des transitions structurales qui amènent aux "Pasta phases". Tous les modèles ne font pas ressurgir ce phénomène et la densité de transition dépend de la modélisation utilisée. Nous reviendrons plus précisément sur les différents modèles utilisés dans le chapitre (2).

Les étoiles à neutrons sont composées de 4 parties principales, définies selon l'évolution de la densité (voir schématisation 1.3).

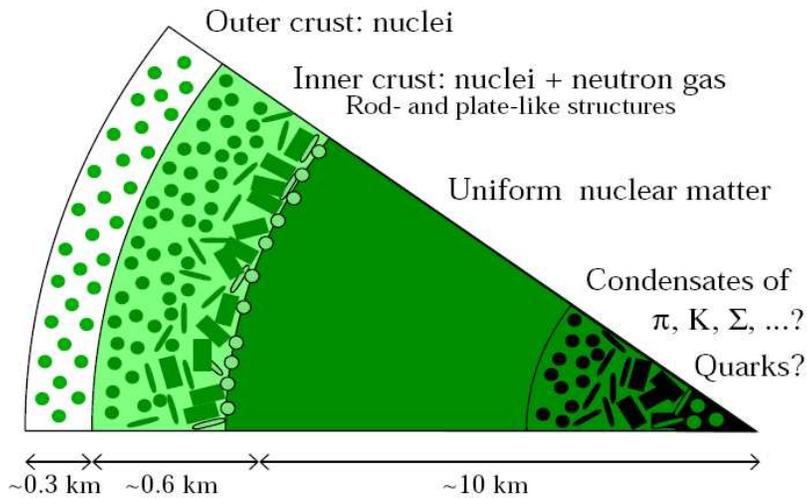


FIG. 1.2 – Coupe d'une étoile à neutrons

Croûte externe

La croûte extérieure va de la surface jusqu'à une densité de $4 \cdot 10^{11} g/cm^3$. Elle est composée d'ions entièrement ionisés baignant dans un gaz d'électrons. Ces derniers forment un gaz relativiste dégénéré à partir d'une densité de $10^6 g.cm^{-3}$. Les ions étant fortement couplés par l'interaction Coulombienne, la matière se trouve à l'état solide ou liquide. Elle forme probablement un réseau coulombien de ^{56}Fe avec des traces d'éléments plus lourds[11].

Croûte interne

La croûte intérieure débute à une densité spécifique appelée : "Neutrons drip line". A cette densité le potentiel chimique neutron du milieu extérieur devient inférieur à celui des noyaux. Les neutrons vont quitter les noyaux pour former un gaz. La fraction protonique de la matière nucléaire diminue avec l'augmentation de la densité, pour atteindre environ 10% proche du coeur. A ces densités, l'interaction coulombienne et l'interaction nucléaire ont une intensité similaire, mais agissent de façon opposées. Le système se trouve dans un état frustré. Les noyaux sont de plus en plus déformés, pouvant suivant les modèles, former des phases exotiques nommées "pasta phases". Les neutrons formant le gaz et les nucléons confinés peuvent se trouver dans des états superfluides.

Coeur de l'étoile

C'est certainement dans le coeur intérieur de l'étoile que les connaissances sur sa composition sont les plus incertaines. La matière nucléaire pourrait se trouver sous une forme homogène, mais la possibilité d'états plus exotiques de la matière nucléaire a été mise en évidence par plusieurs modèles. Parmi ceux-ci, on trouve notamment la possibilité d'une matière Hyperonique [12], de condensat de bosons [13], ou encore de quarks déconfinés [14].

1.4 Formation

La présence de pulsars dans les restes de supernovae, comme la supernova du Crabe et celle de Vela , a permis d'en déduire que les étoiles à neutrons se forment par des processus violents. Bien que les simulations de supernovae (à 3 dimensions) n'aboutissent pas encore à l'éjection des couches complètes externes, le scénario est connu dans ses grandes lignes [18].

Une supernova est la dernière étape de la vie d'une étoile. Elle ne peut se produire que si celle-ci est suffisamment massive (environ 10 masses solaires).

L'étoile en fin de vie possède une structure en couches (*cf.* figure 1.3), dite en pelures d'oignons. Les éléments les plus légers se trouvent à la surface de l'étoile. La plupart du temps ceux-ci sont principalement composés d'hydrogène, ce qui donne l'illusion d'une géante rouge.

Le coeur quant à lui est essentiellement constitué de fer, dernier élément à produire de l'énergie lors de sa synthèse. Mais on y trouve aussi toute une mer d'électrons dégénérés. A cause des densités phénoménales auxquelles cette mer est

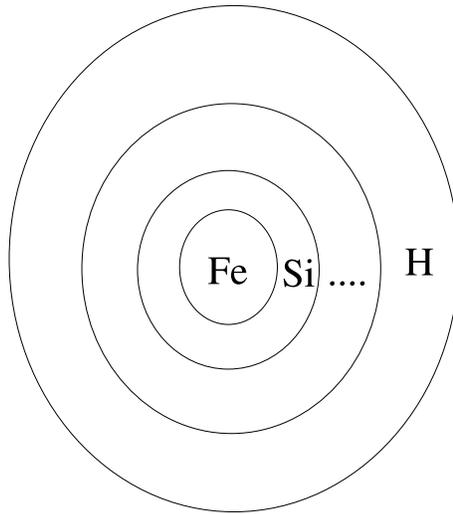
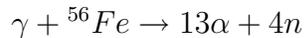


FIG. 1.3 – Structure en couches d’une étoile massive juste avant la supernova. On note la présence du Fer dans le noyaux et du silicium dans la couches suivantes.

soumise, la dégénérescence produit une pression qui vient s’opposer à la gravité. Les seules réactions de fusion qui ont encore lieu se produisent en périphérie du coeur, où le silicium fusionne en fer. Elles sont cependant trop peu nombreuses pour contrebalancer la gravité. Petit à petit le cœur devient de plus en plus massif (augmentation des noyaux de fer par la fusion du silicium), jusqu’à ce qu’il atteigne la masse de Chandrasekhar. A partir de là, le cœur s’effondre sur-lui même [figure 1.4 stage I-II], mais l’énergie ainsi gagnée ne peut être utilisée pour réactiver les réactions de fusion, étant donné la stabilité du fer. Une partie de l’énergie étant utilisée pour la photodissociation du fer, elle n’alimente pas la pression de dégénérescence :



De plus à ces densités on observe un processus de capture électronique important ($p + e^- \rightarrow n + \nu_e$), qui va diminuer le nombre d’électrons et faire baisser encore la pression de dégénérescence. L’écroulement gravitationnel s’emballe et au bout de 10 ms, des densités de l’ordre de 10^{14}g/cm^3 sont atteintes. A ce moment les neutrinos transportant la majorité de l’énergie libérée par l’effondrement (environ 90 %), sont piégés dans la périphérie du cœur (future croûte de l’étoile à neutrons). La contraction devient adiabatique [figure 1.4 stage II-III].

Ce n’est que lorsque les densités nucléaires ($\rho_0 = 2.8 \times 10^{14} \text{g/cm}^3$) sont atteintes que la chute s’arrête brutalement, stoppée par l’interaction forte neutron-neutron. La violence du choc crée une onde de choc se déplaçant vers l’extérieur, et expulsant

ainsi les couches externes. C'est à ce moment précis que les simulations ne sont plus capables de décrire le phénomène : elles arrivent toutes à la conclusion que l'onde de choc s'évanouit avant d'expulser les couches externes. Les physiciens soupçonnent fortement les neutrinos piégés de revitaliser l'onde de choc.

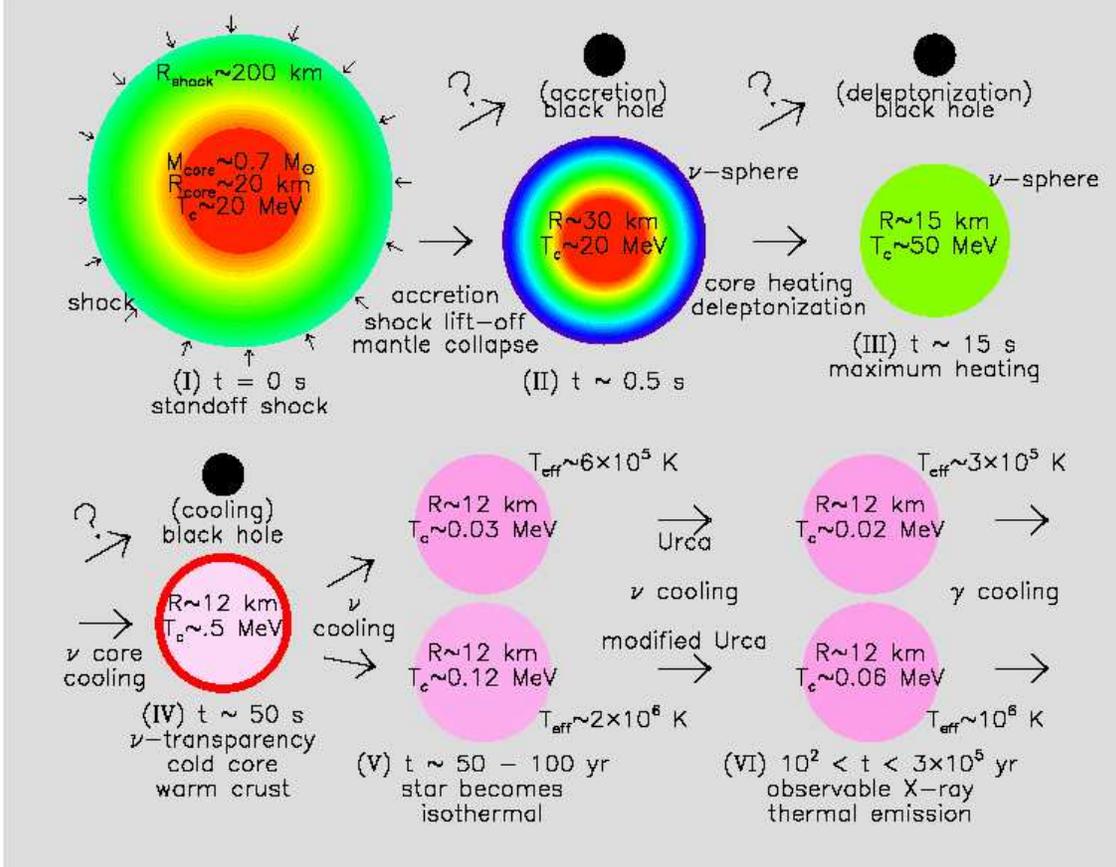


FIG. 1.4 – Evolution de l'étoile à neutrons. La ligne supérieure représente l'évolution au cours de la supernova. La ligne inférieure quand à elle représente le refroidissement de l'étoile. [19]

1.5 Observation

Les étoiles à neutrons émettent différents types d'onde et particules. Pour les principaux : le rayonnement électromagnétique, l'émission de neutrinos, l'émission d'ondes gravitationnelles. L'observation de celles-ci permettent de remonter à différentes informations sur l'astre. Dans cette section nous en donnons un bref aperçu, pour plus de détails se reporter à [11].

Rayonnement électromagnétique

Les étoiles à neutrons émettent dans tout le spectre électromagnétique : du rayonnement radio au rayon gamma. Les ondes radios furent l'une des premières observables historiquement, elles sont détectées via des télescopes terrestres, citons notamment Arecibo, Parkes. Elles permettent de remonter à la période de rotation de l'astre, via les pulsars (radio pulsar), où la masse dans le cas de systèmes binaires.

Le rayonnement thermique n'est observable que pour certaines étoiles à neutrons. En effet si l'étoile est trop jeune, celui-ci sera couvert par le rayonnement du champ magnétique. Si l'étoile est trop vieille, elle sera trop froide pour émettre suffisamment. Le rayonnement thermique permet de remonter à la température de l'astre.

Les rayons X émis par ces astres, sont observés via des fusées et des ballons au début de l'astronomie rayon X. Actuellement, essentiellement par des satellites. Citons notamment Chandra, X-ray MultiMirror, RXTE. Les processus émettant ce genre de rayonnement sont de différentes sources : point chaud, accrétion de matière, accélérations de particules dans le champ magnétique. Selon le phénomène observé et que l'étoile se trouve en système binaire ou isolé, son observation permet de remonter à la masse ou à la température.

Le rayonnement gamma est observé via des télescopes spatiaux, comme INTEGRAL, HETE-2 et plus récemment FERMI.

Neutrino

La principale perte d'énergie est due à une perte via les neutrinos. Cette particule étant extrêmement difficile à observer, ce n'est que pendant le flux important qui a lieu lors des supernovae que l'on peut les détecter. La supernova de 1987 SNA1987 [15] permis de détecter quelques neutrinos dans les détecteurs Kamio-kande II [16] au Japon et Irvine-Michigan-Brookhaven [17].

Ondes Gravitationnelles

Les étoiles à neutrons en système binaire, ou celles possédant une forte déformation (asymétrie due à la vitesse de rotation, ou présence de montagnes) émettent des ondes gravitationnelles, qui pourraient être détectées par des installations terrestres comme VIRGO, LIGO, ou spatiales comme LISA. La mesure de celle-ci permettrait de remonter à la structure de l'étoile.

1.5.1 X-Ray pulsar et radio pulsar

1.5.2 Masse

L'une des informations les plus facilement accessibles est la masse. Elle est obtenue en mesurant les paramètres des orbites de Kepler de systèmes comprenant une étoile à neutrons et un compagnon. Les systèmes binaires comprenant deux étoiles à neutrons étant ceux donnant les résultats les plus précis.

Les masses mesurées des étoiles à neutrons peuvent nous apporter des contraintes sur les équations d'état. En premier lieu via la masse maximale. Si l'on mesure des étoiles de masse $M_{1,2,3,\dots}$, alors toutes les équations d'état prédisant une masse maximum inférieure à celles-ci seront discréditées. Cette contrainte est notamment utilisée pour vérifier l'existence, ou plutôt la non existence des "Stranges stars" : étoiles à neutrons comprenant un large coeur de quark déconfiné.

1.5.3 Rayon

On mesure le rayon d'une étoile à neutrons via le décalage vers le rouge (red-shift) de son émission électromagnétique. Vu la petitesse de son ordre de grandeur (environ une dizaines de kilomètres) il est difficile d'en avoir une estimation précise.

Diagramme M(R)

La masse couplée à la mesure du diamètre de l'étoile permet de tracer un diagramme de la masse en fonction du rayon, diagramme qui peut être calculé pour chaque équation d'état (voir figure 1.2).. Le diamètre de l'étoile est une information difficilement accessible dû à la faible taille de l'astre. De plus il y a peu de différences entre les EOS pour le domaine concerné. Ceci fait qu'en l'état des mesures actuelles, on obtient très peu de contraintes directement via cette méthode.

1.6 Problématique du domaine

L'intérêt des modélisations est donc double. Dans un premier temps les calculs de plus en plus précis permettent de décrire de mieux en mieux les phénomènes présents dans les étoiles, aidant ainsi à une meilleure compréhension de ces astres. Ces modélisations permettent à partir d'arguments microscopiques de remonter à la dynamique macroscopique de l'astre (étude de l'astre dans sa globalité) et aux observables.

Ensuite les étoiles à neutrons représentent un gigantesque laboratoire permettant d'étudier la matière nucléaire sous des conditions extrêmes, non reproductibles sur terre. Les contraintes apportées par les observations, permettront de mieux comprendre comment fonctionnent les mécanismes d'interaction nucléaire.

Bien que représentant une faible proportion en masse et en épaisseur, la croûte de l'étoile à neutrons agit comme une interface pour les observables entre le coeur (99% de la masse de l'étoile) et l'observateur. Une modélisation précise de sa structure, et de ses réactions est donc primordiale. Dans la suite nous donnerons une description plus précise des différents travaux qui ont été réalisés sur la description de tels objets. Pour une description plus complète se rapporter au livre de P.Haensel de référence [11].

Chapitre 2

L'écorce des étoiles à neutrons : Etat de l'art

Depuis l'identification des pulsars comme étant des étoiles à neutrons tournant rapidement sur elles-mêmes, l'étude théorique de ces dernières a été un champ actif de la recherche. Nous présentons ici les principaux travaux réalisés en lien avec l'écorce de ces astres, puis nous motiverons l'adaptation du modèle DYWAN à ce type d'études.

2.1 Ecorce externe

Les études concernant l'écorce externe de l'étoile ont essentiellement consisté à utiliser différents modèles pour déterminer la composition en noyaux, notamment leur masse. Les premiers calculs ont été réalisés par des modèles statistiques [21], basés sur la mesure expérimentale de la masse des différents noyaux. Il ressort notamment que dans des conditions physiques correspondant à cette partie de l'étoile, les états fondamentaux de la matière nucléaire se trouvent être sous forme d'un réseau d'ions ^{56}Fe . Résultats confirmés par le modèle BPS de Baym et al. [22] et d'autres travaux qui ont suivi [23]. Des calculs plus récents produits par Heansel et al. montrent la présence de ^{78}Ni dans les parties inférieures de l'écorce externe [24], ceci étant dû notamment aux effets de couches. Ces résultats évoluent continuellement avec les progrès expérimentaux, notamment dans le domaine des noyaux exotiques et riches en neutrons. Au delà du ^{78}Ni les masses sont calculées théoriquement. Récemment Ruster et al. [26] montrent que l'état fondamental de la matière est encore modèle dépendant notamment à cause de ces effets de couches mal connus pour les noyaux riches en neutrons. La compréhension de la structure de l'écorce externe des étoiles à neutrons nécessite des expériences en physique nucléaire en particulier sur les noyaux riches en neutrons. Une partie de

ces besoins sera couverte par le programme de SPIRAL2 au GANIL dès 2013.

2.2 Ecorce interne

L'équation d'état de la matière nucléaire aux densités correspondant à l'écorce interne d'une étoile à neutron ou à la proto-étoile, selon que l'étude est réalisée à température nulle ou finie, a été l'objet de nombreuses études théoriques. Nous pouvons citer les travaux dans une approximation Thomas-Fermi (TF) à température nulle de [38], [39], [40]. Les auteurs [25] ont utilisé une approximation de Thomas-Fermi étendue (ETF) tenant compte de la température finie, et de la non localité de la fonctionnelle énergie, pour étudier l'écorce interne.

Les études réalisées avec un modèle de goutte liquide [41], [42], [43] et [44] traitent de manière classique le système étudié, en l'occurrence la matière nucléaire aux densités proches de la densité de saturation, mais présente l'avantage de donner un sens physique aux différents termes intervenant dans l'interaction. En complément d'autres modèles il permet entre autre de faciliter la compréhension des résultats obtenus. C'est notamment vrai pour les phases exotiques explicitées dans le paragraphe suivant.

Un autre type d'étude réalisé résout les équations de Hartree-Fock dans l'approximation de Wigner-Seitz, consistant à utiliser une cellule de Wigner-Seitz [47] et à appliquer des conditions limites aux bords de cette super-cellule. On peut citer notamment les travaux de Negele et Vautherin [20]. Ils mirent en évidence l'importance des effets de couches de protons.

L'approximation de Wigner-Seitz reproduit mal les symétries du réseau. Une décomposition en fonctions de Bloch est nécessaire pour prendre en compte correctement cette structure ordonnée. Carter et al utilisent un tel procédé dans leur travaux [45] et [46]. Ils arrivent à des résultats similaires à la physique du solide, notamment avec la présence de bandes de continuum, et de bandes interdites.

Sur la plage de densité de l'écorce interne, l'intensité de l'interaction coulombienne devient comparable à l'interaction nucléaire. D'un point de vue macroscopique, cette compétition intervient entre le terme de surface explicité par le modèle de la goutte liquide [29], et le terme Coulombien. Alors que pour de faibles densités la tension de surface aura tendance à donner une forme sphérique aux noyaux, dans les conditions de l'écorce interne la frustration liée à ces deux interactions déformera les noyaux, pour faire naître des structures beaucoup plus exotiques.

Celles-ci ont été initialement prédites et de manière indépendante par [29] et [30]. Les auteurs [27] et [28] confirment via un modèle d'Ising que ces structures sont le résultat d'une frustration du système liée à ces deux interactions. Les différentes études réalisées s'accordent sur la séquence de transition entre ces structures :

Sphère \rightarrow Cylindre \rightarrow plaque \rightarrow bulles \rightarrow homogène

Carter et al modélisent aussi ce type de structures exotiques avec une approche empruntée à la physique du solide, consistant à la décomposition des neutrons du continuum sur des fonctions de Bloch.[45] et [46]

Toutes les modélisations précédentes sont effectuées de manière statique, avec une minimisation de l'énergie sous contrainte des symétries. Les travaux des auteurs [36] pour la dynamique moléculaire (MD) et [49] pour la dynamique moléculaire quantique (QMD) étudient ces structures de manière dynamique, sans hypothèse sur les formes ou les symétries des noyaux ou réseaux. Dans ces simulations l'existence de telles structures exotiques se trouve être confirmée. Watanabe propose une extension à son modèle QMD [50] tenant compte de la température finie de manière à l'appliquer à la proto-étoile.

Outre leur formation, l'impact que peut avoir ces structures est un autre domaine d'intérêt. Nous pouvons citer les travaux [31], [32], [33], [34], [35] et [36] étudiant l'impact des ces structures sur la diffusion cohérente neutrino-matière. En effet Freedman et al [31] puis les travaux plus récents des auteurs précédemment cités montrent une augmentation de la section efficace neutrino-matière nucléaire dans le cas d'une diffusion cohérente. Ce phénomène est particulièrement intéressant pour l'évolution des supernovae [32], puisqu'il pourrait apporter l'énergie manquante à l'onde de choc pour éjecter les couches extérieures de l'étoile. Ce phénomène est en effet non reproduit par les modèles hydrostatiques à 3 dimensions. Les auteurs [36] et [37] apportent un point de vue dynamique à cette étude en utilisant respectivement un modèle de dynamique moléculaire (MD) et un modèle de dynamique moléculaire quantique(QMD)

2.3 Synthèse et conclusion

Nous avons vu qu'actuellement une première partie des calculs réalisés dans les conditions de l'écorce d'une étoile à neutrons est effectuée de manière statique, dans l'approximation de Wigner-Seitz sous contrainte de symétrie préalablement choisie. Dans le cas de l'étude des structures exotiques nommées les "pastas phases" qui nous intéressent particulièrement dans le cadre de cette thèse, certains groupes

étudient ces structures, en utilisant des modèles dynamiques basés sur les codes de simulations QMD. Ce type de modélisation présente les avantages de ne faire aucune hypothèse sur la symétrie des noyaux ou des réseaux. Par contre il traite les propriétés de la mécanique classique d'une manière effective. Les états à une particule sont représentés par une gaussienne de largeur de fixe, le principe de pauli est injecté via un potentiel effectif répulsif. Ce type de calculs est adapté à des milieux "chauds" à température finie, mais s'avère limité quand la matière est proche de son état fondamental. Il manque actuellement des modélisations qui possèdent les avantages des deux grands types d'approches présentées, à savoir dynamique, imposant un minimum de symétrie, et basée sur un cadre formel quantique. Le modèle, DYWAN, présenté dans ce manuscrit, et décrit dans le chapitre suivant, se place dans une telle optique. Nous pouvons noter les travaux de Karim Hasnaoui, P.Chomaz, F.Gulminelli qui répondent à une demande similaire en effectuant des simulations avec un code FMD (Fermionic Molecular Dynamics). Ce modèle utilisent un Lagrangien similaire à QMD mais travaille sur une base d'états antisymétrisés. Dans ses travaux de thèse Karim Hasnaoui [62] met en évidence que les équations utilisées dans FMD sont équivalentes à celles de TDHF.

Chapitre 3

Le modèle DYWAN

3.1 Introduction

Par opposition à une approche macroscopique qui est centrée sur le comportement collectif d'un système nucléaire, une approche microscopique s'appuie sur le comportement individuel des particules qui composent le système. Il s'agit donc d'étudier un système quantique de N particules en interaction mutuelle. Le nombre de degrés de liberté associé à un tel système est bien trop important pour que le problème puisse être résolu de façon exacte. L'utilisation d'un ensemble d'approximations s'avère donc nécessaire.

La description complète d'un système quantique à N corps est donnée par une fonction d'onde à N corps $|\Psi^N\rangle$ dont l'évolution est régie par l'équation de Schrödinger, ou de façon équivalente par l'opérateur densité à N corps $\rho^N = |\Psi^N\rangle\langle\Psi^N|$ dont l'évolution temporelle est régie par l'équation de von Neumann. Cette équation ne peut pas être résolue. Plusieurs approches peuvent alors être utilisées pour déduire de l'équation de von Neumann une équation qui permette de décrire l'évolution du système. Elles visent toutes à éliminer de l'équation de von Neumann les informations considérées comme non pertinentes pour la description du système. On peut citer deux de ces méthodes : la méthode de réduction, qui consiste à établir une troncature dans la hiérarchie des équations d'évolution des matrices densités réduites, et la méthode de projection qui s'appuie sur des critères entropiques pour extraire l'information pertinente ([73]). Pour les phénomènes physiques considérés ici, l'observable pertinente est la matrice densité à un corps. On peut déduire de l'équation de von Neumann une équation d'évolution de la matrice densité à un corps qui permet d'introduire des couplages avec les variables non pertinentes (corrélations à deux corps) afin de prendre en compte les processus dissipatifs. La prise en compte des corrélations à plusieurs corps se

fera dans le cadre d'un traitement statistique de l'information à N corps contenue dans l'équation d'évolution utilisée. Ce procédé permettra aussi de générer les fluctuations du système autour de son comportement moyen.

L'équation d'évolution obtenue à l'issue du processus d'approximation demeure complexe et nécessite donc un traitement numérique performant. Nous verrons que la théorie mathématique des ondelettes se révèle être un outil particulièrement adapté à ce type de problème. Elle permet en effet une compression très efficace de l'information. De plus, les propriétés mathématiques des ondelettes facilitent la transposition de l'équation d'évolution du système en un ensemble simple d'équations d'évolution d'ondelettes. La description du système peut ainsi se faire en terme de fonction d'onde.

Le modèle DYWAN (DYnamical WAvelets in Nuclei) [69] s'appuie sur une hiérarchie précise et contrôlable d'approximations à partir desquelles des comparaisons significatives avec les résultats expérimentaux peuvent être effectuées. Il proportionne une représentation de la dynamique nucléaire à partir du cadre mathématique de la théorie des ondelettes. Dans ce cadre les ondelettes constituent une base particulièrement adaptée à une description compacte des fonctions de distribution quantiques. Cette théorie présente l'avantage d'optimiser aussi bien les espaces de représentation que le traitement numérique, en conséquence elle permet, en principe, d'incorporer différents effets physiques qui peuvent jouer un rôle important à différentes échelles. Les méthodes de simulation numérique faisant appel aux ondelettes présentent aussi un grand intérêt, au delà du domaine d'intérêt de notre modèle, en raison de leur champ d'application et de leur nature interdisciplinaire.

Ce chapitre sera consacré à une présentation du modèle DYWAN ([79], [80], [82]). Nous commencerons par présenter le schéma de résolution qui permet d'aboutir à l'équation d'évolution de la matrice densité à un corps en partant de l'équation de von Neumann. Puis nous introduirons l'analyse en ondelettes et nous verrons comment elle peut être utilisée pour décrire les fonctions d'onde d'un système nucléaire. Enfin nous verrons comment les outils ainsi mis en place peuvent être appliqués à la simulation de la dynamique dans un milieu nucléaire infini et neutre, tel que l'écorce des étoiles à neutrons .

3.2 Problème à N-corps

3.2.1 Introduction

Un système à N corps quantique est complètement décrit par sa fonction d'onde à N particules Ψ qui peut toujours s'écrire sous la forme d'une combinaison linéaire de produits d'états à une particule. Pour respecter le principe de Pauli, dans le cas d'un système fermionique ces produits doivent être antisymétriques. On les construit par l'intermédiaire de déterminants de Slater des états à une particule :

$$\Psi_N = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_1(\xi_1) & \psi_1(\xi_2) & \dots & \psi_1(\xi_N) \\ \psi_2(\xi_1) & \psi_2(\xi_2) & \dots & \psi_2(\xi_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_N(\xi_1) & \psi_N(\xi_2) & \dots & \psi_N(\xi_N) \end{vmatrix} \quad (3.1)$$

Ψ est solution de l'équation de Schrodinger :

$$-i\hbar \frac{\partial |\Psi_N\rangle}{\partial t} = H |\Psi_N\rangle \quad (3.2)$$

où H est le Hamiltonien du système :

$$H = \frac{p^2}{2m} + V \quad (3.3)$$

Il est composé d'un terme cinétique ($\frac{p^2}{2m}$) et d'un terme potentiel regroupant toutes les interactions du système : entre les N particules et le cas échéant de nature externe. Dans la suite nous considérons un système à N corps isolé, donc sans interaction externe. Ci-dessus la dépendance temporelle est comprise dans les fonctions d'ondes : $\Psi_N = \Psi_N(t)$, C'est la représentation de Schrodinger.

On définit l'opérateur densité ρ à N corps à partir de la fonction d'onde à N particules comme suit :

$$\rho(t) = |\Psi_N(t)\rangle \langle \Psi_N(t)| \quad (3.4)$$

On peut définir l'opérateur évolution temporelle, qui propage la matrice densité (en représentation de Schrodinger) ρ dans le temps :

$$\rho(t) = U(t)\rho(t=0) \quad (3.5)$$

Dans le cas où le Hamiltonien est indépendant du temps cet opérateur prend la forme :

$$U(t, t_0) = \exp\left(\frac{(t - t_0)[H,]}{i\hbar}\right) \quad (3.6)$$

En calculant la dérivée temporelle de l'expression (3.4) on retrouve l'équation de Liouville von Neuman :

$$i\hbar \frac{\partial \rho_N(t)}{\partial t} = [H_N, \rho_N(t)] \quad (3.7)$$

Cette équation se réécrit :

$$i\hbar \frac{\partial \rho_N(t)}{\partial t} = L_N \rho_N(t) \quad (3.8)$$

où l'on a utilisé le Liouvillien à N corps défini par :

$$L_N = [H_N,] \quad (3.9)$$

3.2.2 Hiérarchie BBGKY

Revenons sur l'Hamiltonien H_N du problème à N corps, en représentation opérateur, il s'écrit :

$$\begin{aligned} H_N = & \sum_{\alpha, \beta} \langle \alpha | T | \beta \rangle c_{\alpha}^+ c_{\beta} + \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \delta} \langle \alpha, \beta | V | \gamma, \delta \rangle c_{\alpha}^+ c_{\beta}^+ c_{\gamma} c_{\delta} \\ & + \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \delta, \epsilon, \zeta} \langle \alpha, \beta, \gamma | V | \delta, \epsilon, \zeta \rangle c_{\alpha}^+ c_{\beta}^+ c_{\gamma}^+ c_{\delta} c_{\epsilon} c_{\zeta} + \dots \end{aligned} \quad (3.10)$$

où $\langle \alpha | T | \beta \rangle$ sont les éléments de matrice à un corps de l'opérateur énergie cinétique, $\langle \alpha, \beta | V | \gamma, \delta \rangle$ les éléments de matrice de l'opérateur interaction à deux corps, $\langle \alpha, \beta, \gamma | V | \delta, \epsilon, \zeta \rangle$ les éléments de matrice de l'opérateur d'interaction à 3 corps, etc ...

L'Hamiltonien ci-dessus décrit le système à N corps de manière exacte, mais insoluble. Il est nécessaire d'effectuer un nombre important d'approximations pour le rendre soluble. La première va être de tenir compte uniquement des interactions à deux corps. Ce qui donne le Hamiltonien à N corps suivant :

$$H_N = \sum_{\alpha, \beta} \langle \alpha | T | \beta \rangle c_{\alpha}^+ c_{\beta} + \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \delta} \langle \alpha, \beta | V | \gamma, \delta \rangle c_{\alpha}^+ c_{\beta}^+ c_{\gamma} c_{\delta} \quad (3.11)$$

Pour pouvoir effectuer ces approximations il est nécessaire de réécrire l'équation de Liouville von Neumann en une hiérarchie d'équations couplées.

Pour cela, il est possible de définir un opérateur densité réduite ρ_s , en sommant ρ_N sur $N - s$ corps :

$$\rho_s = \frac{N!}{(N - S)!} Tr_{s+1, \dots, N} \rho_N \quad (3.12)$$

Le second terme de l'équation de Liouville von Neumann (3.7) peut se décomposer de la manière suivante :

$$[H_N,] = \sum_{i=1}^N [H_i^0,] + \sum_{i < j=1}^N [H_{i,j}^1,] \quad (3.13)$$

Ou encore :

$$\begin{aligned} [H_N,] &= \sum_{i=1}^S [H_i^0,] + \sum_{i < j=1}^S [H_{i,j}^1,] + \sum_{i=S+1}^N [H_i^0,] \\ &+ \sum_{i=1}^S \sum_{j=S+1}^N [H_{i,j}^1,] + \sum_{i=1}^N \sum_{j=S+1}^N (i < j) [H_{i,j}^1,] \end{aligned} \quad (3.14)$$

Ce qui donne en terme d'opérateur de Liouville à un corps :

$$\begin{aligned} L_N &= \sum_{i=1}^S L_1^0(i) + \sum_{i < j=1}^S L_1^1(i, j) + \sum_{i=S+1}^N L_1^0(i) \\ &+ \sum_{i=1}^S \sum_{j=S+1}^N L_1^1(i, j) + \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^S (i < j) L_1^1(i, j) \end{aligned} \quad (3.15)$$

avec

$$L_1^0(i) = [H_i^0,] \quad (3.16)$$

$$L_1^1(i, j) = [H_{i,j}^1,] \quad (3.17)$$

En moyennant sur $N - S$ l'équation de Liouville von Neuman (3.7), on obtient ainsi :

$$i\hbar \frac{\partial \rho_S(t)}{\partial t} = \sum_{i=1}^S [H_i^0, \rho_S] + \sum_{i < j=1}^S [H_{i,j}^1, \rho_S] + \sum_{i=1}^S Tr_{S+1} [H_{i,S+1}^1, \rho_{S+1}] \quad (3.18)$$

Ou en terme d'opérateur de Liouville :

$$i\hbar \frac{\partial \rho_S(t)}{\partial t} = L_S^0 \rho_S + L_S^1 \rho_S + \sum_{i=1}^S Tr_{S+1} L_1^1(i, S+1) \rho_{S+1} \quad (3.19)$$

avec le Liouvillien à S corps défini par :

$$L_S = L_S^0 + L_S^1 = \sum_{i=1}^S L_1^0(i) + \sum_{i < j=1}^S L_1^1(i, j) \quad (3.20)$$

En appliquant cet algorithme $N - 1$ fois, on obtient N équations couplées dont la dernière n'est autre que l'équation (3.7) de Liouville von Neuman. A ce stade

la résolution de ce système d'équations reste exacte, mais insoluble en pratique. Si l'on considère la hiérarchie précédente à ses deux ordres les plus bas, on a les équations suivantes :

$$i\hbar \frac{\partial \rho_1(t)}{\partial t} = L_1^0 \rho_1 + L_1^1 \rho_1 + Tr_2 L_1^1(1, 2) \rho_2 \quad (3.21)$$

$$i\hbar \frac{\partial \rho_2(t)}{\partial t} = (L_1^0(1) + L_1^0(2) + L_1^1(1, 2)) \rho_2(1, 2) + Tr_3 (L_1^1(1, 3) + L_1^1(2, 3)) \rho_3(1, 2, 3) \quad (3.22)$$

L'équation (3.21) fait apparaître la matrice densité à deux corps, dont l'évolution est décrite par l'équation (3.22). Ce terme tient compte des corrélations à 2 particules. On ne peut résoudre l'équation (3.21) qu'une fois trouvée la solution de la matrice densité à deux corps via l'équation (3.22), qui elle même nécessite la résolution de la matrice densité à trois corps via l'ordre suivant.

Une première approche consiste à négliger les corrélations à deux particules et plus. Ce qui permet d'écrire la matrice densité à deux corps comme le produit antisymétrisé des matrices densité à un corps :

$$\rho_2(1, 2) = P(1, 2) \rho_1(1) \rho_1(2) \quad (3.23)$$

où P est l'opérateur d'antisymétrisation. L'équation précédente se réécrit en terme d'élément de matrice :

$$\rho_2(1, 1', 2, 2') = \rho_1(1, 1') \rho_1(2, 2') - \rho_1(1, 2') \rho_1(2, 1') \quad (3.24)$$

Cette approximation permet de fermer l'équation 3.21 :

$$i\hbar \frac{\partial \rho_1(t)}{\partial t} = L_1^0 \rho_1 + Tr_2 L_1^1 P(1, 2) \rho_1(1) \rho_1(2) \quad (3.25)$$

ou encore

$$i\hbar \frac{\partial \rho_1(t)}{\partial t} = [h_{HF}, \rho_1] \quad (3.26)$$

où h_{HF} prend la forme :

$$h_{HF} = L_1^0 + Tr_2 L_1^1 P(1, 2) \rho_1(2) \quad (3.27)$$

Chaque particule voit un potentiel effectif à un corps qui est une moyenne de toutes les interactions à deux corps, c'est une évolution en champ moyen. C'est l'approximation TDHF (équation 3.26), où h_{HF} est le Hamiltonien de Hartree-Fock. Comme nous le verrons dans le chapitre suivant, la matière d'étoile se prête relativement bien à une telle étude. Mais il peut être intéressant de réactiver les corrélations à deux particules.

La matrice densité à deux corps peut être décomposée en une partie corrélée et une partie non corrélée :

$$\rho_2(1, 2) = \rho_2^0(1, 2) + \rho_2^c(1, 2) \quad (3.28)$$

$$= P(12)\Pi(12) + P(1/2)\Pi(1/2) \quad (3.29)$$

ρ_2^0 correspondant à la matrice densité réduite à deux corps non corrélée et ρ_2^c à la matrice à deux corps corrélée. Les opérateurs P sont des opérateurs d'antisymétrisation. Les indices successifs non séparés par les barres inclinées indiquent qu'ils correspondent à des particules corrélées, les particules non corrélées ayant des indices séparés par le délimiteur. Ainsi toute matrice à S corps non corrélée est le produit des matrices densité à un corps :

$$\rho_S^0 = \Pi_S(1/2/\dots/S) = \prod_{i=1}^S \rho_1(i) \quad (3.30)$$

En utilisant Le premier ordre de la hiérarchie BBGKY (3.21) et la décomposition de la matrice densité à deux corps (3.23), on peut décrire l'évolution de la partie non corrélée de la matrice à deux corps :

$$\begin{aligned} i\dot{\rho}_2^0 &= [L^0(1) + L^0(2)] \rho_2^0 \\ &+ Tr_3 P(1/2)(L_1(1, 3) [P_2(1/3)\Pi_3(1/2/3) + P_2(13)\Pi_3(2/13)]) \\ &+ L_1(2, 3) [P_2(2/3)\Pi_3(1/2/3) + P_2(23)\Pi_3(1/23)] \end{aligned} \quad (3.31)$$

3.2.3 Approximation ETDHF

La projection de l'équation (3.7) sur l'espace à S corps donne :

$$i\dot{\rho}_S = L_S \rho_S + Tr_{S+1} \sum_{i=1}^S L_1^1(i, S+1) \rho_{S+1} \quad S = 1, \dots, N-1. \quad (3.32)$$

Ce système d'équations constitue la hiérarchie BBGKY (Bogoliubov, Born, Green, Kirkwood, Yvon) qui prise dans son intégralité est strictement équivalente à l'équation de von Neumann. Pour pouvoir résoudre le problème, il va donc falloir effectuer différentes approximations permettant la troncature des équations. Pour $S = 1$ l'équation donne :

$$i\dot{\rho}_1 = L_1^0(1)\rho_1 + Tr_2 L_1^1(1, 2)\rho_2(1, 2). \quad (3.33)$$

L'approximation la plus forte consiste à négliger les corrélations entre particules. On écrit alors la matrice densité à deux corps $\rho_2(1, 2)$ comme le produit

antisymétrisé des matrices à un corps. On aboutit à une équation fermée pour la matrice densité à un corps qui est en fait l'équation TDHF (Time Dependent Hartree-Fock). Il s'agit d'une description de champ moyen pur. Si l'on souhaite aller au-delà, il faut introduire les corrélations à plusieurs corps. En tenant compte uniquement des corrélations à deux corps, on peut utiliser l'équation (3.32) pour $S = 2$ afin d'obtenir une expression de $\rho_2(1, 2)$ que l'on pourra réinjecter dans (3.33). Un certain nombre d'approximations sont nécessaires pour aboutir à une équation finale relativement simple. On se contentera ici de rappeler les hypothèses effectuées :

- Les corrélations à trois corps et plus sont négligées
- On se situe dans l'approximation Markovienne, ou de mémoire courte [83], c'est-à-dire que le temps caractéristique d'interaction entre deux particules est supposé inférieur à l'intervalle de temps entre deux collisions successives. Les particules perdent alors la "mémoire" de leur état avant collision. C'est cette hypothèse qui est à l'origine de l'irréversibilité de l'équation finale.
- On suppose le couplage faible, c'est-à-dire les énergies d'interaction petites par rapport à l'énergie typique du système. Ceci correspond à un libre parcours moyen important.

On aboutit alors à l'équation suivante :

$$\dot{\rho}_1(1) = -i[h(1), \rho_1(1)] + I = -i\mathcal{L}\rho_1(1) + I, \quad (3.34)$$

qui est l'équation ETDHF (Extended Time Dependent Hartree-Fock). Le premier terme correspond au champ moyen : $h(1)$ est le Hamiltonien de Hartree-Fock défini par :

$$h(1) = H^0(1) + Tr_2 V^A(1, 2)\rho_1(2), \quad (3.35)$$

V^A étant le terme d'interaction à deux corps antisymétrisé, \mathcal{L} est le Liouvillien correspondant. Le deuxième terme I est le terme de collision qui introduit des effets dissipatifs.

Lorsqu'on se place dans la base des états propres $|\alpha \rangle$ du Hamiltonien à un corps,

l'équation 3.34 s'écrit :

$$i\dot{\rho}_{\alpha\alpha'} = \frac{1}{\hbar} \sum_{\beta\beta'} \mathcal{L}_{\alpha\beta\alpha'\beta'}(\rho) \rho_{\beta\beta'} + I_{\alpha\alpha'}, \quad (3.36)$$

avec :

$$I_{\alpha\alpha'} = \sum_{\beta\gamma\delta\beta'\gamma'\delta'} W_{\alpha\beta\gamma\delta}^{\alpha'\beta'\gamma'\delta'} [\rho_{\gamma\gamma'} \rho_{\delta\delta'} (\delta_{\alpha\alpha'} - \rho_{\alpha\alpha'}) (\delta_{\beta\beta'} - \rho_{\beta\beta'}) - \rho_{\alpha\alpha'} \rho_{\beta\beta'} (\delta_{\gamma\gamma'} - \rho_{\gamma\gamma'}) (\delta_{\delta\delta'} - \rho_{\delta\delta'})]. \quad (3.37)$$

Une dernière approximation consiste à négliger les termes non diagonaux de la matrice densité. L'équation d'évolution dissipative finale est alors :

$$i\dot{\rho}_\alpha = -i \sum_{\beta} \mathcal{L}_{\alpha\alpha}^{\beta\beta} \rho_\beta + \underbrace{\sum_{\beta\gamma\delta} W_{\alpha\beta\gamma\delta} [\rho_\gamma \rho_\delta (1 - \rho_\alpha)(1 - \rho_\beta) - \rho_\alpha \rho_\beta (1 - \rho_\gamma)(1 - \rho_\delta)]}_I. \quad (3.38)$$

Le terme de collision I respecte le principe de Pauli. Il peut se décomposer en un terme de gain $\rho_\gamma \rho_\delta (1 - \rho_\alpha)(1 - \rho_\beta)$ et un terme de perte $\rho_\alpha \rho_\beta (1 - \rho_\gamma)(1 - \rho_\delta)$. Le terme de gain correspond à une collision entre une particule dans l'état γ et une particule dans l'état δ conduisant aux transitions vers les états α et β , ceci avec le poids $\rho_\gamma \rho_\delta$ à condition que les états α et β ne soient pas déjà occupés ($(1 - \rho_\alpha)(1 - \rho_\beta)$). Le terme de perte correspond à une collision entre une particule dans l'état α et une particule dans l'état β conduisant aux transitions vers les états γ et δ , ceci avec le poids $\rho_\alpha \rho_\beta$ à condition que les états γ et δ ne soient pas déjà occupés ($(1 - \rho_\gamma)(1 - \rho_\delta)$). $W_{\alpha\beta\gamma\delta}$ représente la probabilité de transition entre les états γ et δ et les états α et β .

L'équation ETDHF a été obtenue en négligeant un grand nombre de degrés de liberté. Elle ne peut donc fournir que le comportement moyen du système. Il est cependant nécessaire d'introduire des fluctuations de densité si l'on souhaite décrire la dispersion des observables et l'émission de particules. Il s'agit donc d'extraire l'information à N corps la moins biaisée associée à l'information à un et deux corps contenue dans l'équation ETDHF ([74]). Ceci peut être réalisé dans le cadre de la physique statistique. La fonction d'onde à N corps d'un système est alors décrite par un mélange statistique de déterminants de Slater de fonctions d'ondes à un corps. Un critère entropique permet alors de déterminer la matrice densité à N corps la moins biaisée. Nous verrons que la description des fonctions d'onde en terme d'ondelettes permet d'obtenir une expression simple pour la matrice densité à N corps du système.

3.3 Ondelettes et décomposition en ondelettes

La transformée en ondelettes est un outil permettant de découper un certain objet mathématique (fonctions, opérateurs, ensembles des données) en différentes composantes fréquentielles, et d'étudier chaque composante dans une échelle de résolution adéquate. Les précurseurs de cette technique ont des origines très diverses comme les mathématiques pures [85], les états cohérents en physique [86] ou l'analyse de signaux sismiques en ingénierie [87]. La théorie d'ondelettes connaît actuellement de nombreuses applications dans différentes disciplines, les plus nombreuses concernent effectivement l'analyse de toutes sortes de signaux.

Les équations précédemment rappelées, décrivant l'état d'un système et son évolution temporelle, nécessitent la projection de ces états sur une base. Le choix de celle-ci est un compromis difficile entre précision et temps de calcul. Il existe différents choix possibles, selon les modes de résolution et les modèles. Pour exemple ceux de types QMD [89], FMD [88], approximent chaque fonction d'onde à une particule par une gaussienne.

Le modèle DYWAN réalise un échantillonnage de la matrice densité sur une base de fonctions aux propriétés bien particulières : les ondelettes [79] [80]. Dans cette partie nous allons donner une rapide présentation de ce type de fonction et de leurs propriétés.

Dans cette partie, nous allons voir comment l'analyse en ondelettes se révèle être un outil performant pour le traitement de l'équation d'évolution. L'analyse en ondelettes ([75],[76]) a été développée dans le cadre de la théorie du signal afin de proposer un outil complémentaire à l'analyse de Fourier qui permettrait une étude à la fois dans le domaine temporel et spatial. Il s'agit donc d'une analyse temps-fréquence. Cependant, l'analyse en ondelettes peut aussi être considérée comme un microscope permettant de se focaliser sur des structures à échelles différentes, il s'agit alors d'une analyse position-échelle : c'est cet aspect qui rend l'analyse en ondelettes particulièrement adaptée à l'étude des systèmes quantiques.

3.3.1 Echantillonnage

L'échantillonnage d'une fonction en extrayant l'information la plus pertinente pour un minimum de paramètres est un problème bien connu du traitement du signal. L'analyse de Fourier est une méthode couramment utilisée pour ce genre de problèmes. Elle fonctionne relativement bien pour des signaux réguliers et périodiques. Mais pour rendre compte de signaux irréguliers, elle nécessite un très grand nombre de paramètres. Ce nombre est encore plus important dès qu'il s'agit

d'échantillonner une fonction nulle sur un domaine important. De plus les spectres résultant d'une telle analyse sont chacun définis dans un des deux espaces duaux (temps-frequence, position-impulsion). Il est impossible d'obtenir un spectre mixte donnant une représentation de la fonction dans ces deux espaces à la fois. Une telle représentation s'avère extrêmement utile dans de nombreux domaines, et spécialement pour décrire l'espace des phases d'un problème à N corps. C'est pour répondre à ces limites que l'analyse par ondelette a été conçue pour le traitement du signal, puis exportée et développée dans de nombreux autres domaines.

3.3.2 Gaborette

Avant d'introduire directement ces fonctions que sont les ondelettes, nous allons introduire une analyse intermédiaire. Le but de cette analyse développée par Gabor permet une représentation mixte de la fonction à étudier. Pour se faire, à la différence d'une transformée de Fourier classique, l'analyse fréquentielle est réalisée en convoluant la fonction étudiée par une fenêtre temporelle :

$$W(\lambda, b) = \int_{-\text{inf}}^{\text{inf}} f(t)w(t-b)e^{-2i\pi\lambda t} dt \quad (3.39)$$

On obtient ainsi un ensemble de coefficients dépendant de deux paramètres : la fréquence λ et la position de la fenêtre d'analyse b . dans l'équation précédente, f est le signal à analyser, w la fenêtre utilisée pour l'analyse.

Pour réaliser cette analyse Gabor définit la fenêtre portant son nom :

$$w(t) = \pi^{-1/4}e^{-t^2/2} \quad (3.40)$$

en définissant $w_{\lambda b}$ de la manière suivante

$$w_{\lambda b}(t) = w(t-b)e^{-2i\pi\lambda t} \quad (3.41)$$

On peut complètement reconstruire le signal initial f :

$$f(t) = \int W(\lambda, b)w_{\lambda b}(t)d\lambda db \quad (3.42)$$

Contrairement à l'analyse de Fourier, l'analyse par Gaborette présente l'avantage de décrire le signal de manière mixte en temps et en fréquence. La moyenne non nulle de telles fonctions ne répond pas aux limites exposées ci-dessus pour décrire des fonctions qui prennent des valeurs nulles sur un large domaine. La taille fixe de la fenêtre d'analyse ne permet pas une optimisation du nombre de paramètres pour décrire une fonction irrégulière prenant des valeurs sur plusieurs ordres de grandeur. C'est dans ce but qu'a été développée l'analyse par ondelette.

3.3.3 Transformée en ondelettes

Les ondelettes sont des fonctions oscillantes de moyenne nulle qui prennent des valeurs significatives sur un intervalle de taille finie. La famille qui servira à la décomposition est générée à partir d'une ondelette mère $\psi(x)$ via des opérations de translation et de dilatation :

$$\psi_{a,b}(x) = \frac{1}{\sqrt{a}}\psi\left(\frac{x-b}{a}\right) \quad (3.43)$$

où $a \in \mathbf{R}^{+*}$ est le paramètre de dilatation et $b \in \mathbf{R}$ celui de translation.

La famille de fonctions définies par $\Psi(x)$ constitue une base de l'espace de Hilbert $L^2(\mathbf{R})$. Il existe différentes sortes d'ondelettes, analytiques et non-analytiques. On peut trouver une bonne introduction à cette théorie avec des nombreux exemples dans la Ref. [78]. A titre d'exemple l'ondelette dite "chapeau mexicain", est représentée sur la Fig. 3.1.

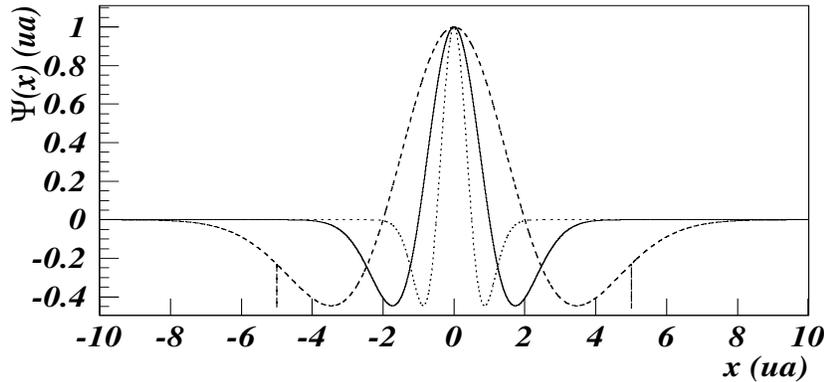


FIG. 3.1 – Ondelette "chapeau mexicain" avec sa dilatation et sa contraction.

La transformée en ondelettes est la décomposition de la fonction initiale sur la base des fonctions obtenues par les opérations de dilatation et de translation précédentes. Les coefficients $D_{a,b}$ de cette décomposition sont obtenus par le produit scalaire de f par la famille $\psi_{a,b}$:

$$D_{a,b} = \int_{-\text{inf}}^{\text{inf}} f(x)\overline{\psi_{a,b}(x)}dx = \langle f, \Psi_{a,b} \rangle \quad (3.44)$$

où $\overline{\Psi_{a,b}}$ est le complexe conjugué de la fonction $\Psi_{a,b}$. La transformée en ondelettes d'une fonction représente alors la projection de la fonction analysée sur

la base d'ondelettes. A partir d'elle on peut reconstruire exactement le signal du départ, à condition de connaître tous les coefficients.

Des exemples d'une base d'ondelettes du type Φ_j et $\Psi_{i,j}$ sont illustrés sur la Fig. (3.2).

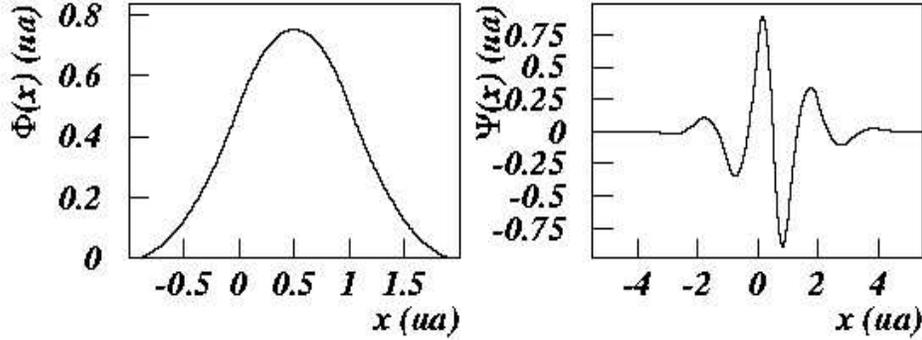


FIG. 3.2 – Base d'ondelettes B-splines.

A gauche est représentée la fonction d'échelle Φ_j . Elle est non oscillante tandis que l'ondelette Ψ_j , à droite, est de norme nulle. Dans ce cas particulier, les ondelettes utilisées sont les fonctions B-splines (splines biorthogonales) [90] de support compact, symétriques et orthogonales.

L'analyse multirésolution est particulièrement intéressante dans le cas où le signal étudié présente des comportements multiples à différentes échelles. Dans ce cas ce type d'analyse permet de générer une hiérarchie d'approximations successives de la fonction, selon la résolution avec laquelle on souhaite étudier le signal.

L'ondelette mère prenant des valeurs significatives sur un intervalle fini, chacune des fonctions de la famille $\psi_{a,b}(x)$ prennent à leur tour des valeurs significatives sur un intervalle fini. Si bien que cette analyse se fait de manière localisée, tout comme l'analyse en Gabor. Les ondelettes étant de moyenne nulle, l'intégrale (3.44) prend des valeurs importantes pour une fonction irrégulière et s'annule pour une fonction parfaitement régulière. Ce qui permettra de traiter des fonctions constantes ou nulles sur un intervalle important dans le plan temps-fréquence avec un nombre minimum de paramètres, ce qui représente une optimisation importante

par rapport à l'analyse de Fourier.

On peut vérifier que l'on a bien une décomposition mixte en temps et en fréquence. il suffit de considérer la transformée de Fourier des ondelettes :

$$\widehat{\psi}_{ab}(\omega) = \sqrt{a}\widehat{\psi}(a\omega)\widehat{f}(\omega)e^{-ib\omega} \quad (3.45)$$

L'identité de Parseval, établit une seconde expression pour les coefficients $D_{a,b}$ en fonction des transformées de Fourier, des ondelettes et de la fonction à analyser. Ces coefficients sont donc établis aussi bien à partir de l'espace temps, que de l'espace fréquence. L'intervalle où les ondelettes prennent des valeurs significatives reste fini dans le plan fréquence. On a donc une analyse mixte et localisée en temps et en fréquence. Ceci diffère d'une analyse de Fourier. Le coefficient b permet un parcours du signal en temps, alors que le paramètre a modifie la plage de fréquence sur laquelle porte l'analyse.

$$D_{a,b} = \sqrt{a} \int \widehat{\psi}(a\omega)\widehat{f}(\omega)e^{-ib\omega} d\omega \quad (3.46)$$

Sous réserve que l'ondelette ψ satisfait à la condition d'admissibilité suivante :

$$D_\psi = \int_{-\text{inf}}^{\text{inf}} \frac{|\widehat{\psi}(\omega)|^2}{|\omega|} d\omega < \text{inf} \quad (3.47)$$

La fonction initiale f peut être reconstruite complètement à partir des coefficients $D_{a,b}$:

$$f(x) = \frac{1}{D_\psi} \int_0^{\text{inf}} \int_{-\text{inf}}^{\text{inf}} D_{a,b}\psi_{a,b}(x) \frac{dadb}{a^2} \quad (3.48)$$

Si l'ondelette satisfait la condition d'admissibilité, on peut reconstruire la fonction analysée de façon exacte à partir des coefficients de la décomposition. Ce traitement permet d'effectuer une analyse position-échelle : le paramètre de translation offre la possibilité de parcourir l'ensemble de la fonction, alors que le paramètre de dilatation permet de modifier la fréquence de l'ondelette analysante : plus le paramètre de dilatation est petit, plus on va pouvoir analyser les détails de la variation de la fonction étudiée, comme si l'on pouvait regarder la fonction à différentes échelles.

3.3.4 Transformée en ondelette discrète

La transformée en ondelette continue est coûteuse en temps de calcul et entraîne une redondance de l'information. Il n'est en effet pas nécessaire de calculer tous

les coefficients pour reproduire la fonction analysée. On peut en restreindre le nombre en plaçant les ondelettes analysantes sur une grille discrète dans le plan temps-fréquence.

La transformée en ondelette continue, corrige beaucoup de limites de l'analyse de Fourier, mais ne permet pas une optimisation du nombre de coefficients conservés lors de la décomposition : l'information est redondante. On peut limiter le nombre de coefficients, tout en donnant une description complète de la fonction initiale en utilisant une transformée en ondelettes discrète. C'est-à-dire que l'on ne considère plus a et b comme des paramètres continus, mais qu'ils sont limités aux valeurs discrètes suivantes :

$$a = a_0^j b = k b_0 a_0^j \quad (3.49)$$

où a_0 et b_0 sont des constantes et j et k des entiers. Le choix d'une grille dyadique consiste à prendre $a_0 = 2$ et $b_0 = 1$. On peut alors sous certaines conditions ([79]) reconstruire la fonction analysée avec un terme d'erreur négligeable.

L'analyse multirésolution d'une fonction f consiste en une hiérarchie d'approximations successives f_j , qui rendent compte de la structure de la fonction analysée aux différentes échelles considérées [78]. On traduit cela mathématiquement par une suite de sous espaces emboîtés de $L^2(R)$:

$$\dots V_2 \subset V_1 \subset V_0 \subset V_{-1} \subset V_{-2} \dots \quad (3.50)$$

vérifiant un certain nombre de propriétés ([79]). Chaque espace correspond à une échelle, ou niveau d'approximation. Le sous-espace V_0 possède une base orthonormée $(\phi_{0,k})_{k \in \mathbb{Z}}$ générée par translation d'une fonction ϕ_0 selon $\phi_{0,k} = \phi_0(x - k)$. L'ensemble des fonctions $\phi_{j,k}$ définies par :

$$\phi_{j,k}(x) = 2^{-j/2} \phi_0(2^{(-j)} x - k) \quad (3.51)$$

constitue alors une base orthonormée de V_j . On appelle fonctions d'échelle les $\phi_{j,k}$. Ces fonctions sont générées de la même manière que les ondelettes à partir d'une fonction mère (en utilisant une grille dyadique). Cependant, contrairement aux ondelettes, elles ne sont pas de moyenne nulle. L'approximation au niveau j d'une fonction f sera donnée par sa projection sur V_j .

Lorsqu'on effectue deux approximations successives de la fonction f , on a une perte d'information entre les espaces V_{j-1} et V_j . On définit alors W_j comme étant le complémentaire de V_j dans V_{j-1} :

$$V_{j-1} = V_j \oplus W_j. \quad (3.52)$$

discretisation

$$g_{n,m}(x) = a_0^{-m/2} \psi(a_0^{-m} x - nb_0) \quad , \text{ with } m,n \in \mathbb{Z}$$

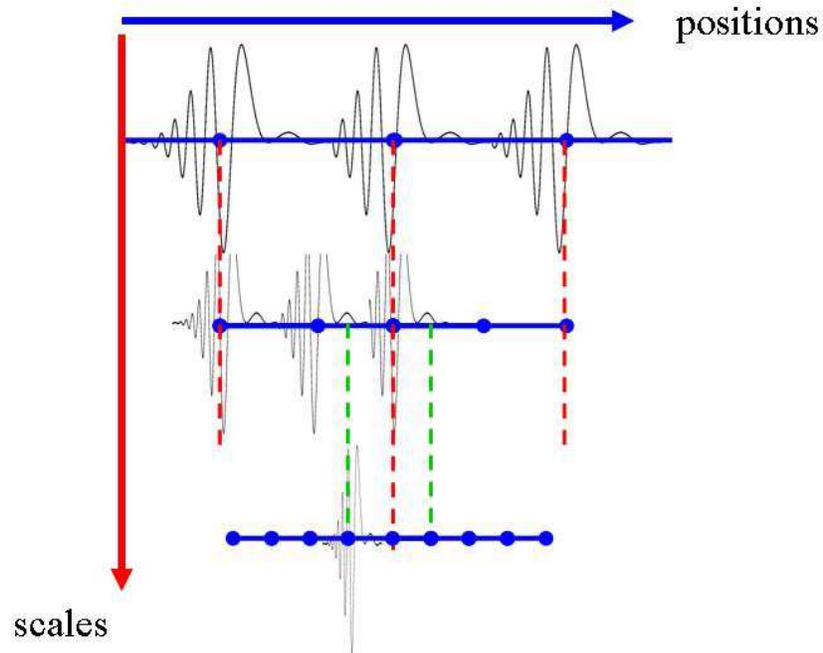


FIG. 3.3 – Illustration d’une grille de décomposition par transformée discrète en ondelettes .

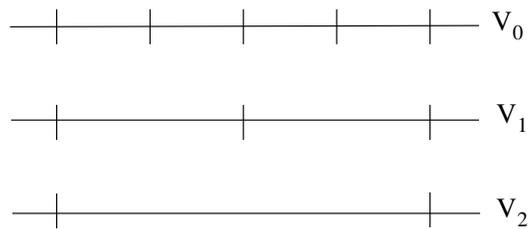


FIG. 3.4 – Disposition des centroïdes des ondelettes dans le plan (a, b) pour une grille dyadique.

W_j est appelé espace de détail : il contient l'information perdue lors du passage entre deux approximations successives. Il existe une fonction ψ_0 telle que l'ensemble des $\psi_{0,k} = \psi_0(x - k)_{k \in \mathbb{Z}}$ soit une base orthonormée de W_0 . ψ_0 est une ondelette. La famille générée par :

$$\psi_{j,k}(x) = 2^{-j/2} \psi_0(2^{(-j)}x - k) \quad (3.53)$$

constitue alors une base orthonormée de W_j .

L'approximation f_{j-1} de la fonction f pourra se décomposer à une résolution plus faible de la façon suivante :

$$f_{j-1} = f_j + \sum_k D_{j,k} \psi_{j,k} = \sum_k C_{j,k} \phi_{j,k} + \sum_k D_{j,k} \psi_{j,k} \quad (3.54)$$

où les $C_{j,k}$ et $D_{j,k}$ sont respectivement les coefficients de projection de f sur $\phi_{j,k}$ et $\psi_{j,k}$. Un moyen de calcul rapide de la décomposition est donné par l'algorithme de Mallat ([81]) qui permet de déterminer les $C_{j,k}$ et $D_{j,k}$ à partir des $C_{j-1,k}$. Un algorithme équivalent permet de recomposer la fonction à ces différentes échelles.

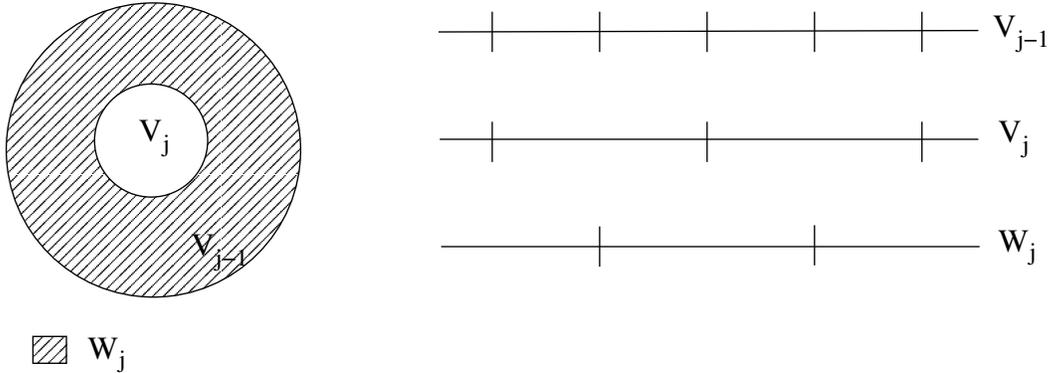


FIG. 3.5 – Représentation schématique des espaces d'approximation (V) et de détails (W) : $V_{j-1} = V_j \oplus W_j$.

L'analyse en ondelette a été appliquée au cas d'un système de fermions dans un potentiel harmonique à une dimension ([79]). Les fonctions d'ondes sont alors analytiquement connues, ce qui permet de tester l'efficacité de l'analyse. La démarche consiste à décomposer les fonctions d'onde sur une base d'ondelettes (dans ce cas précis, une base d'ondelettes splines ([75],[76]) a été utilisée). La fonction d'onde est représentée par un ensemble de coefficients associés aux fonctions de base. On cherche alors la procédure qui permettra de minimiser le nombre de coefficients

nécessaires pour décrire de façon optimale les fonctions analysées.

L'algorithme de Mallat mentionné dans la partie précédente a été appliqué aux fonctions d'onde correspondant aux premiers niveaux de l'oscillateur harmonique. La figure 3.6 représente les résultats obtenus pour la fonction associée au niveau $n = 7$. En haut à gauche, on a représenté la solution analytique (f_1). Chaque ligne correspond à un niveau d'approximation, la colonne du milieu et celle de droite donnent respectivement les coefficients d'échelle et d'ondelettes. Le nombre de coefficients diminue d'un facteur deux lorsqu'on passe d'un niveau d'approximation à l'autre. Les coefficients d'échelle sont proportionnels à la valeur moyenne locale de la fonction analysée, l'intervalle de moyennage dépendant du niveau de résolution. Plus celui-ci diminue, plus les fonctions d'échelle sont étalées et plus l'intervalle de moyennage est grand. Les coefficients correspondant aux parties rapidement oscillantes de la fonction analysée (partie centrale) prennent alors une valeur faible. Par contre, les coefficients correspondant à la partie périphérique, moins oscillante, conserve une valeur non négligeable. à l'opposé, les ondelettes étant de moyenne nulle, les coefficients qui leur sont associés sont d'autant plus importants que la fonction analysée comporte des oscillations de fréquence similaire à l'ondelette analysante. C'est donc dans la partie centrale que les coefficients sont les plus élevés et cela d'autant plus que les fréquences des ondelettes sont proches de celles des oscillations centrales. On peut ainsi voir que l'efficacité de ce type d'analyse réside dans la complémentarité entre ondelettes et fonctions d'échelle. La description sera optimale (du point de vue de la minimisation du nombre de coefficients nécessaires pour une reconstruction correcte) si le recouvrement entre les fonctions de base et le signal à analyser est maximal. On voit alors les limites d'une application directe de l'analyse multirésolution : le positionnement et l'extension (c'est-à-dire la fréquence) des ondelettes et fonctions d'échelle sont fixés par le réseau initial (choix d'une grille dyadique) ce qui ne permet pas d'assurer un recouvrement maximal. On va donc adopter une méthode plus souple : l'analyse adaptative.

On peut montrer [91] qu'en appliquant le critère de maximisation de l'entropie de Shannon :

$$S = - \sum p_i \ln(p_i) \quad p_i = |c_i|^2$$

où $\{c_i\}$ est l'ensemble des coefficients, le nombre d'éléments utilisés dans la reconstruction du signal, à chaque niveau de résolution, est minimum. La représentation du signal résultant est ainsi très compacte, car l'essentiel de l'information est uniquement concentrée dans un ensemble de coefficients correspondant à un nombre minimum d'éléments de base, en conséquence le traitement numérique est optimisé.

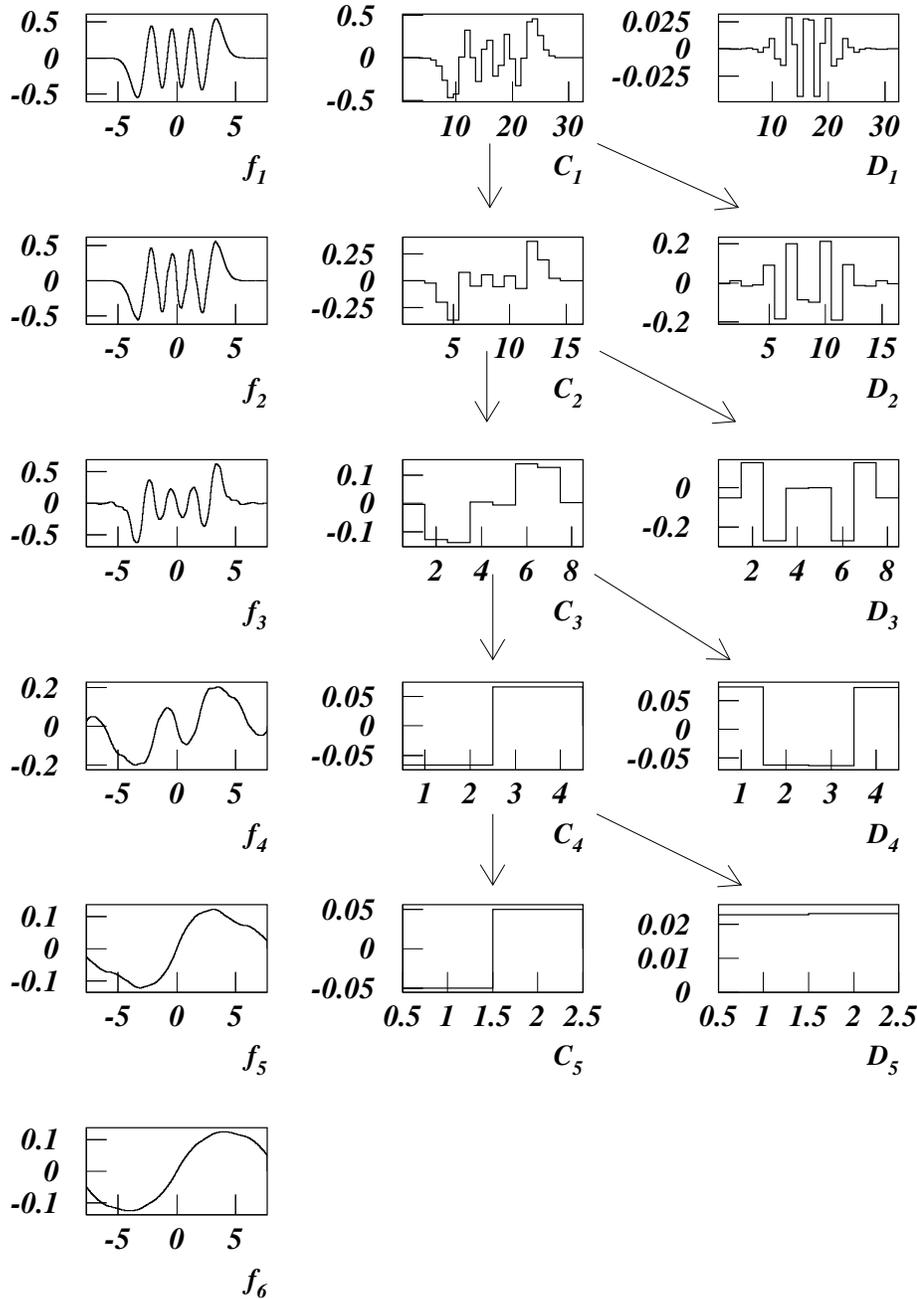


FIG. 3.6 – Analyse multirésolution de la fonction d’onde associée au niveau $n=7$ de l’oscillateur harmonique. Chaque ligne correspond à un niveau d’approximation. La colonne de droite présente les coefficients d’ondelettes, celle du centre les coefficients d’échelle et celle de gauche les approximations de la fonction aux différentes échelles.

Le principe consiste à ajuster le réseau de décomposition afin de maximiser le recouvrement entre les fonctions de base et le signal. Rappelons le principe de construction du réseau : à un niveau j , les fonctions de base sont distantes de $b_0 a_0^j$, leur extension étant $a = a_0^j$. On va donc jouer sur les paramètres a_0 et b_0 de façon à ce que d'une part, les ondelettes soient positionnées au niveau des oscillations quantiques et les fonctions d'échelles au niveau des lobes semiclassiques, et d'autre part que leur extension leur permettent d'épouser aux mieux les formes analysées. La figure 3.7 représente le traitement de la fonction d'onde du niveau $n = 7$ de l'oscillateur harmonique selon cette méthode. La partie supérieure de la figure représente en trait plein la fonction d'onde exacte et en pointillé l'approximation obtenue par l'analyse adaptative. La partie inférieure de la figure représente les fonctions de base. Les fonctions d'échelles sont ajustées en position et en extension de façon à coïncider avec les lobes semi-classiques. De la même manière, on fait coïncider les 3 ondelettes avec les oscillations quantiques de la partie centrale. On peut ainsi aboutir à une reconstruction correcte avec seulement 5 coefficients.

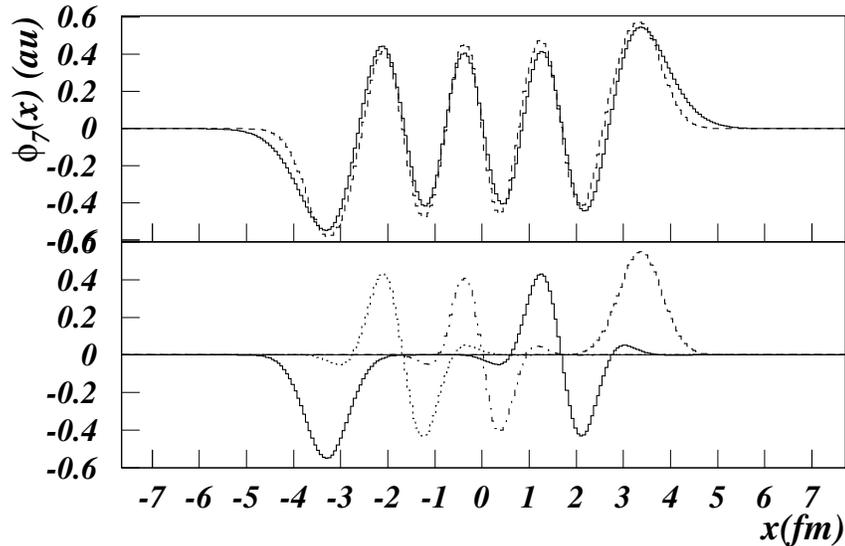


FIG. 3.7 – Analyse adaptative de la fonction d'onde associée au niveau $n=7$ de l'oscillateur harmonique. Sur la partie supérieure de la figure la fonction exacte est donnée en trait plein et son approximation en pointillé. La partie inférieure représente les fonctions de base (deux fonctions d'échelle et trois ondelettes).

3.4 Etats cohérents généralisés

Puisque l'un des objectifs du modèle DYWAN est de traiter la dynamique de systèmes nucléaires dans une représentation en ondelettes, les propriétés dynamiques vont pouvoir être commodément incorporées en utilisant leur filiation au formalisme de la théorie des groupes. Les ondelettes peuvent être considérées comme appartenant à l'ensemble des états cohérents généralisés dans le cadre de la théorie de Gilmore-Perelomov.

La dynamique d'un système est imposée par son Hamiltonien qui en général, pour des systèmes complexes, nécessite d'être exprimé en terme d'un ensemble donné d'observables. Au travers d'un schéma adapté d'approximations, ces opérateurs définissent un groupe dynamique G qui génère l'algèbre associée.

L'optimisation de l'analyse en ondelettes dépend du choix de la méthode d'analyse et de la famille d'ondelettes. Un choix approprié de la base d'ondelettes doit respecter les propriétés fondamentales des fonctions analysées. En général, des bases arbitraires d'ondelettes ne satisfont pas simultanément les principales propriétés des fonctions d'onde à N-corps. Au contraire, les ondelettes splines à support compact, vérifient à la fois les conditions de bi-orthogonalité et de symétrie. De plus, même si ces fonctions ne peuvent pas être exprimées analytiquement, elles peuvent être approximées de façon extrêmement précise par des fonctions analytiques.

Dans la plupart des modèles de transport développés dans le contexte nucléaire, les fonctions de distribution sont exprimées en terme de distribution de Dirac et plus récemment en terme de fonctions gaussiennes. Les fonctions splines offrent l'opportunité de faire un lien avec ces modèles. En effet, parmi les familles d'ondelettes nous avons favorisé les bases de fonction splines [90] qui soit sont à support compact soit respectent les symétries des fonctions d'onde à une particule analysées, qui de plus peuvent être approximées avec une grande précision par des combinaisons linéaires de fonctions analytiques. En effet pour des raisons d'interprétation physique et de commodité, les ondelettes sont décomposées en composantes progressives et régressives par transformée de Hilbert. Ces ondelettes progressives sont des états cohérents généralisés qui peuvent être approximés de façon excellente par des états cohérents généralisés de Gabor comme ceci est souligné dans [95]. Ces états cohérents sont des fonctions à valeurs complexes.

Il a été mentionné dans la section précédente que la base d'ondelettes retenue était une base de B-spline ([75],[76]). Ces fonctions sont bien adaptées à l'étude de systèmes quantiques puisqu'elles ont la propriété de donner une représentation

exacte des fonctions d'onde monoparticulaires. Les fonctions d'échelle, reproduisant la norme des pics semi-classiques, seront des B-splines d'ordre 1, alors que la partie oscillante de la fonction d'onde sera représentée par des B-splines d'ordre 3. Les fonctions d'échelle (B-spline d'ordre 1) sont d'enveloppe gaussienne et bien adaptées aux techniques usuelles de simulation des équations de transport. Les états cohérents (décrits dans le paragraphe suivant) présentent le même type de comportement. Les ondelettes splines vont donc être décomposées en une somme de deux états cohérents progressifs. Cette technique permet d'exprimer les fonctions d'échelles et les ondelettes sur une même base d'états cohérents et donc d'optimiser le traitement de la simulation.

Les états cohérents canoniques, cas particuliers d'états cohérents généralisés, sont des états quantiques définis pour un potentiel harmonique, solutions de l'équation de Schrödinger, dont les positions et impulsions moyennes sont celles qu'aurait un système classique soumis au même potentiel ([77]). Ils sont obtenus en appliquant un opérateur de déplacement ([79]) à l'état fondamental de l'oscillateur harmonique. Ces états minimisent la relation d'incertitude de Heisenberg :

$$\phi\chi = \frac{\hbar^2}{4}, \quad (3.55)$$

où χ et ϕ sont les seconds moments en position et impulsion de l'état cohérent ¹. Ces seconds moments restent figés au cours du temps, le second moment de couplage impulsion-position σ^2 restant nul.

On peut aussi construire des états cohérents généralisés ([79]) qui vont conserver le terme suivant à sa valeur minimale :

$$\delta = \chi\phi - \sigma^2 = \frac{\hbar^2}{4}. \quad (3.56)$$

Contrairement au cas des états cohérents canoniques, les seconds moments en position et impulsion (χ et ϕ) évoluent au cours du temps et sont corrélés ($\sigma \neq 0$). Ces états sont à enveloppe gaussienne, leur formulation dans l'espace des configurations étant donnée par :

$$\langle x | g_{cs} \rangle = \left(\frac{1}{\pi\hbar|\alpha_2|^2} \right)^{1/4} e^{-\frac{1}{2\hbar}\frac{\alpha_1}{\alpha_2}(x-\langle x \rangle)^2} e^{\frac{i}{\hbar}\langle p \rangle(x-\langle x \rangle)}. \quad (3.57)$$

Ils forment une base surcomplète de l'espace de Hilbert.

¹En notant $|cs\rangle$, l'état cohérent on a $\chi = \langle cs | (x - \langle x \rangle)^2 | cs \rangle$, $\phi = \langle cs | (p - \langle p \rangle)^2 | cs \rangle$.
² $\sigma = \frac{1}{2} \langle cs | [x - \langle x \rangle, p - \langle p \rangle]_+ | cs \rangle$

Les états cohérents peuvent aussi être abordés sous l'angle de la théorie des groupes. Les ondelettes peuvent être considérées comme des cas particuliers d'états cohérents. Ces considérations permettent de souligner le lien existant entre la description d'un système en terme d'ondelettes et les propriétés dynamiques de ce système. L'utilisation d'états cohérents comme base de décomposition permettra d'obtenir une expression simple pour l'équation d'évolution du système.

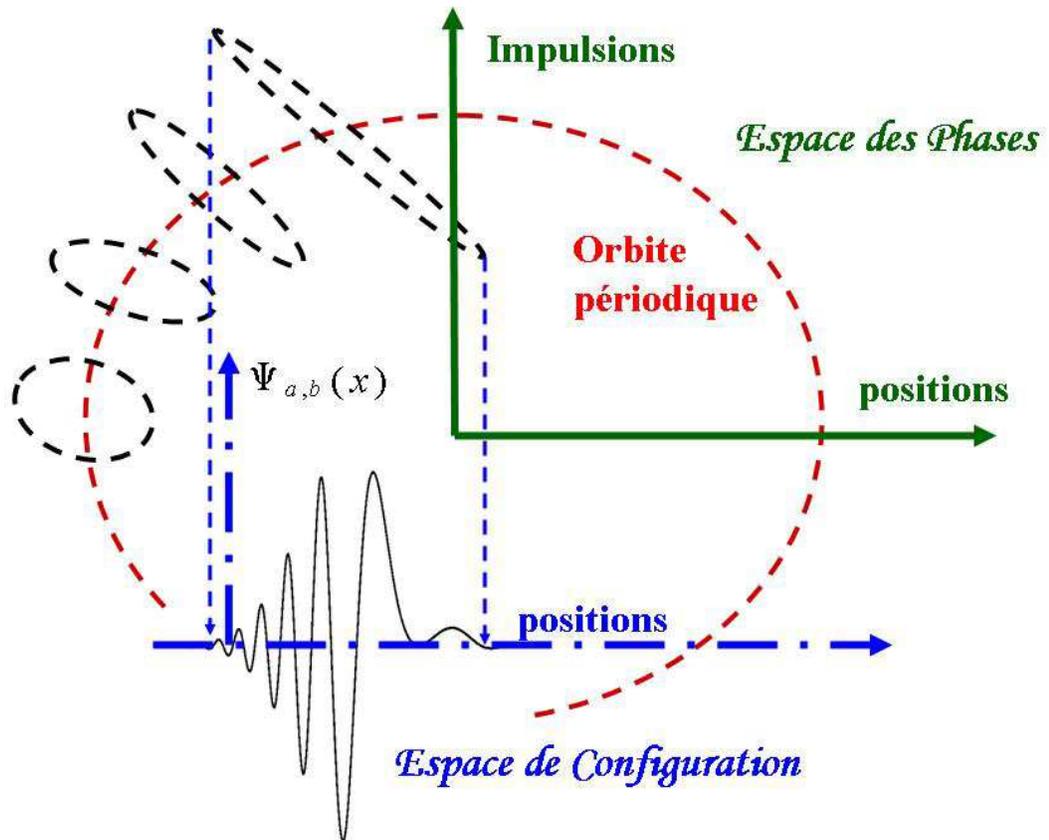


FIG. 3.8 – Représentation dans l'espace de configuration et dans l'espace des phases d'un état cohérent approximation analytique d'une ondelette spline de décomposition.

3.5 Le Modèle Dywan appliqué à la matière d'étoile

3.5.1 Présentation

Nous allons présenter ici quelques généralités à propos du modèle Dywan tel qu'il a été conçu pour les collisions d'ions lourds et les étoiles à neutrons. Ce modèle de simulation est basé sur la résolution des équations TDHF telles qu'elles sont décrites au début de ce chapitre. Pour ce faire on distingue deux grandes phases dans une simulation : une première phase dite statique permettant de calculer les conditions initiales et une seconde phase dite dynamique qui à partir des conditions initiales détermine l'évolution temporelle du système étudié.

3.5.2 Conditions initiales

Le point de départ de la description dynamique nucléaire est la préparation de l'état initial des noyaux. Soit l'espace Hilbert \mathcal{H} des états à un corps correspondant à un système de N nucléons en interaction. Dans le cadre d'une description en champ moyen pur, l'état fondamental d'un noyau quelconque est donné en termes de la matrice densité à un corps ρ , solution de l'équation de Hartree-Fock indépendante du temps :

$$[\mathbf{h}(\rho), \rho] = 0 \quad (3.58)$$

Soit $\{|\varphi^\lambda \rangle\}$ un ensemble de fonctions d'onde de particules indépendantes de \mathcal{H} , à température nulle ρ s'exprime :

$$\rho = \sum_{\lambda=0}^N |\varphi^\lambda \rangle \langle \varphi^\lambda| \quad (3.59)$$

Une analyse multirésolution de l'ensemble de fonctions d'onde $\{\varphi^\lambda\}$ en terme d'une base d'ondelettes adaptée, représentée par les fonctions ψ_j^λ , permet d'écrire :

$$\rho = \sum_{\lambda=0}^N \sum_{i,j} \beta_{i,j}^\lambda |\psi_i^\lambda \rangle \langle \psi_j^\lambda| \quad (3.60)$$

où on définit $\beta_{i,j}^\lambda = c_i^{\lambda*} c_j^\lambda$, et $c_i^\lambda = \langle \psi_i^\lambda | \varphi^\lambda \rangle$.

Par simplicité, dans l'expression ci-dessus les deux types de fonctions définies précédemment comme Ψ (ondelettes) et ϕ (fonctions d'échelle) n'ont pas été discernées, mais appelées ψ de façon unifiée.

Une étude des contributions diagonales et non diagonales à la matrice ρ a été réalisé [69] dans le cas simplifié d'un système de fermions dans un puits de potentiel harmonique. Dans cette étude on a invoqué les propriétés fondamentales : orthogonalité, support compact, symétrie et premiers moments nuls, de la base d'ondelettes utilisée, les B-splines, pour analyser le comportement des différentes contributions à ρ . On a pu constater ainsi que l'information reste essentiellement concentrée en un nombre réduit de coefficients $\beta_{i,j}$ se trouvant essentiellement sur la partie diagonale de la représentation en ondelettes. Les composantes non diagonales sont hautement oscillantes et la contribution nette est, comparativement, très faible.

La matrice densité construite avec les états des huit premiers niveaux d'un oscillateur harmonique isotrope est reproduite sur la Fig. 3.9 dans la représentation \vec{r} . La Figure (a) correspond à la matrice exacte (3.59), la Figure (b) est la décomposition en ondelettes en considérant tous les termes d'interférences de (3.60), et la Figure (c) correspond à l'approximation qui ne tient compte que les contributions diagonales.

Les auteurs de la Réf. [90] ont montré que les ondelettes et les fonctions d'échelle splines s'expriment comme combinaison linéaire d'états cohérents généralisés [95]. Compte tenu de cette propriété, nous avons utilisé par la suite la base d'ondelettes de Gabor [96], cas particulier d'états cohérents généralisés. Il s'agit de fonctions orthogonales, symétriques de décroissance exponentielle et de représentation analytique simple. Dans l'espace des configurations à une dimension, ils prennent la forme suivante :

$$\langle x|\alpha \rangle = \left(\frac{1}{\pi\hbar|\alpha_2|^2} \right)^{1/4} e^{-\frac{1}{2\hbar}\frac{\alpha_1}{\alpha_2}(x-\langle x \rangle)^2} e^{\frac{i}{\hbar}\langle p \rangle(x-\langle x \rangle)} \quad (3.61)$$

où les paramètres α_1 et α_2 sont reliés aux premiers et seconds moments de $\alpha(x)$ par les expressions suivantes :

$$\langle x \rangle = \sqrt{2\hbar} \Re(\beta\alpha_2^*) \quad (3.62)$$

$$\langle p \rangle = \sqrt{2\hbar} \Im(\beta\alpha_1^*) \quad (3.63)$$

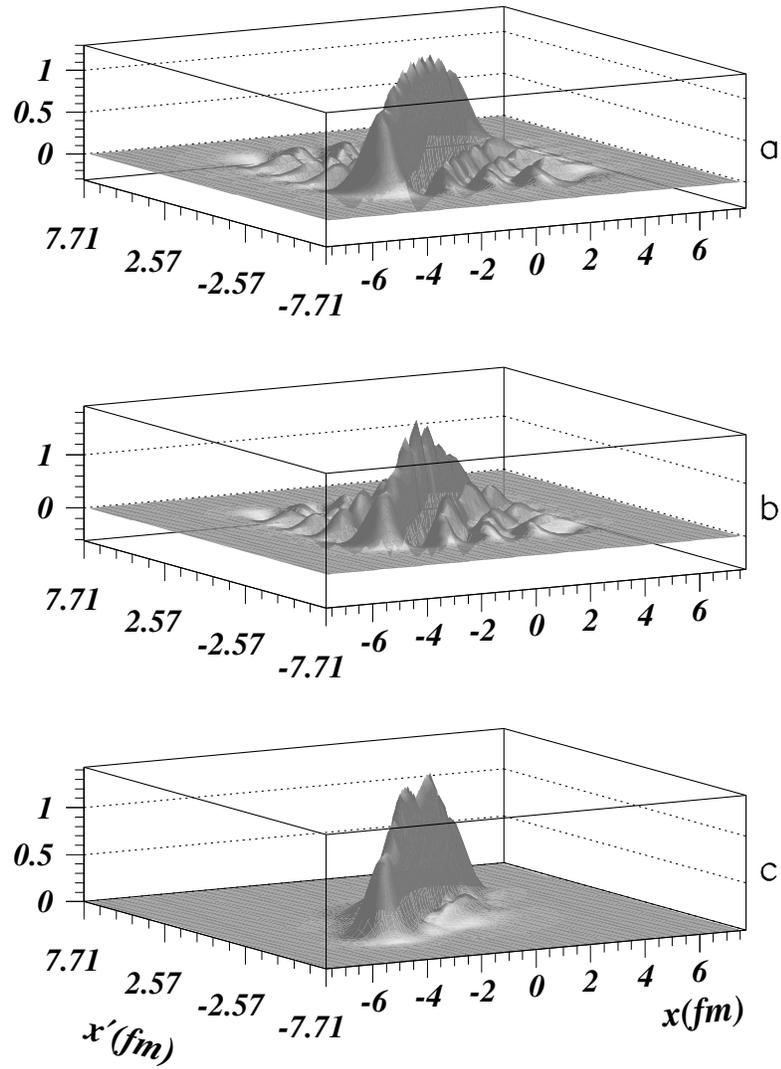


FIG. 3.9 – Approximations de la matrice densité $\rho(x, x')$ pour un système de fermions dans un puits harmonique : (a) matrice exacte, (b) décomposition en ondelettes complète, (c) approximation diagonale de la décomposition.

$$\chi = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \frac{\hbar}{2} |\alpha_2|^2 \quad (3.64)$$

$$\phi = \langle (p - \langle p \rangle)^2 \rangle = \frac{\hbar}{2} |\alpha_1|^2 \quad (3.65)$$

$$\sigma = \langle [(x - \langle x \rangle), (p - \langle p \rangle)]_+ \rangle = -\frac{\hbar}{2} \Im(\alpha_1 \alpha_2^*) \quad (3.66)$$

où $[A, B]_+$ représente l'anticommutateur des opérateurs A et B .
Les états cohérents généralisés vérifient la condition de conservation de la corrélation :

$$\Delta = \chi\phi - \sigma^2 = \frac{\hbar^2}{4}$$

Par transformée de Hilbert toute ondelette spline ψ_i , peut être décomposée en deux états cohérents de Gabor l'un progressif et l'autre régressif α_i et α'_i tels que :

$$\psi_i(x) = \alpha(x) + \alpha'(x)$$

Soit $\{\alpha_i\}$ l'ensemble des ondelettes de Gabor, dans le calcul de l'Hamiltonien Hartree-Fock, de fonctionnelles de densité, une excellente description de la matrice densité du système sera donnée par la suite en terme d'une reconstruction quasi diagonale, de la forme :

$$\rho \simeq \sum_{\lambda=0}^N \sum_i \beta_i^\lambda |\alpha_i^\lambda \rangle \langle \alpha_i^\lambda| \quad (3.67)$$

L'objectif est de parvenir à une description de l'état fondamental de noyaux en terme d'ondelettes. La recherche de l'état fondamental dans DYWAN se fait, conformément au traitement usuel du modèle de Hartree-Fock, par un processus itératif auto-cohérent sur réseau pour la détermination de l'énergie minimum du noyau, en tenant compte des contraintes typiques à l'équilibre.

Une première estimation des niveaux de particules indépendantes $\{\epsilon_\lambda\}$ et des fonctions d'onde correspondantes $\{\varphi^\lambda\}$ est obtenue en faisant une approximation harmonique du potentiel auto-cohérent, dont le point de départ est un potentiel extérieur. Le pas suivant est la décomposition de ces fonctions d'onde en termes

d'ondelettes $\{\alpha_i^\lambda\}$. Le processus est amorcé en effectuant pour commencer une approximation harmonique globale du potentiel, à partir duquel par analyse adaptative il peut être construit une base optimale de décomposition associée aux niveaux d'énergie et à leurs fonctions d'onde. La décomposition en ondelettes de la fonction d'onde associée à un niveau d'énergie peut alors être effectuée par un processus itératif. La matrice densité à un corps ρ est construite selon le schéma de reconstruction proposé. En cohérence, cette densité est utilisée pour générer le potentiel auto-cohérent, avec lequel on calcule ensuite les nouveaux niveaux d'énergie ϵ_λ et les nouvelles fonctions d'onde. Cette procédure se répète jusqu'à obtenir la convergence de la valeur de l'énergie du niveau de Fermi E_F .

On aboutit ainsi à une description des fonctions d'onde à un corps du système et donc à sa densité. Le potentiel engendré est alors calculé en utilisant l'interaction effective de Zamick (le calcul du potentiel se fait sur réseau). On réitère alors la décomposition en ondelettes du système à partir de ce nouveau potentiel. Le critère de convergence du processus consiste à évaluer la stabilité du niveau de Fermi entre deux itérations successives. On utilise comme potentiel de départ un potentiel de type Woods-Saxon. A l'issue de ce processus, chaque fonction d'onde monoparticulaire du système est décrite par un ensemble de fonctions de base spline décomposées en états cohérents généralisés. Cette procédure se répète jusqu'à obtenir la convergence de la valeur de l'énergie du niveau de Fermi E_F .

3.5.3 Equations d'évolution

Nous avons vu que l'évolution de la matrice densité à un corps sous l'effet du champ moyen est donnée par :

$$i\hbar \frac{d}{dt} \rho = [\mathbf{h}(\rho), \rho] \quad (3.68)$$

La décomposition des fonctions d'onde à un corps du système sur une base d'états cohérents permet, en utilisant un principe variationnel de transposer cette équation en un ensemble d'équations différentielles régissant l'évolution des caractéristiques des états cohérents. Pour un potentiel local, on a pour chaque ondelette (état cohérent), $\langle p \rangle$ l'impulsion moyenne, $\langle q \rangle$ la position moyenne, χ la variance en position et σ le second moment de couplage impulsion-position.

Un traitement classique de l'équation (3.68) consiste à appliquer un principe variationnel basé sur la stationnarité de l'intégrale d'action :

$$\mathcal{S} = \int dt \langle \Psi | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \mathbf{H} | \Psi \rangle$$

où $\langle \Psi | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \mathbf{H} | \Psi \rangle$ est le Lagrangien et $|\Psi \rangle$ est la fonction d'onde complète à N corps. L'hypothèse fondamentale que nous faisons est que $|\Psi \rangle$ est un déterminant de Slater de fonctions d'onde de particule indépendante $|\varphi_n \rangle$ et \mathbf{H} un Hamiltonien à N corps dans lequel le potentiel est remplacé par une interaction effective V^{HF} dépendante de la densité.

Le modèle DYWAN propose pour $|\Psi \rangle$ une fonction d'essai basée sur la décomposition en ondelettes des fonctions $|\varphi_n \rangle$. Autrement dit, la matrice densité à un corps est construite selon l'équation (3.67) suivant la technique de décomposition proposée

$$|\psi_\lambda \rangle (t) = \sum_i c_i^\lambda |\alpha_i^\lambda \rangle (t) \quad (3.69)$$

De la condition de stationnarité de l'action on obtient les équations suivantes :

$$\dot{\xi} = \frac{\pi}{m} + \frac{\partial}{\partial \pi} \mathcal{V} \quad (3.70)$$

$$\dot{\pi} = -\frac{\partial}{\partial \xi} \mathcal{V} \quad (3.71)$$

$$\dot{\chi} = \frac{4\gamma\chi}{m} - \frac{\partial \mathcal{V}}{\partial \gamma} \quad (3.72)$$

$$\dot{\gamma} = \frac{\hbar^2}{8m\chi^2} - \frac{2\gamma^2}{m} - \frac{\partial}{\partial \chi} \mathcal{V} \quad (3.73)$$

avec des équations analogues sur les autres coordonnées de l'espace des phases. Dans les équations (3.72) et (3.73) la quantité γ est :

$$\gamma = \sigma/2\chi$$

et \mathcal{V} est la transformée en ondelette du potentiel Hartre-Fock :

$$\mathcal{V} = \langle \alpha | V^{HF} | \alpha \rangle \quad (3.74)$$

En champ moyen pur l'évolution du système est alors donnée par la composition des mouvements des centroïdes ($\langle \vec{r} \rangle$, $\langle \vec{p} \rangle$) et des largeurs ($\langle \vec{\chi} \rangle$,

$\langle \vec{\phi} \rangle$) dans l'espace des phases. On rappelle que les largeurs jouent un rôle important notamment dans la description de la surface et qu'elles sont déterminées par la décomposition initiale et par les équations d'évolution (3.72) .

Au cours de l'évolution ([79]), la relation $\chi\phi - \sigma^2 = \frac{1}{4}$ est conservée. L'orthogonalité entre les ondelettes est aussi préservée. Sous l'effet du champ moyen, les états cohérents suivent des trajectoires dans l'espace des phases. Ils s'orientent de façon à être tangents à la trajectoire de leurs centroïdes. L'extension en position augmente lorsque les états s'approchent du centre de la distribution et diminue à la périphérie. Le potentiel présent dans les équations d'évolution correspond en théorie au champ moyen résultant des interactions nucléon-nucléon. Le calcul de ce champ moyen est cependant extrêmement difficile. En pratique, on va donc avoir recours à des interactions effectives.

La figure 3.10 représente la projection sur le plan (k_x, x) des trajectoires de trois états cohérents appartenant à des niveaux d'énergie différents d'un noyau de Calcium. Initialement, le système se trouve légèrement excité dans un état proche de son état fondamental. Des oscillations de forme vont se manifester au cours du temps à cause de la légère excitation initiale. Le potentiel suit ces oscillations, en conséquence les trajectoires dans l'espace des phases sont modifiées. Ces modifications sont d'autant plus importantes que l'on considère des niveaux d'énergie supérieurs, où les oscillations acquièrent une plus grande ampleur.

Les largeurs sur la direction x , pour les mêmes niveaux, sont représentées sur la figure 3.11. Elles évoluent toujours de manière oscillante en conservant une amplitude maximale relativement régulière au cours du temps. Une bonne stabilité numérique est requise pour traiter leurs équations d'évolution, qui sont très sensibles à la méthode d'intégration choisie. L'orthogonalité des états est bien conservée au cours du temps.

Les effets dissipatifs peuvent être investigués par différentes méthodes, dont celles de projection , de réduction et de troncation de la hierarchie BBGKY, qui conduisent à l'équation :

$$\dot{\rho}(1, t) = -\frac{i}{\hbar} \mathbf{L}^{HF}(\rho) \rho(1, t) + \mathbf{K}(\rho) \quad (3.75)$$

L'intégrale des collisions, dans le cas Markovien ([73]), dans sa version diagonale constitue la généralisation quantique du terme des collisions de Boltzmann. Il présente une structure classique du type "gain-moins-perte" caractéristique d'une évolution irréversible :

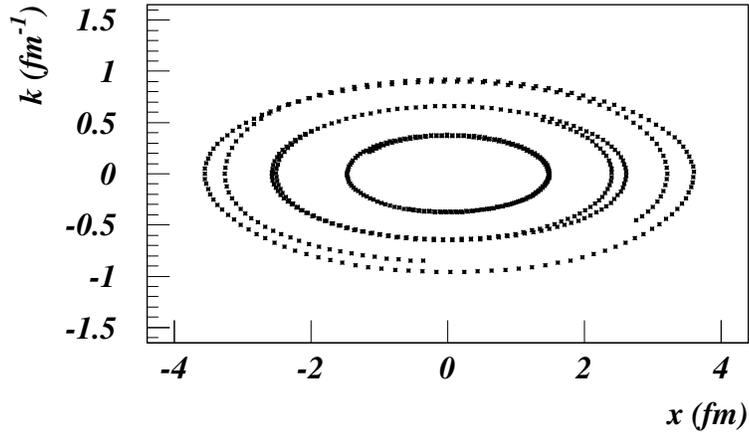


FIG. 3.10 – Trois trajectoires dans le plan (x, k_x) de l'espace des phases, correspondant aux niveaux d'énergie d'un système de nucléons dans un potentiel nucléaire.

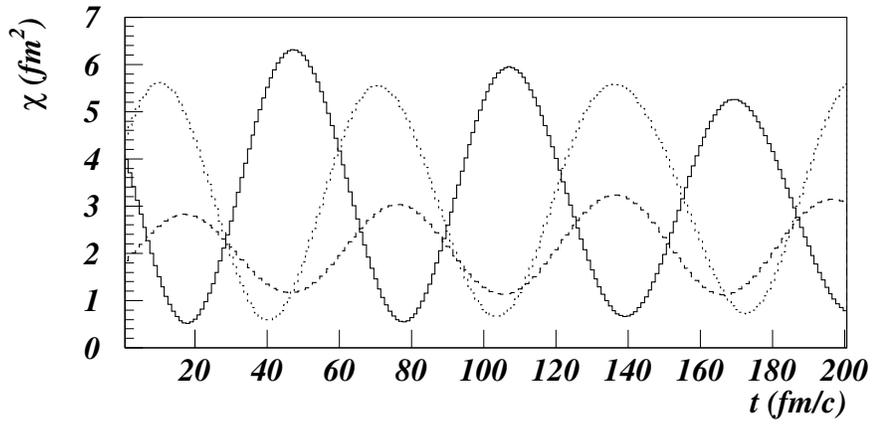


FIG. 3.11 – Evolution des largeurs en position suivant trois directions orthogonales pour un état cohérent sous l'action d'un potentiel nucléaire.

$$K_\alpha = \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} W_{\alpha\beta\gamma\delta} \{ \rho_\gamma \rho_\delta (1 - \rho_\alpha)(1 - \rho_\beta) - \rho_\alpha \rho_\beta (1 - \rho_\gamma)(1 - \rho_\delta) \} \quad (3.76)$$

Dans cette équation $W_{\alpha\beta\gamma\delta}$ est la probabilité de transition définie par :

$$W_{\alpha\beta\gamma\delta} \propto |V_{\alpha\beta\gamma\delta}^A|^2 \times \delta(\varepsilon_\alpha + \varepsilon_\beta - \varepsilon_\gamma - \varepsilon_\delta) \quad (3.77)$$

pour des processus à deux corps, du type $(\alpha\beta) \rightarrow (\gamma\delta)$:

Ces processus conservent l'énergie. Les termes $V_{\alpha\beta\gamma\delta}^A$ sont les éléments de matrice du potentiel nu antisymétrisé et les quantités ε_α sont les énergies individuelles.

Conformément à l'approche ETDHF [92] l'action du terme de collision peut se traduire en terme d'équation maîtresse des taux d'occupation des niveaux d'énergie :

$$\dot{\rho}_\mu = \sum_{\kappa\nu\lambda} W_{\mu\kappa\nu\lambda} [\bar{\rho}_\mu \bar{\rho}_\kappa \rho_\nu \rho_\lambda - \rho_\mu \rho_\kappa \bar{\rho}_\nu \bar{\rho}_\lambda] \quad (3.78)$$

dans laquelle les éléments $\bar{\rho}$ sont les facteurs de Pauli $(1 - \rho)$.

Dans cette partie, nous allons voir comment le terme de collision peut lui aussi être exprimé en terme d'ondelettes. L'état fondamental du noyau avant collision est construit à partir d'un ensemble de fonctions d'onde à un corps $|\phi^\lambda \rangle$, chacune étant décomposée en ondelettes :

$$|\phi^\lambda \rangle = \sum_{i \in I_\lambda} \omega_i^\lambda |\alpha_i^\lambda \rangle, \quad (3.79)$$

I_λ désignant l'ensemble des indices des ondelettes décrivant l'état λ . Dans l'état initial les taux d'occupation des fonctions d'onde participant à l'état fondamental sont tous égaux à un :

$$\sum_{i \in I_\lambda} |c_i^\lambda|^2 = \sum_{i \in I_\lambda} \omega_i^\lambda = 1 \quad (3.80)$$

La matrice densité diagonale, correspondant à un mélange statistique d'états, peut s'exprimer dans la base choisie de la façon suivante :

$$\rho = \sum_{\lambda} n_{\lambda} |\phi^{\lambda}\rangle \langle \phi^{\lambda}| = \sum_{\lambda, i} n_i^{\lambda} |\alpha_i^{\lambda}\rangle \langle \alpha_i^{\lambda}| \quad (3.81)$$

où les coefficients n_i^{λ} sont les poids de chaque état de la base, ils vérifient la condition de normalisation

$$\sum_i n_i^{\lambda} = \sum_i n_{\lambda} |c_i^{\lambda}|^2 = n_{\lambda} \quad (3.82)$$

Le schéma de discrétisation proposé est en cohérence avec la structure de la description du champ moyen [69].

Le taux d'occupation de l'état μ est alors :

$$n^{\mu} = \sum_{i \in I_{\mu}} \omega_i^{\mu} \theta(i) \quad (3.83)$$

où $\theta(i) = 1$ si l'ondelette α_i^{μ} participe toujours à la description de cet état, $\theta(i) = 0$ sinon, les ω_i^{μ} désignent toujours les poids des ondelettes dans l'état initial.

Le terme de collision (voir l'équation 3.38) va permettre de dépeupler les états du fondamental au profit d'états excités. Les taux d'occupation n_{λ} vont alors varier entre 0 et 1. Cette variation des taux d'occupation est normalement continue. Cependant, le recours à une méthode de discrétisation Monte-Carlo est nécessaire pour résoudre en pratique l'équation maîtresse. Dans ce cadre, la variation du taux d'occupation d'un état va être modélisée par la variation du nombre global d'ondelettes participant à la description du système .

L'équation maîtresse se reformule donc de la façon suivante (en n'écrivant que le terme de perte) :

$$\frac{dn^{\mu}}{dt} = \sum_{iklm} W(iklm) \omega_i^{\mu} \theta(i) \omega_k^{\kappa} \theta(k) \omega_l^{\nu} (1 - \theta(l)) \omega_m^{\lambda} (1 - \theta(m)) \quad (3.84)$$

où κ , ν et λ sont les niveaux d'énergie à la description desquels participent respectivement les ondelettes ω_k^{κ} , ω_l^{ν} , et ω_m^{λ} . Pour simuler la probabilité de transition W , on va considérer que la densité a un comportement local analogue à celui observé pour un système homogène et infini : les fonctions d'onde sont alors des ondes planes ([84]). On a alors de nouveau recours à des forces effectives pour

traiter l'interaction entre nucléons. En ne considérant que des collisions élastiques on a :

$$W(iklm) = \frac{\hbar^3 g}{4\pi^3 m^2} \delta(\epsilon_\mu + \epsilon_\kappa - \epsilon_\nu - \epsilon_\lambda) \delta(\vec{k}_\mu + \vec{k}_\kappa - \vec{k}_\nu - \vec{k}_\lambda) \frac{d\sigma}{d\Omega}(k, k') \quad (3.85)$$

avec $\vec{k} = \frac{1}{2}(\vec{k}_\mu - \vec{k}_\kappa)$ et $\vec{k}' = \frac{1}{2}(\vec{k}_\nu - \vec{k}_\lambda)$, g est la dégénérescence en spin et isospin de la matière fermionique.

Le traitement exact de l'équation (3.84), qui impliquerait une quadruple sommation prenant en compte l'ensemble des couples d'états accessibles en sortie, n'est pas envisageable. On va donc employer une simulation Monte-Carlo. Les sommations relatives aux indices i et k sont effectuées selon une méthode d'échantillonnage simple à variable aléatoire de densité uniforme. La section efficace de diffusion est alors pondérée par le poids des ondelettes. Les sommations sur l et m sont effectuées par une méthode d'échantillonnage pondérée à variable aléatoire de densité de probabilité non uniforme définie à partir de la probabilité d'occupation $\omega_l'(1 - \theta(l))$.

Nous avons vu que dans un cadre statistique, la fonction d'onde à N corps du système pouvait s'écrire comme un mélange statistique de déterminants de Slater $|\Phi^N\rangle$ de fonctions d'onde à un corps, $|\Phi^N\rangle = |\phi_{\lambda_1}\rangle \wedge \dots \wedge |\phi_{\lambda_N}\rangle$ (où le symbole \wedge symbolise le produit antisymétrisé). Chacune des fonctions d'onde à un corps est décomposée sur une base d'ondelettes :

$$|\phi^{\lambda_j}\rangle = \sum_{i \in I_{\lambda_j}} \omega_i^{\lambda_j} |\alpha_i^{\lambda_j}\rangle, \quad (3.86)$$

Du fait de l'orthonormalité des ondelettes, les déterminants de Slater de fonctions d'onde peuvent s'écrire comme une combinaison linéaire de déterminants de Slater d'ondelettes :

$$|\Phi^N\rangle = \sum_M b_M |\theta_M\rangle, \quad (3.87)$$

avec :

$$|\theta_M\rangle = |\alpha_{i_1}^{\lambda_1}\rangle \wedge \dots \wedge |\alpha_{i_N}^{\lambda_N}\rangle, \quad (3.88)$$

M représentant un ensemble donné d'indice i_1, \dots, i_N . La fonction d'onde à N corps du système s'écrit alors :

$$|\Psi^N\rangle = \sum_K a_K(t) |\Phi_K^N\rangle = \sum_K a_K(t) \sum_{M_K} b_{M_K} |\theta_{M_K}\rangle. \quad (3.89)$$

La matrice densité à N corps est donnée par $\rho^N(t) = |\Psi^N \rangle \langle \Psi^N|$. Si on se place dans l'approximation des phases aléatoires, les termes non diagonaux de ρ^N sont suffisamment oscillants pour que la somme de leur contribution globale à la matrice densité soit négligeable devant la contribution des termes diagonaux. La matrice densité s'écrit alors :

$$\rho^N(t) = \sum_K |a_K(t)|^2 |\Phi_K^{(N)} \rangle \langle \Phi_K^{(N)}| = \sum_K |a_K(t)|^2 \sum_{M_K} b_{M_K}^2 |\Theta_{M_K} \rangle \langle \Theta_{M_K}|. \quad (3.90)$$

La matrice densité à N corps la moins biaisée est celle qui maximise l'entropie. Il s'agit ici d'un système microcanonique, l'entropie sera donc maximale si l'on choisit un poids statistique a_K identique pour tous les déterminants de Slater d'ondelettes.

La matrice densité à N corps apparaît donc comme un mélange statistique de déterminants de Slater d'ondelettes. Dans les conditions initiales, ces déterminants de Slater sont construits à partir des ondelettes décrivant les niveaux d'énergie les plus bas du système. Au cours de la dynamique, les ondelettes effectuent des transitions entre niveaux d'énergie et permettent ainsi le peuplement et le dépeuplement des déterminants de Slater.

Rappelons que chaque nucléon du système est décrit initialement par un ensemble d'ondelettes qui sont ensuite propagées par les équations d'évolution. L'écriture de la matrice densité en terme de déterminants de Slater d'ondelettes indique que l'on peut représenter chaque nucléon par l'une des ondelettes qui le décrit potentiellement d'après la décomposition initiale des fonctions d'ondes. Chaque déterminant de Slater correspond à un choix d'un ensemble d'ondelettes parmi toutes celles qui décrivent le système. Dans cet ensemble, chaque ondelette représente un nucléon. Chaque déterminant de Slater correspond donc à une fluctuation du système.

La prise en compte de toutes les combinaisons possibles d'ondelettes dans l'équation (3.90) serait complexe. On a donc recours à une méthode de Monte-Carlo pour traiter cette équation. L'objectif est de sélectionner un sous-ensemble représentatif de déterminants de Slater d'ondelettes. La méthode utilisée consiste à choisir de manière aléatoire une ondelette dans chaque ensemble d'ondelettes participant à la construction d'un même niveau d'énergie dans les conditions initiales. De cette façon le coefficient b_{M_K} dans l'équation (3.90) est identique pour tous les déterminants de Slater qui ont donc tous le même poids.

3.6 Interaction nucléaire : Interaction de Zamick généralisée

Nous avons vu dans la section précédente, que les conditions initiales sont calculées en résolvant l'équation de Schrödinger stationnaire :

$$h|\varphi_n \rangle = \epsilon_n|\varphi_n \rangle \quad (3.91)$$

Quant à l'évolution temporelle elle satisfait à l'équation de Schrodinger dépendante du temps :

$$-i\frac{\partial|\Psi_N \rangle}{\partial t} = H|\Psi_N \rangle \quad (3.92)$$

Ces équations sont résolues par une méthode HF (resp. ETDHF) pour la détermination des conditions initiales (resp. de l'évolution temporelle). Ces méthodes nécessitent la détermination d'un Hamiltonien de Hartree-Fock, qui prend la forme :

$$h = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V^{HF}$$

. Pour le champ auto-cohérent V^{HF} , une interaction effective de type Skyrme (Interaction de Zamick [52]) a été choisie :

$$V_q^{HF}(\rho, \xi) = \frac{t_0}{\rho_\infty} \rho + \frac{t_3}{\rho_\infty^{\nu+1}} \rho^{\nu+1} + \frac{c}{\rho_\infty^2} \xi^2 + \frac{4qc}{\rho_\infty^2} \rho \xi + \quad (3.93)$$

$$\frac{\Omega}{3\rho_\infty^2} \xi^2 + \frac{4q\Omega}{3\rho_\infty^2} (\rho - \rho_\infty) \xi + V_q^C$$

avec :

$$\rho = \rho_n + \rho_p$$

$$\xi = \rho_n - \rho_p$$

où ρ_n et ρ_p représentent les densités locales de neutrons et de protons avec $q=1/2$ pour les neutrons et $-1/2$ pour les protons. Enfin $\rho_\infty = 0.145 fm^{-3}$ est la densité de saturation de la matière nucléaire.

Dans l'équation (3.93), V_q^C est le potentiel de Coulomb associé au proton. Pour les conditions initiales il est obtenu par une approximation d'ondelette Haar. En revanche, pour l'évolution temporelle, les conditions périodiques et la longue portée de l'interaction coulombienne nécessitent un traitement spécifique. C'est l'objet de la section 4.2.

Il est important de noter que l'expression du champ "self consistent" dans l'équation (3.93) diffère de la littérature. Appelons t_0 , t_3 , x_0 et x_3 les paramètres usuellement employés dans la littérature [60]. Nous avons les relations suivantes :

$$\begin{aligned} t'_0 &= \frac{3\rho_{\text{inf}}}{4} t_0 \\ t'_3 &= \frac{3(\nu+2)\rho_{\text{inf}}^{\nu+1}}{48} t_3 \\ x_0 &= x_3 = -1/2. \end{aligned}$$

Dans cette première version de la force effective utilisée nous ne tenons pas compte des termes spin-orbite, et des termes dépendants de l'impulsion. Les choix de cette interaction se sont basés sur la relativement bonne approximation des caractéristiques de la matière nucléaire (3.6.1) et sur la facilité à la mettre en oeuvre numériquement.

Dans le tableau (3.1) nous avons reporté les coefficients de la force pour deux valeurs différentes du module de compressibilité ($K_\infty = 200$ MeV et 380 MeV) pour les deux équations d'états (EOS) douce et dure. Les valeurs des paramètres c et

TAB. 3.1 – Paramètres de l'interaction locale de Zamick généralisée

	t_0/ρ_∞ (MeV fm ³)	$t_3/\rho_\infty^{\nu+1}$ (MeV fm ^{3(\nu+1)})	ν
Douce	-356	303	1/6
Dure	-123	70	1

Ω sont, pour la statique, fixée respectivement à 20MeV et -100MeV . Le choix de ces paramètres permet de bien reproduire les principales caractéristiques des noyaux telles que : le rayon, l'énergie de liaison, et la densité d'équilibre. Tout ceci en utilisant une force simplifiée.

Les caractéristiques exactes de l'EOS de la matière nucléaire restent incertains, tout particulièrement dans les domaine de densité étudiés dans nos travaux. Une étude systématique de l'influence de ces paramètres sur l'évolution temporelle est indispensable. Dans la suite de cette partie nous étudions l'EOS dérivé de la force effective employée dans le modèle DYWAN, et nous la comparons à celle trouvée dans la littérature. L'influence dynamique de cette EOS sera étudiée dans la section (5.3).

3.6.1 Propriété en matière nucléaire infinie

Nous montrons ici des résultats portant sur la matière nucléaire infinie à température nulle et calculée à l'aide du modèle DYWAN. Le comportement de cette

matière est complètement déterminé par l'interaction entre les nucléons la constituant. Cette interaction est caractérisée par l'équation (3.93). Il s'agit ici de montrer que la description de la matière nucléaire, à des densités proches de la saturation, donne des résultats réalistes.

Comme l'avancent les auteurs dans [58] [54], l'une des principales grandeurs physiques caractéristique est l'énergie par nucléon en matière neutronique pure. L'énergie par nucléon est définie par :

$$\omega = \frac{\varepsilon}{\rho} = \frac{\int V_q^{HF} d\rho}{\rho} + \omega_{kin}$$

où ω_{kin} correspond à la contribution cinétique. Avec V_q^{HF} donné par l'équation (3.93), l'énergie par nucléon ω prend alors la forme suivante :

$$\begin{aligned} \omega(\rho, \delta) &= \frac{t_0}{2\rho_\infty} \rho + \frac{t_3}{((\nu+1)\rho_\infty^{\nu+1})} \rho^{\nu+1} + \frac{c}{\rho_\infty^2} \delta^2 \rho^2 \\ &+ \frac{\Omega}{3\rho_\infty^2} (\rho - \rho_\infty) \rho \delta^2 + \omega_{kin} \end{aligned} \quad (3.94)$$

avec $\delta = (\rho_n - \rho_p)/\rho$

Le terme cinétique est calculé avec l'approximation de Thomas-Fermi à température nulle. Ce qui donne :

$$\omega_{kin} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{3}{5} (3\pi^2)^{2/3} \rho^{2/3} \left[\left(\frac{1-\delta}{2} \right)^{5/3} + \left(\frac{1+\delta}{2} \right)^{5/3} \right] \quad (3.95)$$

Sur la figure 3.12, l'énergie par nucléon en fonction de la densité ($\omega(\rho)$) en matière purement neutronique a été tracée pour différentes valeurs de la constante Ω . Ici c a été fixé à 20 MeV. Pour comparer, les résultats de Friedman et Pandharipande (triangle) [53] ont été tracés. Le choix de la constante $c = 20 \text{ MeV}$ a été réalisé de manière à retrouver l'énergie à la densité de saturation en matière symétrique des travaux réalisé par [53]. Un bon accord entre nos résultats et l'EOS de la matière purement neutronique de [53] peut être observé. Ce fait est extrêmement intéressant compte tenu de la simplicité de l'interaction utilisée.

Sur la figure 3.13 nous représentons les valeurs prises par $\omega(\rho, \delta)$ à température nulle et en matière nucléaire asymétrique, pour différentes fractions protoniques x . Les paramètres Ω et c ont été fixés respectivement, à -100 et 20 MeV. Dans notre approche, la dépendance en énergie de symétrie de l'EOS est réalisée phénoménologiquement, en respectant sa valeur à la densité de saturation en matière neutronique. Cette approche diffère des modèles [55] [56] [57] où de nombreuses

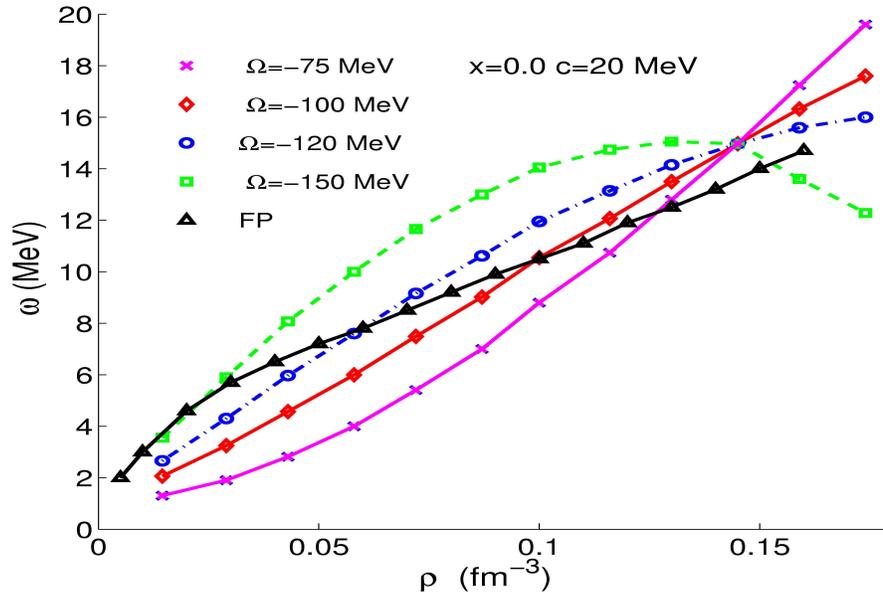


FIG. 3.12 – Densité énergétique par baryon dans la matière nucléaire froide comme fonction de la densité pour différentes valeurs du paramètre d'asymétrie Ω . Les triangles correspondent aux résultats de [53]

contraintes sont imposées : énergie par baryon, fraction protonique, et différentes quantités physiques et leur dérivées.

Il n'est pas question ici de réaliser une étude exhaustive des propriétés de la matière nucléaire à l'équilibre en utilisant cette EOS, mais d'utiliser une interaction effective reproduisant correctement ces propriétés, et facile à mettre en oeuvre numériquement.

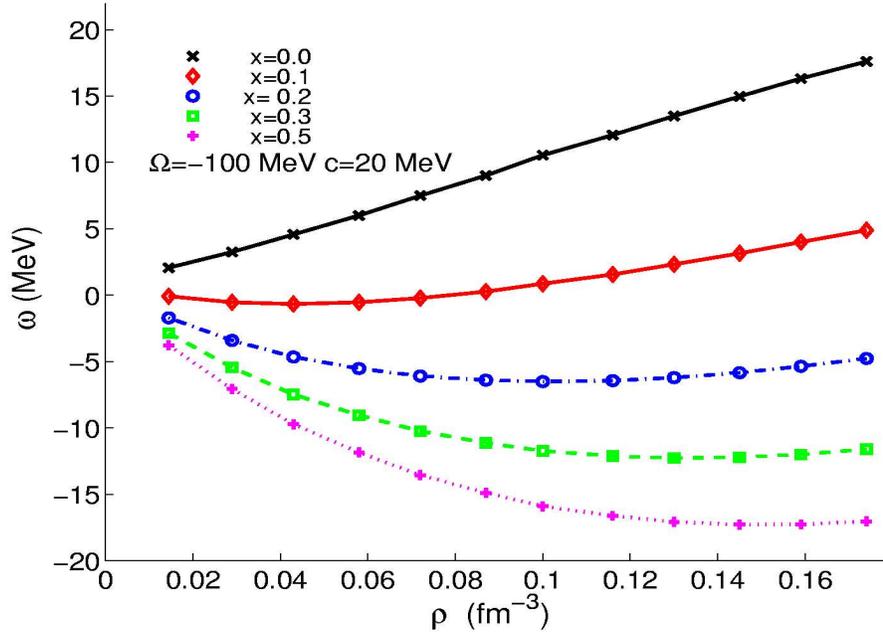


FIG. 3.13 – Densité énergétique par baryon dans la matière neutronique froide comme fonction de la densité à différentes fractions protoniques.

Le potentiel chimique des nucléons est une autre grandeur physique particulièrement intéressante. Elle est définie par :

$$\mu_i = \frac{\partial \varepsilon}{\partial \rho_i} \quad i = n, p.$$

Elle représente la variation d'énergie par la modification du nombre de constituants d'une espèce. Autrement dit, elle permet de décrire l'équilibre chimique entre les deux espèces (protons et neutrons) constituant la matière étudiée.

La figure 3.14 représente le potentiel chimique des protons dans la matière neutronique, en fonction de la densité de neutrons. Les calculs ont été réalisés pour

différents paramètres Ω . Les résultats sont faiblement dépendants du jeu de paramètres, et sont dans tous les cas en bon accord avec Friedman et al. [53]. Les résultats sont représentés par des losanges sur la figure 3.14.

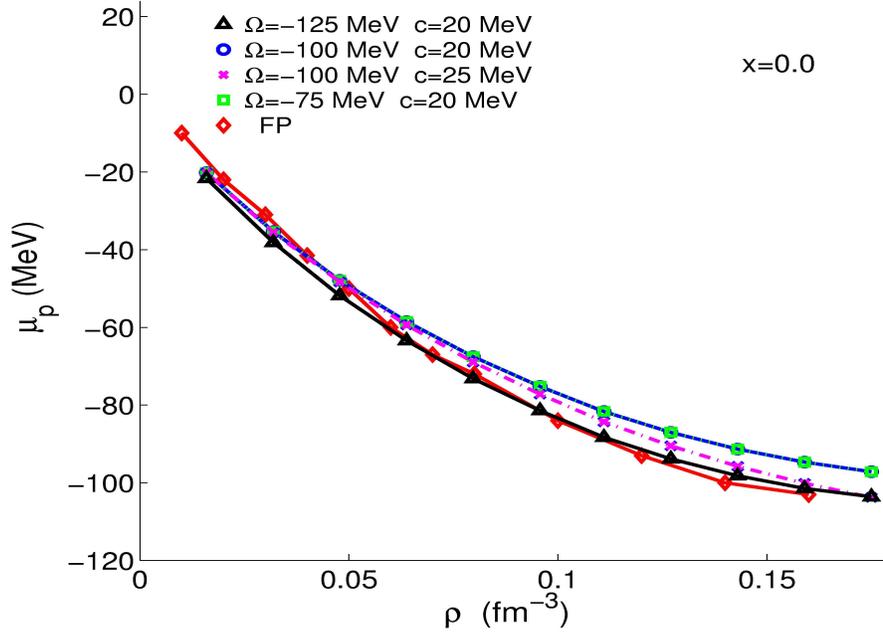


FIG. 3.14 – Potentiel chimique des protons dans la matière neutronique comme fonction de la densité de neutrons pour différentes EOS. Les résultats de [53] sont indiqués par des losanges.

Sur la figure (3.15), le potentiel chimique neutrons comme fonction de la densité de neutrons a été représenté. Ces calculs ont également été réalisés à température nulle et pour différentes valeurs de Ω , c restant fixe. Les résultats des références [53],[72], et [59] sont représentés respectivement par des losanges, carrés, et points. Les calculs réalisés avec l'EOS paramétrée par $\Omega = -100\text{MeV}$ sont proches de l'EOS de type Skyrme. Les deux autres valeurs de Ω montrent d'importantes différences à haute densité. Si l'on compare à l'EOS de référence ($\Omega = -100\text{MeV}$), les résultats pour $\Omega = -75\text{MeV}$ surestiment le potentiel chimique des neutrons, alors que ceux pour $\Omega = -125\text{MeV}$ le sous-estime. Cela affectera l'évolution temporelle comme nous les verrons dans le prochain chapitre.

Dans le modèle de la goutte liquide, l'énergie par baryon peut se développer

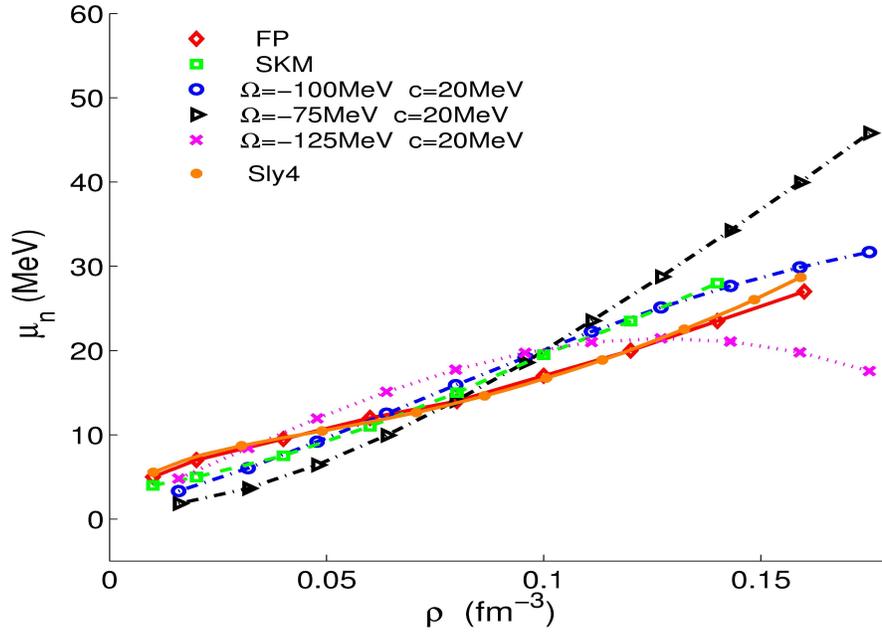


FIG. 3.15 – Potentiel chimique des neutrons dans la matière neutronique froide comme fonction de la densité de neutrons pour différentes équations d'états. Lo-sanges, carrés et points correspondent, respectivement, aux résultats des Références [53], [72] et [59].

proche de la densité de saturation, comme suit [58] :

$$\omega = \omega_0 + \frac{K_0}{18\rho_\infty^2}(\rho - \rho_\infty)^2 + [J + \frac{L}{3\rho_\infty}(\rho - \rho_\infty)]\delta^2 \quad (3.96)$$

où ω_0 et K_0 sont, respectivement l'énergie à la densité de saturation et le module d'incompressibilité de la matière nucléaire symétrique. Les coefficients J et L correspondent, respectivement, à l'énergie de symétrie et à la dépendance en densité de l'énergie de symétrie. Si ρ_∞ et les deux premiers coefficients sont bien déterminés par l'observation expérimentale, les deux derniers ont un large domaine d'incertitude. Dans le but de comparer aux autres modèles nous donnons les relations entre les différentes propriétés macroscopiques de la matière nucléaire et les paramètres que nous avons utilisés dans DYWAN. [71]

$$\omega_\delta = \frac{1}{2} \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{\partial^2 \omega}{\partial \delta^2} \quad (3.97)$$

$$J = \omega_\delta(\rho_\infty) \quad (3.98)$$

$$L = 3\rho \frac{\partial \omega_\delta}{\partial \rho} \Big|_{\rho=\rho_\infty} \quad (3.99)$$

$$K_{sym} = 9\rho^2 \frac{\partial^2 \omega_\delta}{\partial \rho^2} \Big|_{\rho=\rho_\infty} \quad (3.100)$$

où K_{sym} représente le module d'incompressibilité de la matière nucléaire asymétrique. Il est relié à K_0 par $K_0 = K_{sym}(\delta = 0)$, et peut lui aussi avoir un large domaine d'incertitude. Ces définitions donnent la relation suivante entre Ω , c et L :

$$L = 6c + \Omega + L_{kin} \quad (3.101)$$

Dans l'équation (3.101) L_{kin} est la contribution de la densité d'énergie cinétique à L . A partir de la figure 3.12 on observe que quand Ω augmente (ou L, également) l'énergie de la matière neutronique pure diminue à basse densité (phase gazeuse) et augmente à haute densité (phase liquide)). Ce comportement peut affecter les structures observées au cours des simulations, comme nous allons le voir dans la prochaine section. Dans la figure 3.16 nous avons tracé les valeurs de L et K_{sym} comme fonctions de J . Les carrés A,B et C sont les résultats du modèle DYWAN pour, respectivement, $\Omega = -75, -100$ and -120 MeV. Les autres symboles sont extraits de calculs de type Skyrme Hatree-Fock de l'article de l'auteur [71], et des références incluses.

Dans ce graphique les EOS A et B sont proches des modèles théoriques de référence tandis que la douce, C est trop basse pour les deux quantités. Nous rappelons que l'intérêt de cette interaction, est de reproduire correctement les propriétés de la matière nucléaire pour une implémentation numérique efficace.

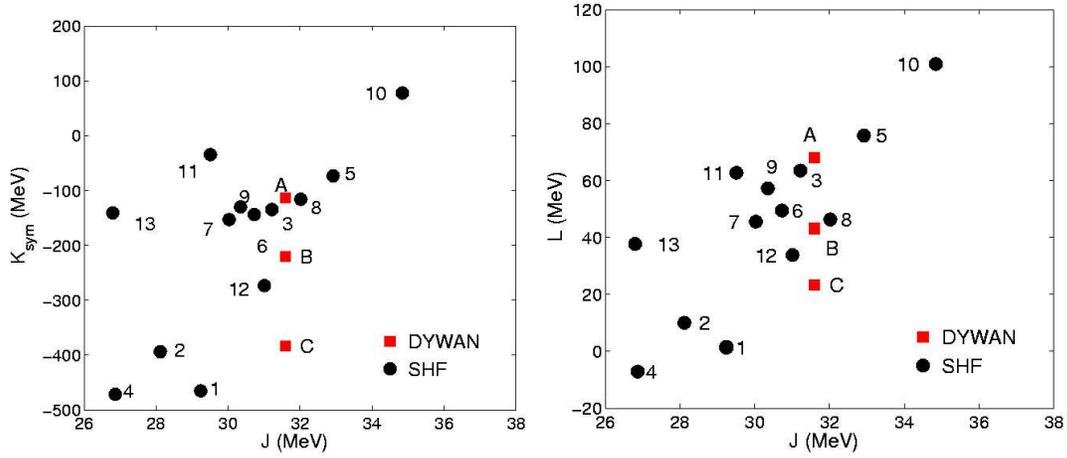


FIG. 3.16 – Correlations entre les différentes propriétés macroscopiques de la matière nucléaire asymétrique : K_{sym} vs J (à droite) et L vs J (à gauche). Les points représentent les calculs Skyrme Hartree-Fock (SHF) de Ref [71]. Les carrés représentent les résultats DYWAN pour $\Omega = -75$ MeV (A), -100 MeV (B) et -120 MeV (C). Les nombres dénotent les différents paramètres sélectionnés pour SHF : 1 pour SI, 2 pour SIII, 3 pour SIV, 4 pour SVI, 5 pour Skya, 6 pour SkM, 7 pour SkM*, 8 pour SLy4, 9 pour MSkA, 10 pour SkI3, 11 pour SkI4, 12 pour SkX, 13 pour SGII.

Chapitre 4

Interaction à longue portée et modélisation de la matière infinie

4.1 Modélisation de l'écorce d'une étoile à neutrons sous forme de matière infinie

Nous avons vu qu'en résolvant les équations de Hartree-Fock, on construit les états des conditions initiales pour un noyau isolé. Ces états solutions de l'équation TDHF évoluent dans le temps selon les équations précédemment établies (3.70-3.73). Nous allons voir ici comment se construit le réseau infini qui décrira la matière de l'écorce des étoiles à neutrons.

Les états à une particule d'un noyau, calculés dans les conditions initiales, sont placés dans une maille primitive. La maille primitive représente le volume élémentaire qui, par translation, permet de paver tout l'espace et de reconstruire le réseau et ses symétries. Il est important de noter la différence entre maille primitive et cellule de Wigner-Seitz, qui est le plus petit élément permettant de reconstruire le réseau, mais qui ne doit contenir qu'un unique noyau. C'est la forme de cette cellule qui permet de respecter les symétries. A contrario la maille primitive est généralement de forme cubique, mais peut contenir plusieurs noyaux (cf réseau cubique faces centrées, réseau cubique corps centré).

Le système à partir duquel l'évolution de la matière infinie est déterminée correspond à un volume plus large appelé super cellule. C'est au bord de celle-ci que seront appliquées les conditions périodiques, simulant la matière infinie. Sur la figure 4.1 est représenté un réseau cubique simple composé de nombreuses répliques. La cellule primitive en bleu (dans le cas du réseau cubique simple la cellule de Wigner Seitz est identique à la maille primitive) contient un unique motif de

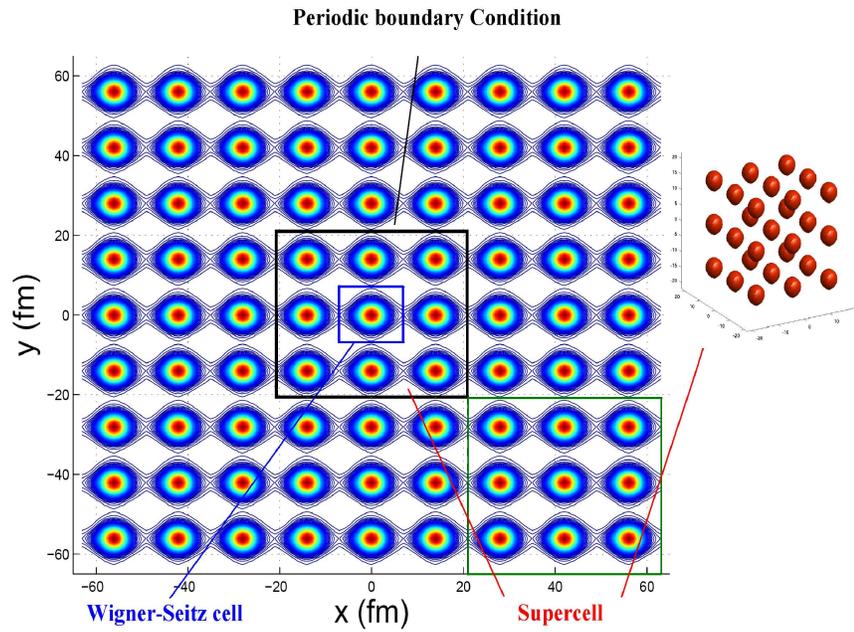


FIG. 4.1 – Profil de densité d'un réseau cristallin initial. La cellule de Wigner-Seitz et la supercellule sont représentées. C'est dans cette dernière que la matière peut se réorganiser librement. La matière infinie est simulée par des conditions périodiques au bords de la supercellule

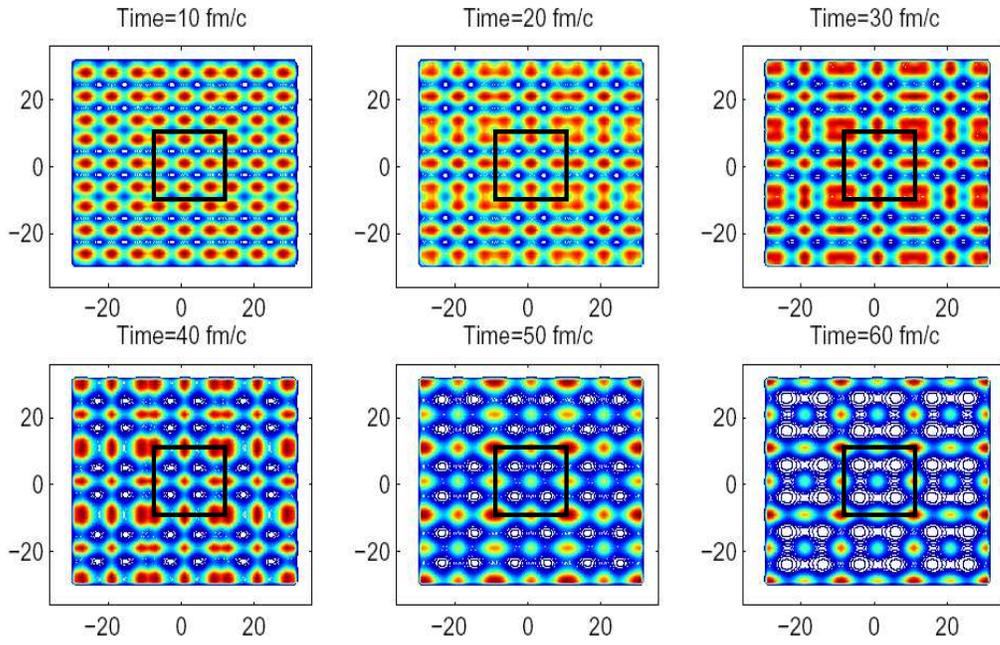


FIG. 4.2 – Evolution temporelle de la densité à 2 dimensions à partir d'un réseau cubique simple initial, dans lequel les positions des noyaux ont été légèrement déplacées par rapport à leur positions d'équilibre

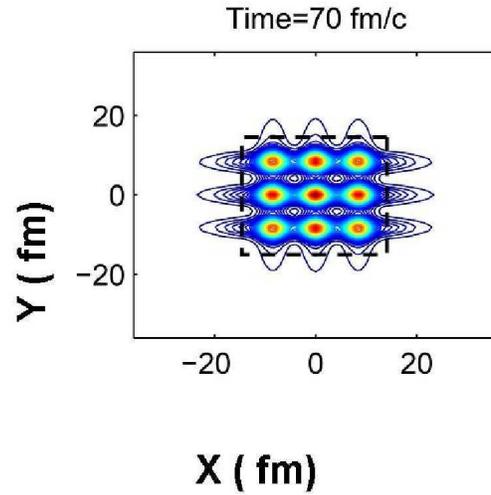


FIG. 4.3 – Représentation de l'étalement des fonctions d'ondes au dehors de la super-cellule

base (un seul noyau pour le réseau cubique simple). La super cellule en noir est composée de plusieurs répliques de la maille principale, c'est aux bornes de cette dernière que nous prenons en compte les conditions périodiques. La matière a la possibilité de complètement se réorganiser à l'intérieur de ce volume, sans aucune contrainte de symétrie. Sur la figure 4.2 est représentée l'évolution temporelle de la densité à deux dimensions d'un réseau composé de noyaux d'oxygène 16 ; celui-ci est légèrement perturbé dans ses conditions initiales. On observe alors une réorganisation de la structure même du réseau au sein de toute la super-cellule (en noir). L'objectif de cette figure est uniquement d'illustrer le fonctionnement du modèle. Mais au cours de la réorganisation on peut voir apparaître la formation de noyaux plus lourds, comme attendu dans l'écorce d'une étoile à neutrons. Il est important d'ajouter que ces conditions périodiques ne sont pas directement appliquées aux fonctions d'onde, mais que ces dernières ont la possibilité de s'étendre au-delà de la super cellule figure (4.3).

Les conditions périodiques sont appliquées lors du calcul des équations d'évolution dans le terme potentiel. En effet l'intégration spatiale se fait sur tout l'espace et n'est pas limitée au seul état d'une super cellule. L'expression du potentiel (4.1) fait apparaître une somme sur tous les états via $|\Psi\rangle$. Il serait donc plus correct d'écrire le potentiel de la manière suivante :

$$\langle \Psi | V | \Psi \rangle = \int dx dx' \langle \Psi | x' \rangle \langle x' | V | x \rangle \langle x | \Psi \rangle \quad (4.1)$$

avec :

$$|\Psi\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} T_n |\Psi\rangle = \sum_i \sum_{n=-\infty}^{\infty} T_n c_i^\lambda |\alpha_i^\lambda\rangle (t) \quad (4.2)$$

Avec T_n l'opérateur de translation. La somme sur n est numériquement tronquée de façon à ce qu'aucune ondelette ne soit sollicitée au-delà des 3σ de sa distribution.

4.1.1 Réseau cubique simple

Le premier réseau utilisé avec Dywan fut un réseau cubique simple, le plus simple des 3 types de réseau cubique, mais aussi le moins stable du point de vue de l'interaction Coulombienne. La figure 4.4 représente la maille primitive d'un tel réseau. La quantité de matière N_s dans une super cellule obéit à la loi suivante :

$$N_s = A \cdot N_p \cdot n^d \quad (4.3)$$

où A est le nombre de nucléons dans le noyau des conditions initiales, N_p le nombre de noyaux dans une maille primitive, n le nombre de répliques de la maille primitive utilisées pour construire la super cellule par dimension et d le nombre de

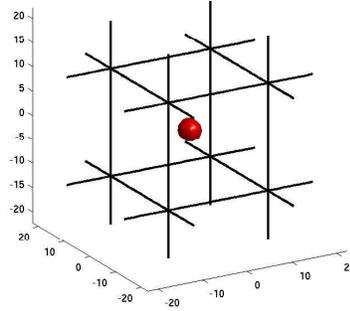


FIG. 4.4 – réseau cubique simple

dimensions.

Dans le cas du réseau cubique simple, on a :

$$N_s = A \cdot 1 \cdot 2^3 \quad (4.4)$$

Pour une quantité de matière limitée, le réseau cubique simple permet de répéter un plus grand nombre de fois le motif primitif. Ce type de réseau s'avère être un choix judicieux pour tester à la fois la stabilité du programme aux erreurs numériques, et la pertinence des résultats obtenus, sans compter sur sa simplicité de mise en oeuvre.

4.1.2 Réseau face centrée

Un second réseau utilisé dans le modèle DYWAN est un réseau cubique face centrée (fcc). Une maille primitive, couramment utilisée, correspondant à ce type de réseau est représentée sur la partie gauche de la figure 4.5. Elle est constituée de 4 noyaux, répartis de la façon suivante 1 noyau sur chaque sommet avec des poids de $1/8$, en effet seul $1/8$ du noyau est dans la maille primitive. Et un noyau sur chaque face avec des poids de $1/2$. Ce qui donne bien $1/8 \cdot 8 + 6 \cdot 1/2 = 4$ noyaux.

Pour éviter d'avoir un traitement spécifique pour les noyaux disposés sur deux primitives, et deux supers cellules, le modèle Dywan utilise une maille primitive de réseau fcc translattée d'un vecteur T de coordonnées $(1/4a, 1/4a, 1/4a)$ où " a " est la taille de la maille primitive. La partie droite de la figure 4.5 représente la maille primitive telle qu'elle est définie dans le modèle DYWAN. On retrouve bien

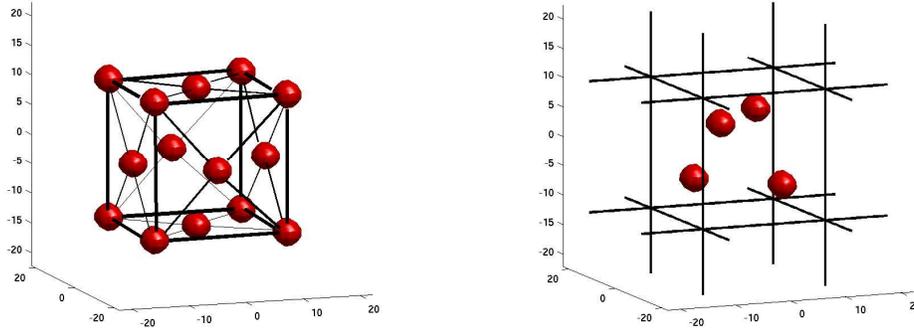


FIG. 4.5 – Réseau cubique face centrée classique, et translaté

les 4 noyaux à la différence qu'ils sont inclus entièrement dans une unique maille primitive.

La construction de la super cellule se fait par un pavage de cette maille principale. en utilisant la formule (4.4) on a :

$$N_s = A * 4 * n^3 \quad (4.5)$$

Pour respecter des quantités de matières ne dépassant pas environ 2500 nucléons par super cellule, "n" est pris égal à 2, ce qui correspond à juxtaposer deux motifs de base par super cellule. Ce nombre est inférieur au cas cubique simple. En exemple considérons le cas de l'oxygène avec une fraction protonique de $x = 0.2$:

$$N_s^{(2)} = 40 * 4 * 8 = 1280$$

$$N_s^{(3)} = 40 * 4 * 27 = 4820$$

4.1.3 Réseau cubique centré

Le dernier type de réseau utilisé dans le modèle DYWAN est le réseau cubique corps centré (bcc), pour l'interaction coulombienne c'est le réseau le plus stable, et celui qui est probablement présent dans l'écorce supérieure des étoiles à neutrons (sous argument de la minimisation de l'énergie Coulombienne). La partie gauche de la figure (4.6) représente une maille primitive de ce type de réseau. Une maille primitive est composée par deux noyaux répartis comme suit : 4 noyaux par angles avec un poids de 1/8 et un noyau central avec un poids de 1.

Pour des raisons similaires au cas du réseau face centrée, dans DYWAN la maille primitive utilisée est une translation de la maille classique par un vecteur T

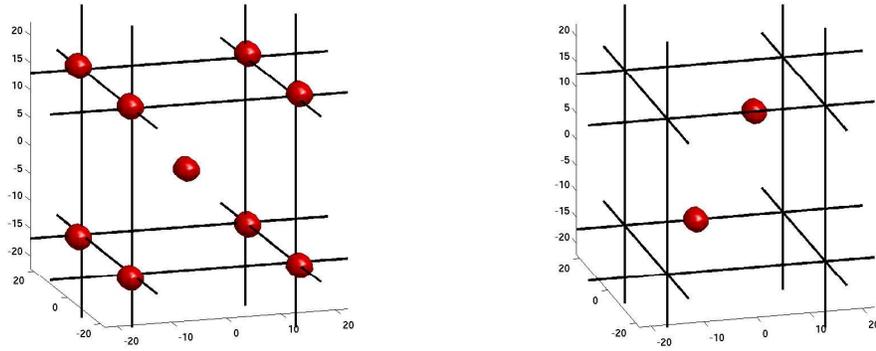


FIG. 4.6 – Réseau cubique face centrée classique, et translaté

de coordonnées $(1/4a, 1/4a, 1/4a)$ où a est la taille de la maille primitive. La partie droite de la figure 4.6 représente la maille primitive telle qu'elle est utilisée dans le modèle DYWAN. La super cellule est construite par la reproduction de deux de ces schémas.

4.2 Modélisation d'une interaction de portée infinie : l'interaction Coulombienne

4.2.1 Généralités

L'interaction coulombienne est une interaction, de portée infinie, dérivant d'un potentiel : Le potentiel Coulombien. Ce dernier prend la forme suivante :

$$V(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \mathbf{d}^3\mathbf{r}' \quad (4.6)$$

où $\rho(\mathbf{r}')$ est la densité de charge créant le potentiel.

Les grandeurs physiques telles que l'énergie ou la force sont toutes déduites de ce potentiel. Ainsi l'énergie coulombienne de densité de charge $\rho_2(\mathbf{r})$ a pour expression :

$$E_{coul} = \int \rho_2(\mathbf{r}) V(\mathbf{r}) \mathbf{d}^3\mathbf{r} \quad (4.7)$$

Alors que la force ressentie par le centroïde d'une densité de charge $\rho_2(\mathbf{r})$ prendra l'expression :

$$\vec{F}_2 = \int \rho_2(\mathbf{r}) \vec{\nabla} V(\mathbf{r}) \mathbf{d}^3\mathbf{r} \quad (4.8)$$

L'énergie et la force seront les deux grandeurs qui vont nous intéresser. La première nous apporte une information intéressante sur le système étudié, alors que la seconde intervient directement dans l'évolution de notre système.

Description du système

Le système à étudier est un système globalement neutre, composé de neutrons, protons et électrons. Les neutrons, étant neutres, ils n'interviendront pas dans le calcul de l'interaction Coulombienne.

Aux densités où les travaux sont effectués (de $0.1\rho_\infty$ à ρ_∞), les électrons sont complètement dégénérés [11]. Nous les considérons donc comme une densité de charge uniforme ρ_e venant neutraliser le système sur une distance caractéristique de la taille d'une super cellule :

$$\int \rho_e(\mathbf{r}) \mathbf{d}^3\mathbf{r} = Z \quad (4.9)$$

où Z est le nombre de protons dans une super cellule.

Les protons sont décomposés sur une base d'ondelettes possédant une enveloppe gaussienne. Au vue de la longueur d'interaction Coulombienne, nous décrirons la densité de charge des protons par une somme d'enveloppe gaussienne :

$$\rho_p(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{i}}^{\mathbf{N}} \mathbf{g}_{\chi_{ix}}(\mathbf{x}) \mathbf{g}_{\chi_{iy}}(\mathbf{y}) \mathbf{g}_{\chi_{iz}}(\mathbf{z}) \quad (4.10)$$

où x, y, z sont les composantes du vecteur position \mathbf{r} . Et $g_{\chi_{ix}}(x)$ est définie comme suit :

$$g_{\chi_{ix}}(x) = \frac{1}{(2\pi\chi_{ix})^{1/2}} e^{-\frac{(x-x_i)^2}{2\chi_{ix}}} \quad (4.11)$$

Par souci de simplicité, nous nous plaçons dans une approximation sphérique. Cela permet de rendre analytique les calculs de la partie directe. Nous avons donc :

$$\chi = \frac{1}{3}(\chi_x + \chi_y + \chi_z) \quad (4.12)$$

$$g_{\chi}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi\chi)^{3/2}} e^{-\frac{(\mathbf{r}-\mathbf{r}_i)^2}{2\chi}} \quad (4.13)$$

$$\rho_p(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{i}}^{\mathbf{N}} \mathbf{g}_{\chi_i}(\mathbf{r}) \quad (4.14)$$

Problématique

Pour prendre en compte entièrement toutes les contributions de l'interaction Coulombienne, il nous faut parcourir un nombre de répliques important. Ce qui est numériquement infaisable si l'on souhaite étudier des système importants en nombre de charges.

Ce phénomène est bien connu dans le cas de la physique du solide. L'une des méthodes qui a été utilisée pour surmonter le problème est la technique d'Ewald [70]. Cette méthode consiste à décomposer l'interaction Coulombienne en deux parties : une de courte portée et une de longue portée. Ainsi un traitement différent peut être appliqué selon le type d'interaction (courte ou longue) calculée.

4.2.2 Décomposition d'Ewald

Principe

Pour réaliser cette décomposition une densité de charge fictive, nommée écrantage, est introduite. Elle est centrée sur chacun des états de base participant au potentiel Coulombien. Cette densité de charge possède la même amplitude que

l'état de base, mais une extension différente. Ainsi à partir d'une certaine distance la charge globale paraîtra nulle, il en va de même pour l'interaction en découlant. De ce fait toutes les contributions longue portée s'annulent.

Application au système étudié

Comme il a été dit dans le premier chapitre, le système étudié est composé d'électrons dégénérés créant une densité de charge uniforme, et de protons décomposés sur une base d'ondelettes à enveloppe gaussienne. Pour la densité de charge des protons, seule l'enveloppe gaussienne est retenue. Nous avons donc :

$$\rho_{tot}(\mathbf{r}) = \rho_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) + \rho_{\mathbf{e}}(\mathbf{r}) \quad (4.15)$$

Nous allons introduire une densité de charge artificielle : l'écrantage centré sur chacun des états de base :

$$\rho_s(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{i}}^N -\mathbf{g}_{\chi'_i}(\mathbf{r}) \quad (4.16)$$

qui diffère de (4.14) uniquement par son signe et par son extension χ'_i . Nous pouvons définir un coefficient de dilatation a_i , par le rapport de la racine des extensions :

$$a_i = \frac{\sqrt{\chi'_i}}{\sqrt{\chi_i}} \quad (4.17)$$

Ce coefficient est fixé à une valeur unique pour tous les états de bases.

Nous pouvons réécrire la densité de charge totale, sans la modifier :

$$\rho_{tot}(\mathbf{r}) = \rho_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) + \rho_s(\mathbf{r}) - \rho_s(\mathbf{r}) + \rho_{\mathbf{e}}(\mathbf{r}) \quad (4.18)$$

qui peut se réécrire

$$\rho_{tot}(\mathbf{r}) = \rho_{\mathbf{d}}(\mathbf{r}) + \rho_{\mathbf{r}}(\mathbf{r}) \quad (4.19)$$

où

$$\rho_{\mathbf{d}}(\mathbf{r}) = \rho_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) + \rho_s(\mathbf{r}) \quad (4.20)$$

et

$$\rho_{\mathbf{r}}(\mathbf{r}) = -\rho_s(\mathbf{r}) + \rho_{\mathbf{e}}(\mathbf{r}) \quad (4.21)$$

Enfin nous pouvons définir une charge globale $Q_d(\mathbf{r})$:

$$Q_d(\mathbf{r}) = \int_{\mathbf{0}}^{\mathbf{r}} \rho_{\mathbf{d}}(\mathbf{r}') \mathbf{d}^3\mathbf{r}' \quad (4.22)$$

Avec la définition de la charge d'écrantage nous voyons que $Q_d(\mathbf{r})$ tend vers 0 quand \mathbf{r} tend vers l'infini. Il en découle le phénomène suivant : plus une charge sera

éloignée de la charge d'écrantage, moins elle sera sensible à celle-ci. L'interaction, conséquence de cette densité de charge, est de courte portée. En terme de potentiel la séparation se fait comme suit :

$$V(\mathbf{r}) = \mathbf{V}_d(\mathbf{r}) + \mathbf{V}_r(\mathbf{r}) \quad (4.23)$$

avec

$$V_d(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{\rho_p(\mathbf{r}') + \rho_s(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3\mathbf{r}' \quad (4.24)$$

$$V_r(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{\rho_e(\mathbf{r}') - \rho_s(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3\mathbf{r}' \quad (4.25)$$

4.2.3 Terme Direct

Formule analytique

Le potentiel direct peut se calculer facilement analytiquement, et prend la forme suivante :

$$V_d = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_j \frac{q_j}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|} \left[\operatorname{erf}\left(\frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|}{\sqrt{2\chi_j}}\right) - \operatorname{erf}(\alpha|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|) \right] \quad (4.26)$$

Pour l'évolution temporelle la grandeur utilisée est la force. La force Coulombienne qu'exerce un état j sur état i prend la forme :

$$\vec{F}_{j/i} = - \int \rho_i(\mathbf{r}) \vec{\nabla} V_j(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \quad (4.27)$$

où $\vec{\nabla} V_j(\mathbf{r})$ est le gradient du potentiel dont la norme prend la forme :

$$\vec{\nabla} V_j(\mathbf{r}) = - \frac{\mathbf{q}_j}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|^2} \left[\operatorname{erf}\left(\frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|}{\sqrt{2\chi_j}}\right) - \operatorname{erf}(\alpha|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|) \right] + \frac{\mathbf{q}_j}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|} \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi\chi_j}} e^{-\frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|^2}{2\chi_j}} - \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} e^{-\alpha^2|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|^2} \right] \quad (4.28)$$

La force résultant de la force exercée sur i par j est dirigée selon la droite passant par les deux centroïdes, on peut ainsi calculer la norme de la force de la manière suivante :

$$|F_{j/i}| = - \int \rho_i(\mathbf{r}) |\nabla V_j(\mathbf{r})| r^2 \sin\theta d\theta d\phi d\mathbf{r} \quad (4.29)$$

Après intégration sur les angles, l'intégrale radiale suivante est obtenue :

$$|F_{j/i}| = \frac{1}{4\pi\epsilon_0\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f_1(U) e^{-U^2} \frac{1}{r_{ij}} \left[\frac{1}{\sqrt{2\chi_i}U + r_{ij}} - \frac{\chi_i}{r_{ij}(\sqrt{2\chi_i}U + r_{ij})^2} \right] dU \quad (4.30)$$

Où

$$f_1(U) = -q_j \left[\operatorname{erf} \left[\sqrt{\frac{\chi_i}{\chi_j}} U + \frac{r_{ij}}{\sqrt{2\chi_j}} \right] - \operatorname{erf} \left[\alpha (\sqrt{2\chi_i} U + r_{ij}) \right] \right] \quad (4.31)$$

$$+ q_j (\sqrt{2\chi_i} U + r_{ij}) \left[\sqrt{\frac{2}{\pi\chi_j}} e^{-\frac{|r-r_j|}{2\chi_j}} - 2\frac{\alpha}{\pi} e^{-\alpha^2|r-r_j|} \right] \quad (4.32)$$

Implémentation numérique

Cette intégrale est calculée numériquement via une méthode de Gauss. Si le terme r_{ij} prend des valeurs trop petites, ou fixées par les points de Gauss de façon à annuler le dénominateur des fractions, alors l'intégrale numérique peut présenter des irrégularités (Courbe bleue sur la figure 4.7). Pour s'affranchir de ce problème,

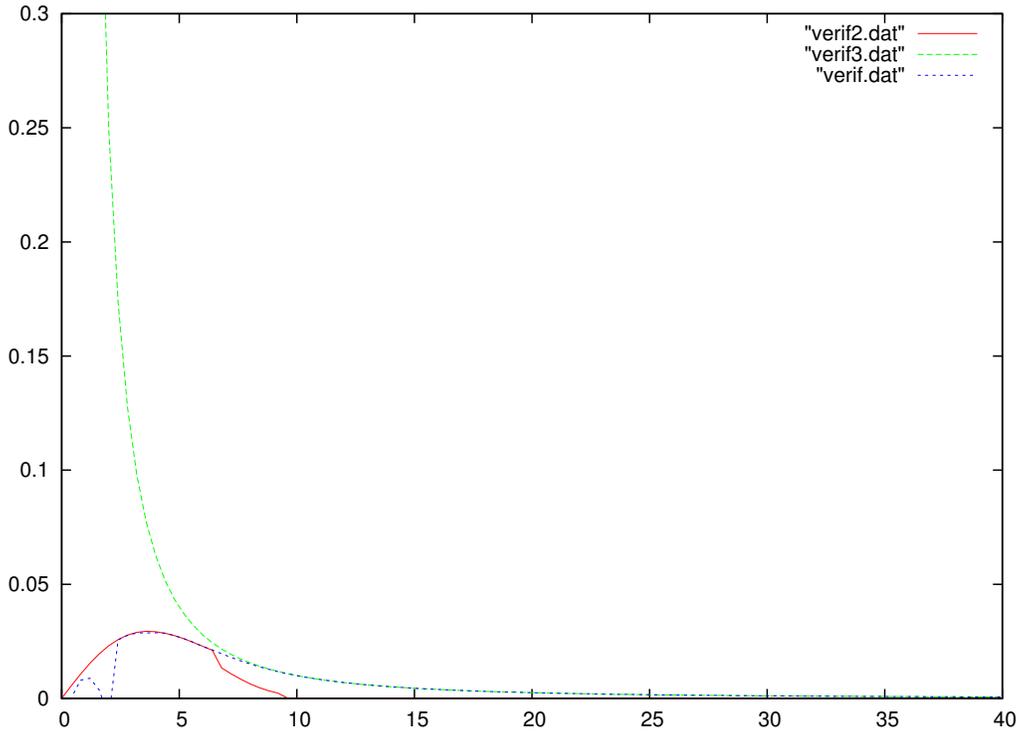


FIG. 4.7 – Valeur en unité arbitraire de l'intégration du potentiel coulombien entre 2 ondelettes en fonction de la distance en Fermi entre leur centroides. La courbe en bleu correspond à la formulation numérique de l'équation (4.30), la courbe rouge est la formulation courte portée (équation (4.34)). La courbe verte est un calcul témoin réalisé pour des charges ponctuelles de charge identique à celle portée par les ondelettes

il est nécessaire de formuler l'intégrale de 2 manières différentes. L'une pour des

états suffisamment éloignés, et l'autre pour des états rapprochés. La formulation précédente, correspond à une interaction de longue portée.

Correction de courte portée

Afin de traiter ces irrégularités de courte portée dans la partie numérique du calcul de la force, il est nécessaire de reformuler l'intégrant. Nous le réécrivons sous la forme d'une fonction hyperbolique pondérée par une exponentielle. Cette forme présente un bon comportement pour de faible valeur de r_{ij} .

Pour de grands r_{ij} , les nombres traités par cette forme sont numériquement trop grands. Nous pouvons le constater sur la courbe rouge de la figure (4.7). En revanche, elle présente un comportement relativement correct pour des valeurs de r_{ij} atteignant 7 fm. Nous pouvons noter qu'il existe un domaine de valeurs de r_{ij} valide pour les deux formulations.

$$|F_{j/i}| = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2\pi}{(2\pi\chi_i)^{3/2}} e^{-\frac{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_j|}{2\chi_i}} \int_0^\infty f_2(x_j) e^{-\frac{|r-r_j|^2}{2\chi_i}} \quad (4.33)$$

$$\left[\frac{2\chi_i}{|r-r_j|r_{ij}} \cosh \frac{|r-r_j|r_{ij}}{\chi_i} - 2 \left(\frac{\chi_i}{|r-r_j|r_{ij}} \right)^2 \sinh \frac{|r-r_j|r_{ij}}{\chi_i} \right] d|r-r_j| \quad (4.34)$$

où

$$f_2(|\mathbf{r}-\mathbf{r}_j|) = -q_j \left[\operatorname{erf} \left(\frac{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_j|}{\sqrt{2\chi_j}} \right) - \operatorname{erf} (\alpha|\mathbf{r}-\mathbf{r}_j|) \right] \quad (4.35)$$

$$+q_j |\mathbf{r}-\mathbf{r}_j| \left[\sqrt{\frac{2}{\pi\chi_j}} e^{-\frac{|r-r_j|^2}{2\chi_j}} - 2\frac{\alpha}{\pi} e^{-2\alpha^2|\mathbf{r}-\mathbf{r}_j|^2} \right] \quad (4.36)$$

Numériquement les fonctions hyperboliques sont tabulées par un développement limité. La jonction entre les deux fonctions est réalisée au maximum de cette tabulation. Ce maximum a été choisi de façon à maximiser le domaine de validité de la fonction à courte portée, sous la contrainte de ne pas manipuler des nombres supérieurs à 10^4 de façon à éviter les erreurs de troncature. L'argument maximum calculé pour les fonctions hyperboliques correspond à 12.5.

4.2.4 Terme Réciproque

La densité de charge d'écrantage dans la primitive est définie comme suit :

$$\rho_{ecran}(x) = \sum_i \frac{\omega_i \alpha_i^3}{\pi^{3/2}} \exp(-\alpha^2(x-x_i)^2) \quad (4.37)$$

La somme sur i dans l'équation (4.37) est effectuée sur l'ensemble du système (cellule principale + répliques). Chaque i représente la densité de charges d'une ondelette.

Une transformée de Fourier est appliquée à $\rho(x)$ de façon à obtenir une expression de $\rho(x)$ en série de Fourier :

$$\rho_{ecran}(x) = \sum_k C_k \exp(-ik.x) \quad (4.38)$$

Les C_k sont définis comme suit :

$$C_k = \int_{-L/2}^{L/2} \rho(x) \exp(-ik.x) dx \quad (4.39)$$

L'intégration se fait sur toute la cellule primitive. Dans l'étape suivante, connaissant les expressions analytiques des transformations de Fourier d'une gaussienne, on va chercher à se ramener à une intégrale sur tout l'espace. Pour cela réécrivons la somme sur i dans l'équation (4.37) :

$$\sum_i = \sum_{i=1}^N \sum_r \quad (4.40)$$

où N est le nombre d'ondelettes chargées, dont le centroïde est dans la primitive, et r est une somme sur toutes les répliques. L'équation (4.39) devient alors :

$$C_k = \int_{-L/2}^{L/2} \sum_{i=0}^N \sum_r \frac{\omega_i \alpha_i^3}{\pi^{3/2}} \exp(-\alpha^2(x - x_i - rL)^2) \exp(-ik.x) dx \quad (4.41)$$

que l'on peut réécrire :

$$C_k = \sum_{i=0}^N \int_{-L/2}^{L/2} \sum_r g_i(x - rL) \exp(-ik.x) dx \quad (4.42)$$

où encore :

$$C_k = \int_{-L/2}^{L/2} \rho_{ecran}(x) = \sum_{i=0}^N \left[\int_{-L/2}^{L/2} g_i(x) \exp(-ik.x) + \dots + \int_{-L/2}^{L/2} g_i(x - rL) \exp(-ik.x) \right] \quad (4.43)$$

soit :

$$C_k = \int_{-\inf}^{\inf} \sum_{i=0}^N \frac{\omega_i \alpha_i^3}{\pi^{3/2}} \exp(-\alpha^2(x - x_i - rL)^2) \exp(-ik.x) \quad (4.44)$$

On obtient ainsi pour l'expression de $V(k)$, pour tout $k > 0$:

$$V(k) = \sum_i \omega_i \frac{\exp\left(-\frac{k^2}{4\alpha^2}\right)}{k^2} \exp(-ik.x_i) \quad (4.45)$$

Pour $k = 0$, $V(k) = 0$. Cette condition assure la neutralité du système. Cela revient à prendre en compte le fond d'électrons.

4.2.5 Implémentation numérique

Nous allons ici comparer les densités calculées à partir des formules analytiques en k , avec la densité projetée¹. Nous effectuons un calcul statique pour un réseau de 27 noyaux d'oxygène de demi largeur $rxscale = 10fm$ (figure 4.8) et $rxscale = 20.0$ (figure 4.9). Pour ce dernier cas les formes des densité des 2 méthodes sont relativement proches. Le fond Coulombien, qui vaut la différence des deux densités² devrait être constant. Une variation sensible de ce dernier au niveau des deux noyaux de périphérie peut être observée. Cela est dû à un décalage des noyaux vers l'extérieur du réseau.

Pour le cas précédent : $rxscale = 10fm$, les densités projetées dans l'espace en k sont moins fidèles à la densité projetée dans l'espace des positions que dans le cas $rxscale = 20fm$. Le fond électronique correspondant à cette différence est une fonction qui oscille très rapidement. Ce sont les contributions hautes fréquences de la décomposition de Fourier qui corrigent le décalage vu précédemment. Ceci peut être vérifié sur la figure 4.10 correspondant a une somme partielle sur k avec deux fois moins de contributions ($-14 < k < 14$ > $-7 < k < 7$). Le fond d'électrons varie beaucoup moins, mais le décalage des noyaux de la périphérie est toujours présent.

Nous travaillons avec les densités, beaucoup plus sensibles aux hautes fréquences que le potentiel (division par k^2). Il faut aussi noter que ces densités ont été obtenues avec le potentiel réciproque seul. Il doit donc prendre en compte complètement les interactions de longues et de courte portées, correspondant aux basses fréquences et hautes fréquences.

Nous pouvons vérifier que le potentiel est moins sensible aux hautes fréquences sur les figures 4.11 et 4.12, correspondant respectivement à $kmax = 14$ et $kmax =$

¹Sans appliquer de FFT

²Comme pour la première méthode, aucune FFT n'a été appliquée, le fond d'électrons ne contribue pas à la densité, contrairement à la seconde méthode.

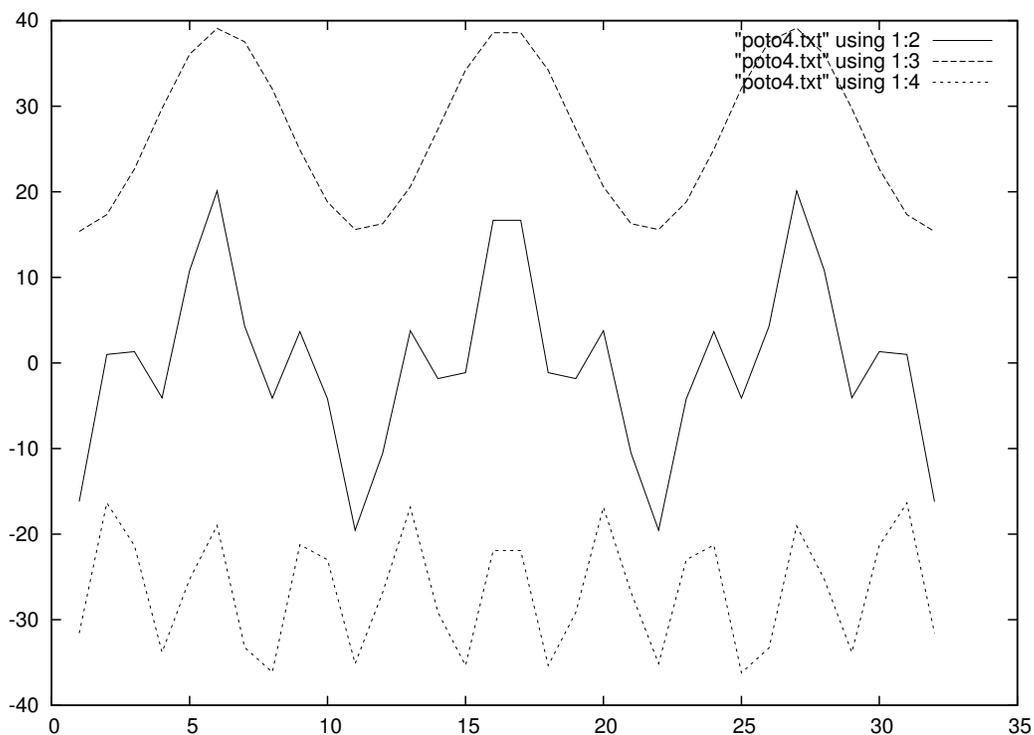


FIG. 4.8 – Profils de densité de charge pour un réseau cubique simple de 27 noyaux d'oxygène dans une super-cellule de 20 fm de largeur. La densité de charge telle qu'elle est traitée par l'algorithme de FFT (protons + électrons) est tracée en trait plein. La densité de protons réelle est représentée par le trait continu. Enfin le fond d'électrons pris en compte par l'algorithme de FFT est en trait fin et discontinu.

7. Les fortes variations de la densité électronique sont fortement atténuées. Les potentiels calculés avec l'ancienne méthode sont extrêmement sensibles au phénomène d'aliasing : le potentiel sur les bords est beaucoup trop bas, rajoutant une composante à la force réciproque faisant considérablement dériver les noyaux périphériques.

En considérant moins de contributions en k , la forme de la densité et le décalage obtenus sont plus fidèles. Le potentiel étant moins sensible à ces hautes fréquences, la forme du potentiel reste plus fidèle même avec les contributions hautes fréquences.

Bien que faisant apparaître un léger décalage sur lequel nous reviendrons plus tard, la nouvelle méthode est par formalisme, insensible au phénomène d'aliasing. Nous avons vu que ce décalage est corrigé grâce au rajout de hautes fréquences

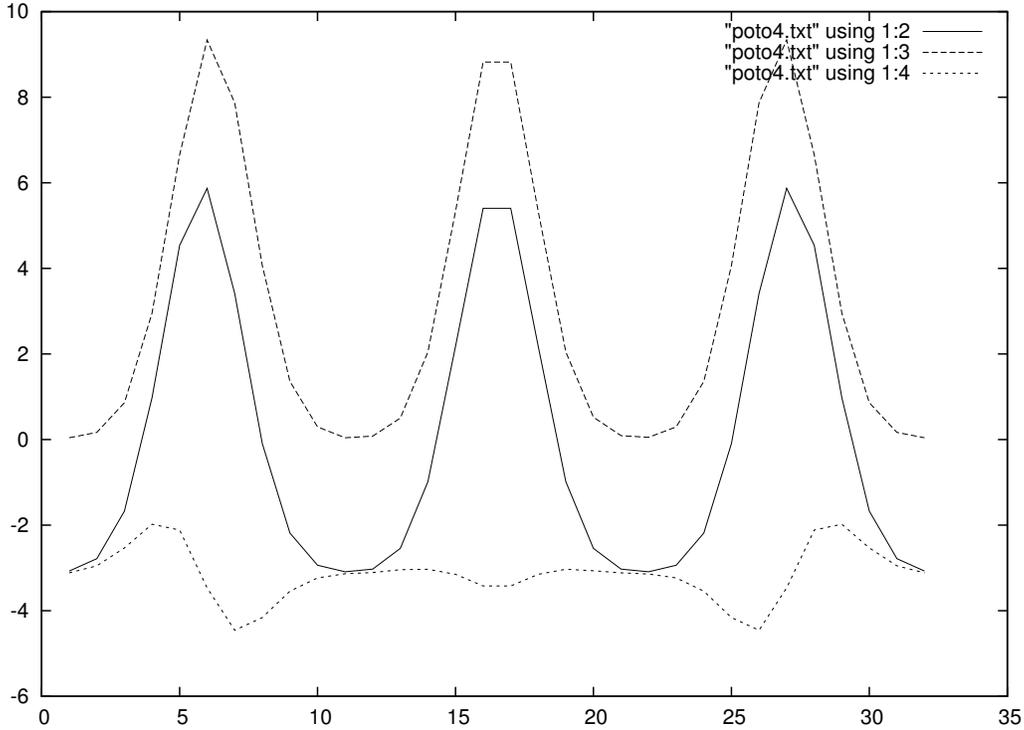


FIG. 4.9 – Profils de densité de charge pour un réseau cubique simple de 27 noyaux d'oxygène dans une super-cellule de 40 fm de largeur. La densité de charge telle qu'elle est traitée par l'algorithme de FFT (protons + électrons) est tracée en trait plein. La densité de protons réelle est représentée par le trait continu. Enfin le fond d'électrons pris en compte par l'algorithme de FFT est en trait fin et discontinu.

faisant intervenir un fond d'électrons fortement oscillant. Ce phénomène de décalage est, dans les cas présentés, fortement atténué par les symétries du réseaux : les noyaux sont disposés à des distance égales, dont la période est proche des fréquences caractéristiques de la super-cellule. Dans le cas d'une répartition plus "aléatoire" de la densité de charge, nous risquons d'avoir besoin de plus en plus des hautes fréquences. Le potentiel étant moins sensible à ces variations importantes du fond d'électrons, nous avons tout intérêt à prendre un k_{max} maximal (fréquence de Nyquist).

4.2.6 Compensation Direct-Reciproque

Cette décomposition est un artifice de calcul. Les grandeurs physiques calculées par cette méthode ne doivent pas être sensibles à une variation de l'écrantage.

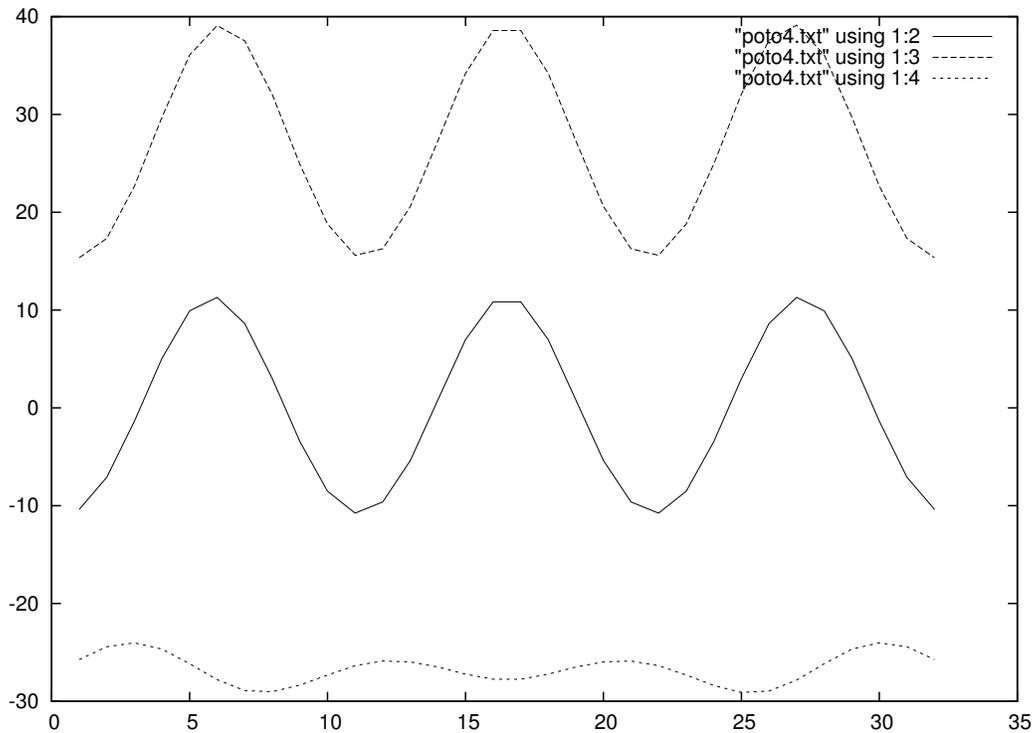


FIG. 4.10 – Profils de densité de charge pour un réseau cubique simple de 27 noyaux d’oxygène dans une super-cellule de 20 fm de largeur. La projection en fréquence est arbitrairement stoppée aux vecteurs d’onde $k=7$. La densité de charge telle qu’elle est traitée par l’algorithme de FFT (protons + électrons) est tracée en trait plein. La densité de protons réelle est représentée par le trait continu. Enfin le fond d’électrons pris en compte par l’algorithme de FFT est en trait fin et discontinu.

La discrétisation utilisée pour calculer le terme réciproque introduit forcément un biais dans le calcul. A partir des analyses effectuées dans cette section, nous allons tenter de quantifier ce biais, d’analyser son impact sur l’évolution temporelle. Nous prenons comme grandeur physique de référence le gradient du potentiel : c’est cette grandeur qui intervient directement dans le calcul des forces Coulombiennes qui servent à l’évolution temporelle. C’est donc une grandeur extrêmement importante pour le déroulement des simulations. Dans le terme direct, cette grandeur est calculée de façon analytique. Mais dans le but de le visualiser de façon homogène avec le terme réciproque nous allons le projeter sur le réseau réciproque : réseau de 32 points, dont le pas varie avec la taille totale L de la super-cellule ($L = 2 * r_{xscale}$).

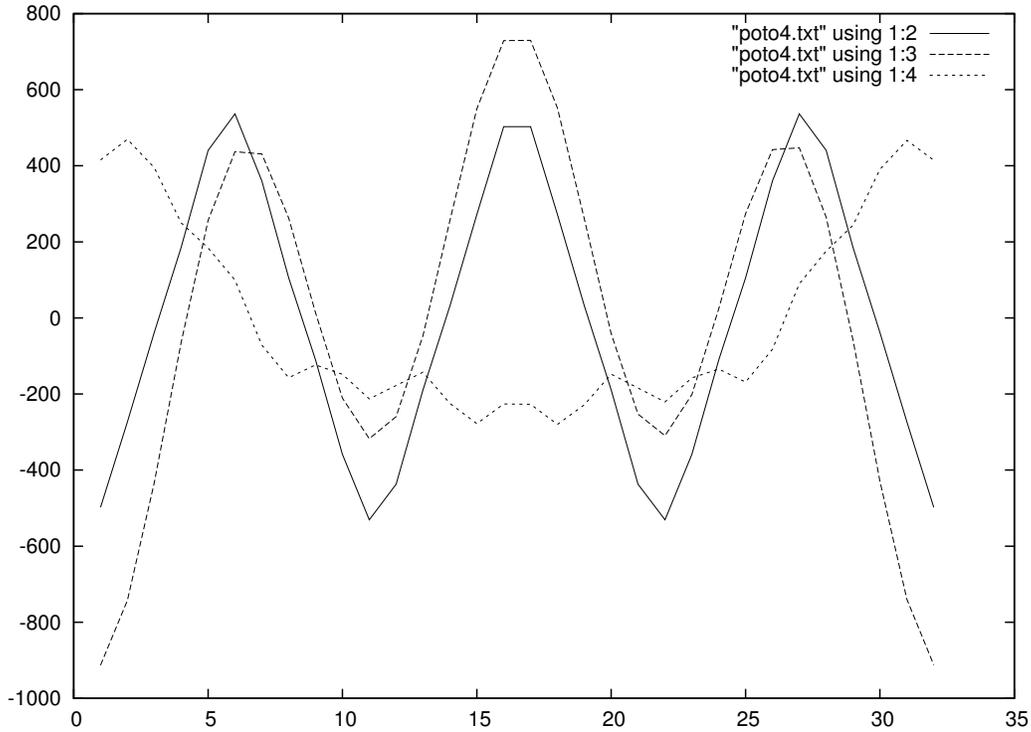


FIG. 4.11 – Potentiel coulombien en unité arbitraire pour un réseau cubique simple de 27 noyaux d’oxygène dans une super-cellule de 20 fm de largeur. Le trait plein représente le potentiel calculé à partir d’une projection du potentiel dans l’espace k . Alors que le trait discontinu décrit le potentiel calculé par l’application de l’algorithme de FFT sur l’espace des positions x .

De plus nous comparerons nos résultats avec un calcul du gradient du potentiel réalisé pour un système identique, mais sans électrons, et uniquement avec le terme direct, sans écrantage. Nous prenons en compte le nombre de répliques nécessaires au calcul. Par argument d’homogénéité il vient immédiatement que ce calcul est équivalent à celui réalisé.

La configuration du réseau cristallin utilisé est la suivante : 2 noyaux d’oxygène éloignés de $-1/3 * rxscale$ et $+1/3 * rxscale$ du centre de la cellule sur l’axe x . Tous les deux sont placés à $y = 0$ et $z = 0$.

Le gradient du potentiel est ensuite tracé selon l’axe des x pour des valeurs de y et z légèrement inférieures à 0 : correspondant au 16^{ème} point du réseau. Les figures (4.13) à (4.18) correspondent à différentes valeurs du paramètre de dilatation a (1 ,1.5, 2.0) et à deux tailles de super-cellule différentes : $L=30$ fm

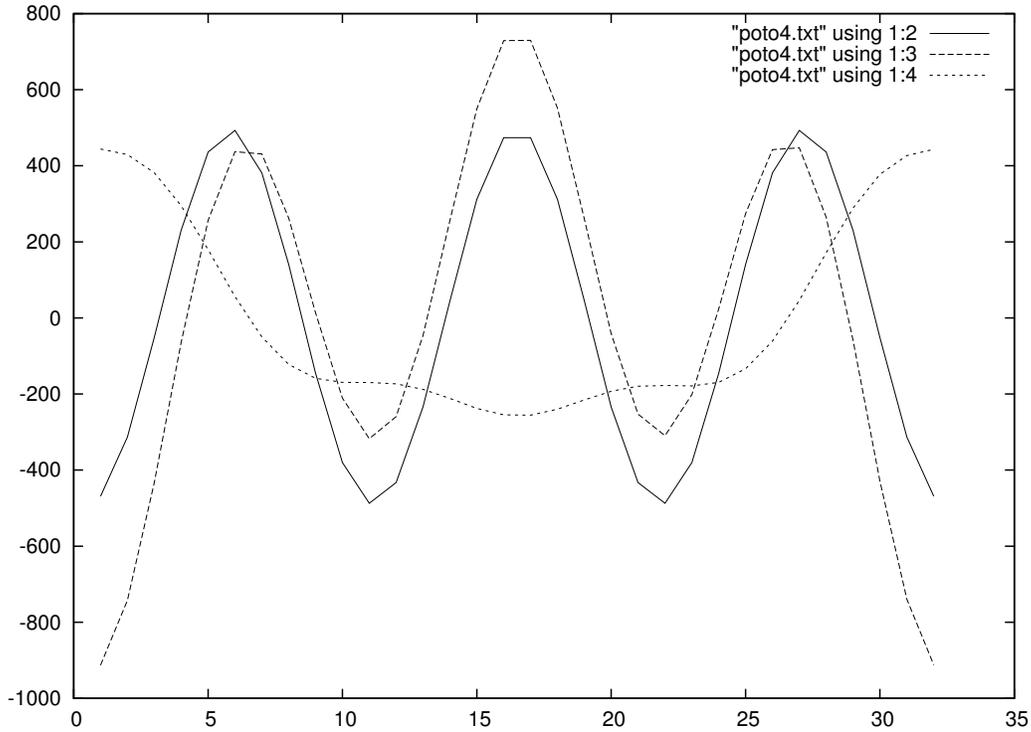


FIG. 4.12 – Potentiel coulombien en unité arbitraire pour un réseau cubique simple de 27 noyaux d’oxygène dans une super-cellule de 20 fm de largeur. La projection en fréquence est arbitrairement stoppée aux vecteur d’onde $k=7$. Le trait plein représente le potentiel calculé à partir d’une projection du potentiel dans l’espace k . Alors que le trait discontinu décrit le potentiel calculé par l’application de l’algorithme de FFT sur l’espace des positions x .

et $L=60$ fm. Les valeurs asymptotiques (en dehors des noyaux) du gradient du potentiel sont identiques au calcul témoin. Pour de faibles valeurs du coefficient de dilatation ($a = 1$), le gradient du potentiel est nettement sous-estimé, quel que soit le pas du réseau. Ceci est toutefois nettement plus visible pour des super-cellule importantes.

Pour une super-cellule de 30 fm, soit un pas de 0.968 fm dès $a = 2$, on observe un bien meilleur accord entre la valeur témoin et la valeur calculée par décomposition d’Ewald. Par contre pour un pas de 1.94 fm, un coefficient de dilatation $a = 3$ est nécessaire pour un observer un accord entre le calcul témoin et la décomposition.

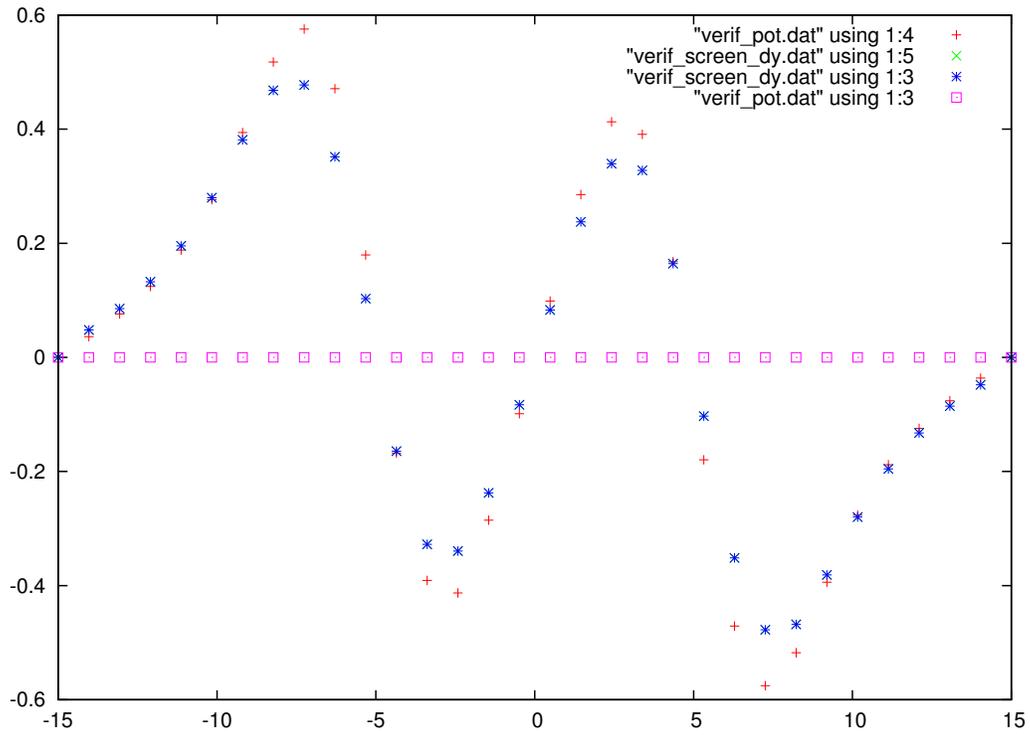


FIG. 4.13 – Gradient du potentiel pour le terme direct (carrés violets), réciproque (astérisques bleus), total (croix verte, et le calcul témoin (croix rouge)). Réseau cubique simple composé de 27 noyaux d'oxygène dans une boîte de 30 fm

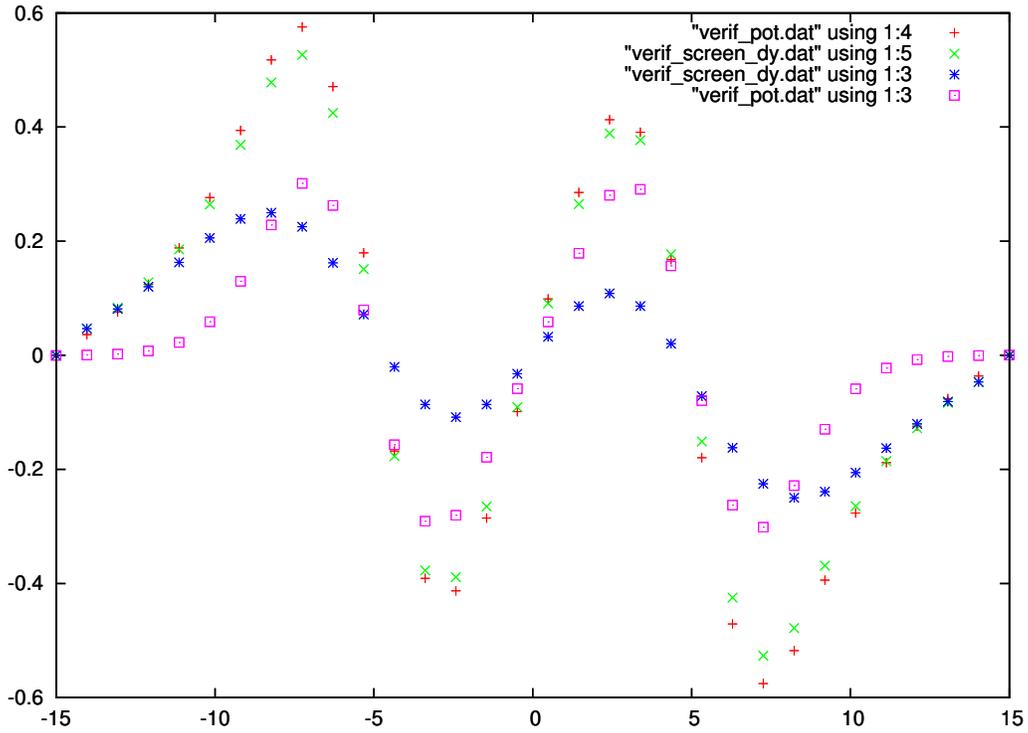


FIG. 4.14 – Gradient du potentiel pour le terme direct (carrés violets), réciproque (asterix bleus), total (croix verte), et le calcul témoin (croix rouge). Réseau cubique simple composé de 27 noyaux d'oxygène dans une super-cellule de 30 fm. Avec un coefficient de dilatation $a = 1.5 fm$

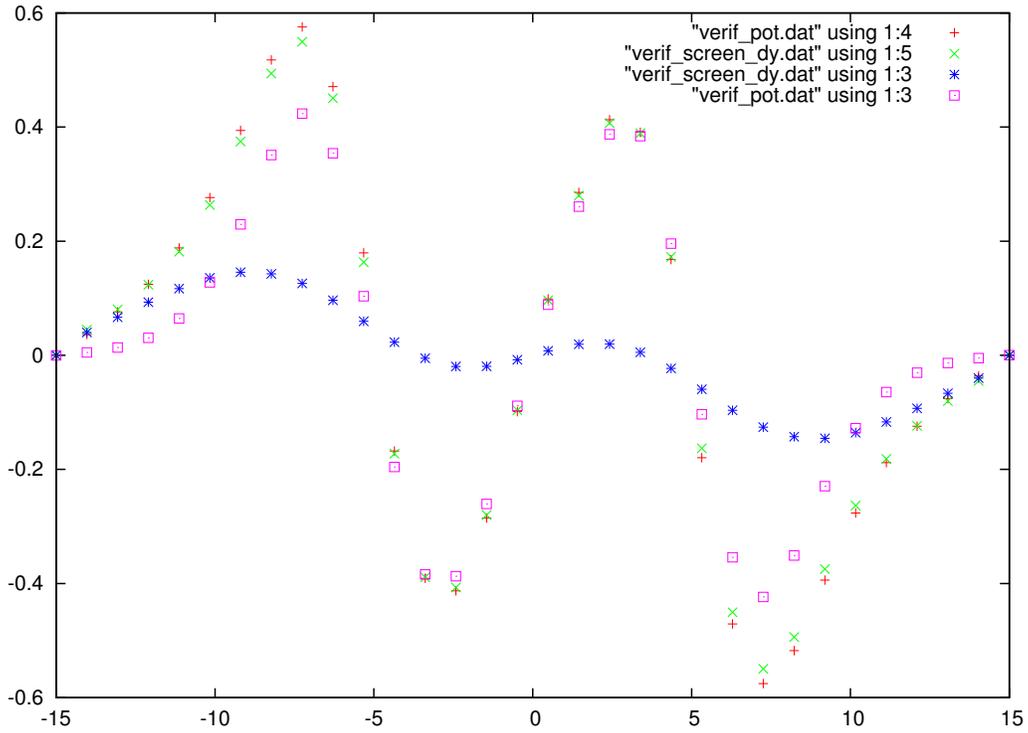


FIG. 4.15 – Gradient du potentiel pour le terme direct (carrés violets), réciproque (astérisques bleus), total (croix verte), et le calcul témoin (croix rouge). Réseau cubique simple composé de 27 noyaux d'oxygène dans une super-cellule de 30 fm. Avec un coefficient de dilatation $a = 2fm$

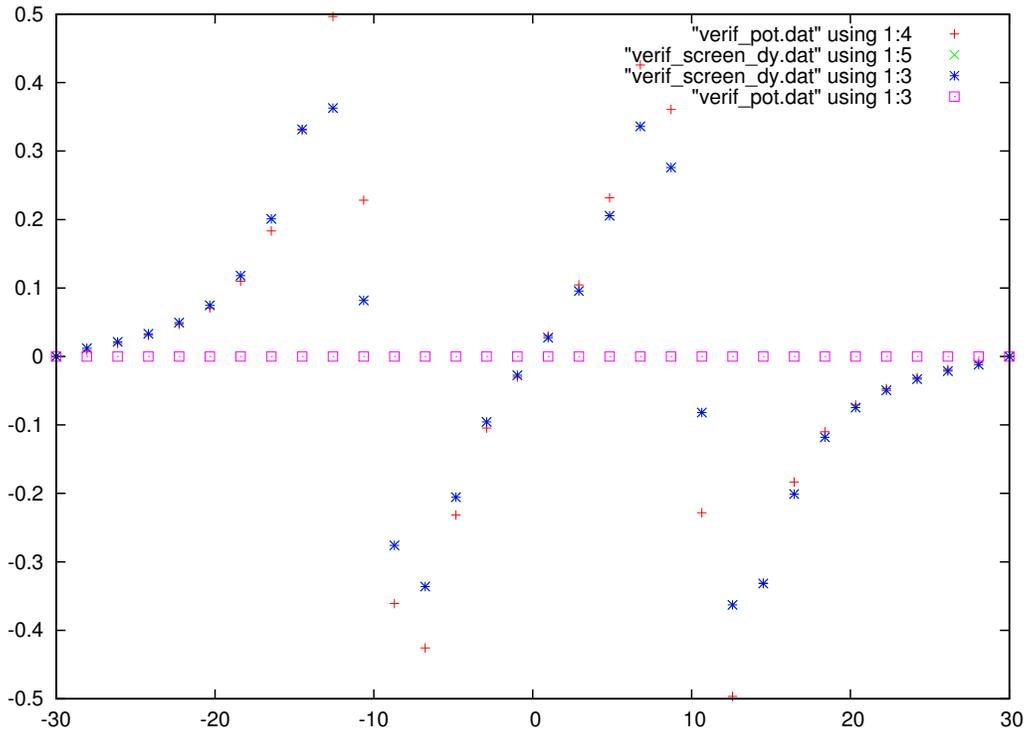


FIG. 4.16 – Gradient du potentiel pour le terme direct (carrés violets), réciproque (astérisques bleus), total (croix verte), et le calcul témoin (croix rouge). Réseau cubique simple composé de 27 noyaux d'oxygène dans une super-cellule de 60 fm. Avec un coefficient de dilatation $a = 1Fm$

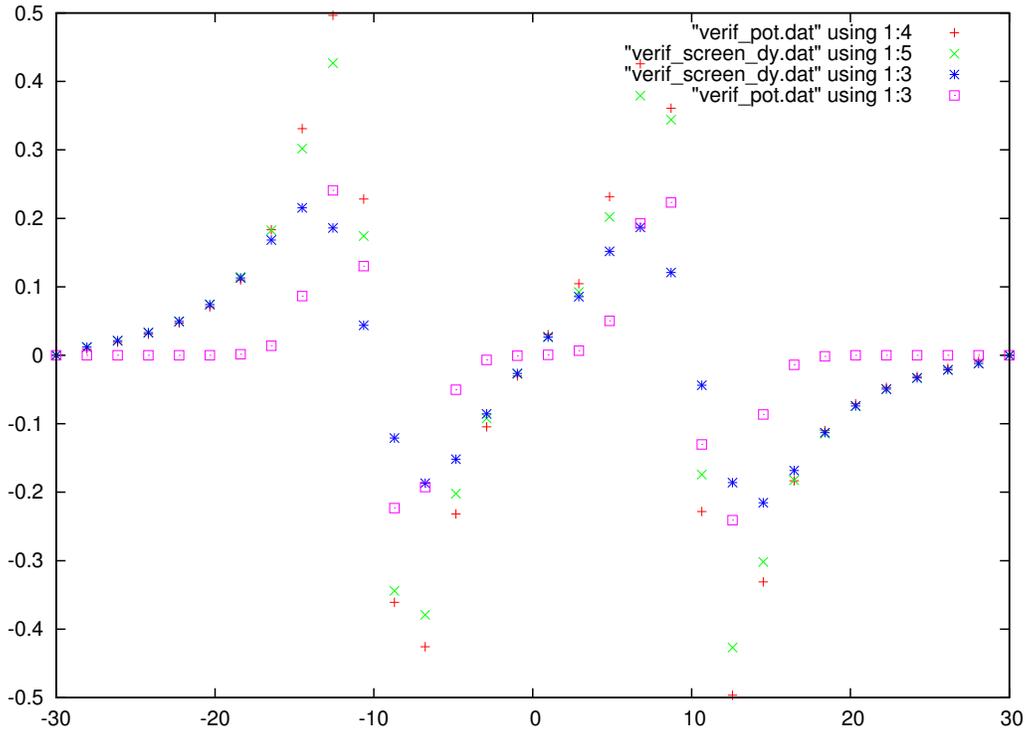


FIG. 4.17 – Gradient du potentiel pour le terme direct (carrés violets), réciproque (astérisques bleus), total (croix verte), et le calcul témoin (croix rouge). Réseau cubique simple composé de 27 noyaux d'oxygène dans une super-cellule de 60 fm. Avec un coefficient de dilatation $a = 1.5 fm$

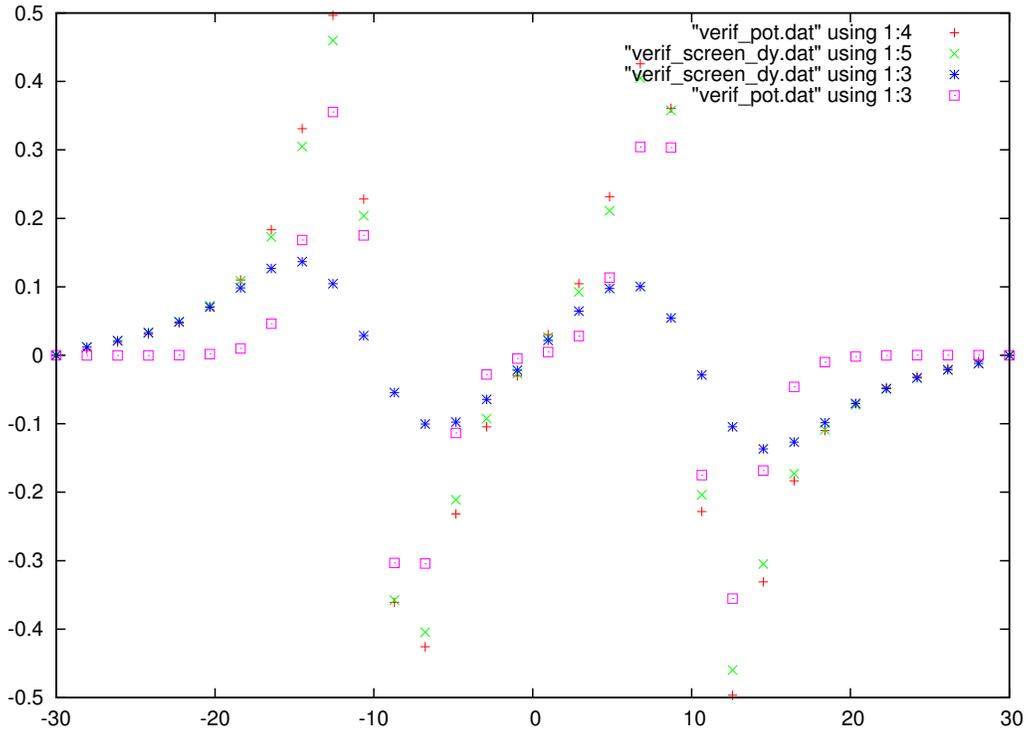


FIG. 4.18 – Gradient du potentiel pour le terme direct (carrés violets), réciproque (asterisques bleus), total (croix verte), et le calcul témoin (croix rouge). Réseau cubique simple composé de 27 noyaux d'oxygène dans une super-cellule de 60 fm. Avec un coefficient de dilatation $a = 2.0 fm$

Chapitre 5

Le modèle DYWAN appliqué à la matière d'étoile

5.1 Visualisation de la matrice densité et des structures formées

5.1.1 Isosurface

Nous recherchons la présence et l'évolution de structures ordonnées, pour cela nous utilisons la densité de matière neutronique (ou protonique), que l'on définit à partir de la matrice densité à un corps :

$$\rho(\mathbf{r}) = \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}) = \sum_i \langle \mathbf{r} | \Psi_{\alpha_i} \rangle \langle \Psi_{\alpha_i} | \mathbf{r} \rangle \quad (5.1)$$

où i parcourt les états d'un isospin donné.

La représentation complète de cette matrice nécessiterait 4 dimensions. Pour pouvoir visualiser les structures formées nous utiliserons des isosurfaces. Une isosurface est l'ensemble des points $M(x,y,z)$ tel que $\rho(x, y, z) = \rho_t$ où ρ_t est la densité seuil.

5.1.2 Fonctionnelle de Minkowski

Dans le but d'extraire une mesure morphologique d'une image (forme, topologie), on utilise les fonctionnelles de Minkowski. Pour une description plus complète de ces fonctionnelles se reporter à l'annexe A. Nous n'en donnerons ici qu'une brève présentation.

Hadwiger a montré qu'il existe une fonctionnelle de plus que les dimensions de l'image analysée. Ce qui pour le cas 3d en fait quatre, qui sont : Le volume, la surface, la courbure moyenne, et la caractéristique d'Euler. Cette dernière est définie comme suit :

$$\chi_E = n_e - n_t + n_c \quad (5.2)$$

où n_e , n_t et n_c désignent respectivement le nombre d'éléments, le nombre de tunnels et le nombre de cavités.

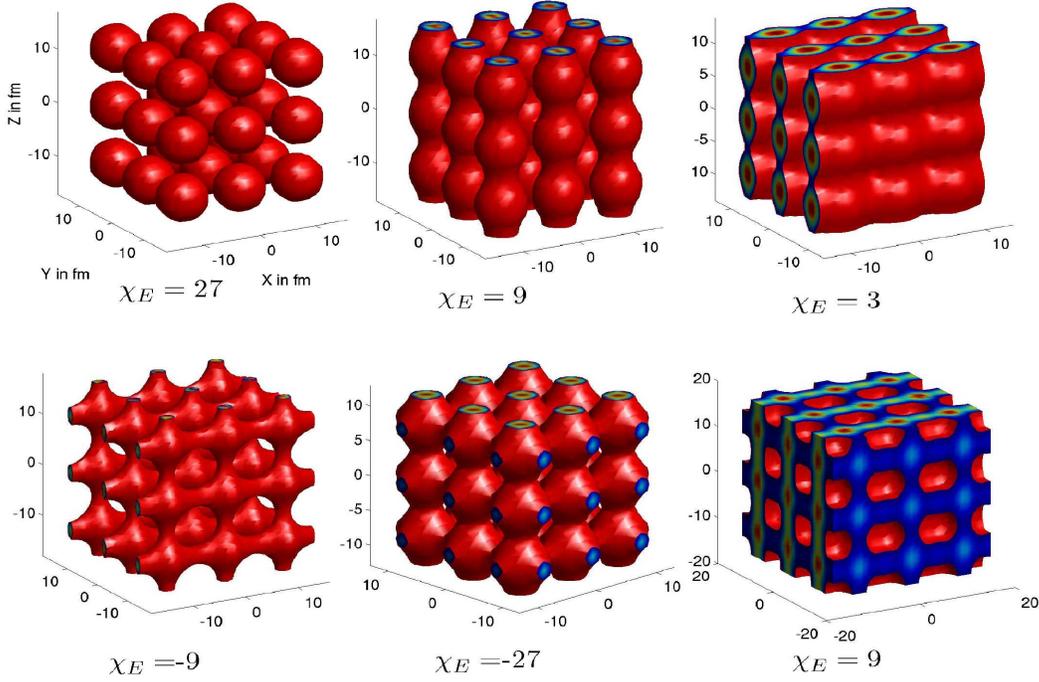


FIG. 5.1 – Diverses phases structurales et leurs caractéristiques d'Euler correspondantes.

Une image est une collection de pixels noirs sur un fond blanc. Ce qui impose de travailler avec des images "bicolores". Dans cette thèse les analyses portent sur la distribution de matière nucléaire dans l'espace. Pour transformer celle-ci en une image analysable, nous procédons de manière identique aux isosurfaces, en définissant un seuil en densité, au dessus duquel tout pixel sera plein (noir).

Dans ce chapitre nous avons utilisé un ensemble moins conventionnel de ces fonctionnelles qui nous permettait d'obtenir une relation (quasi) univoque entre structure et caractéristique d'Euler. sur la figure 5.1 sont présentées les principales

TAB. 5.1 – Résumé des valeurs des caractéristiques d'Euler.

χ_E	structure
27	sphères
9	cordes/ bulles sphériques
3	plaques
-3	bulles cylindriques
-9	plaques trouées
-15	plaques reliées
-27	éponges

structures observées dans ces premières simulations et leurs caractéristiques d'Euler. La table (5.1) résume toutes les structures et leurs caractéristiques d'Euler.

5.2 Exemple de simulation

Nous présentons ici un résultat préliminaire obtenu avec le modèle DYWAN en partie présenté dans [63]. Il s'agit de l'évolution temporelle d'un réseau de noyaux d'oxygène pour une densité moyenne de $0.0725 fm^{-3}$ avec une fraction protonique $x = 0.1$ et à température nulle. Sur la figure 5.2 est représentée l'évolution temporelle de l'observable densité de neutrons pour une densité seuil $\rho_t = 0.065 fm^{-3}$. Nous pouvons voir que le système passe par différentes structures en plus des noyaux (quasi) sphériques de départ. Nous pouvons observer des cylindres, des plaques, des plaques trouées et des structures de type éponge. Dans les conditions initiales les noyaux sont légèrement déformés de manière à donner au système une énergie qui lui permet de venir parcourir les différents minima locaux en énergie. Cette simulation montre que les "pastas phases" sont construites dynamiquement comme le suggéraient les auteurs [61].

Les conditions de cette simulation sont extrêmement similaires au cas de la figure (4.2) seules changent les conditions initiales, notamment un léger décalage des noyaux pour la figure 4.2. Le système présenté ici est hautement instable, comme le laisse supposer la réorganisation observée sur le cas du réseau légèrement perturbé.

Les conditions physiques présentes dans l'écorce d'une étoile à neutrons ne sont pas complètement respectées ici. Notamment la masse A des noyaux des conditions initiales est ici trop faibles, puisqu'on devrait être plus proche du ${}^{56}Fe$. De plus

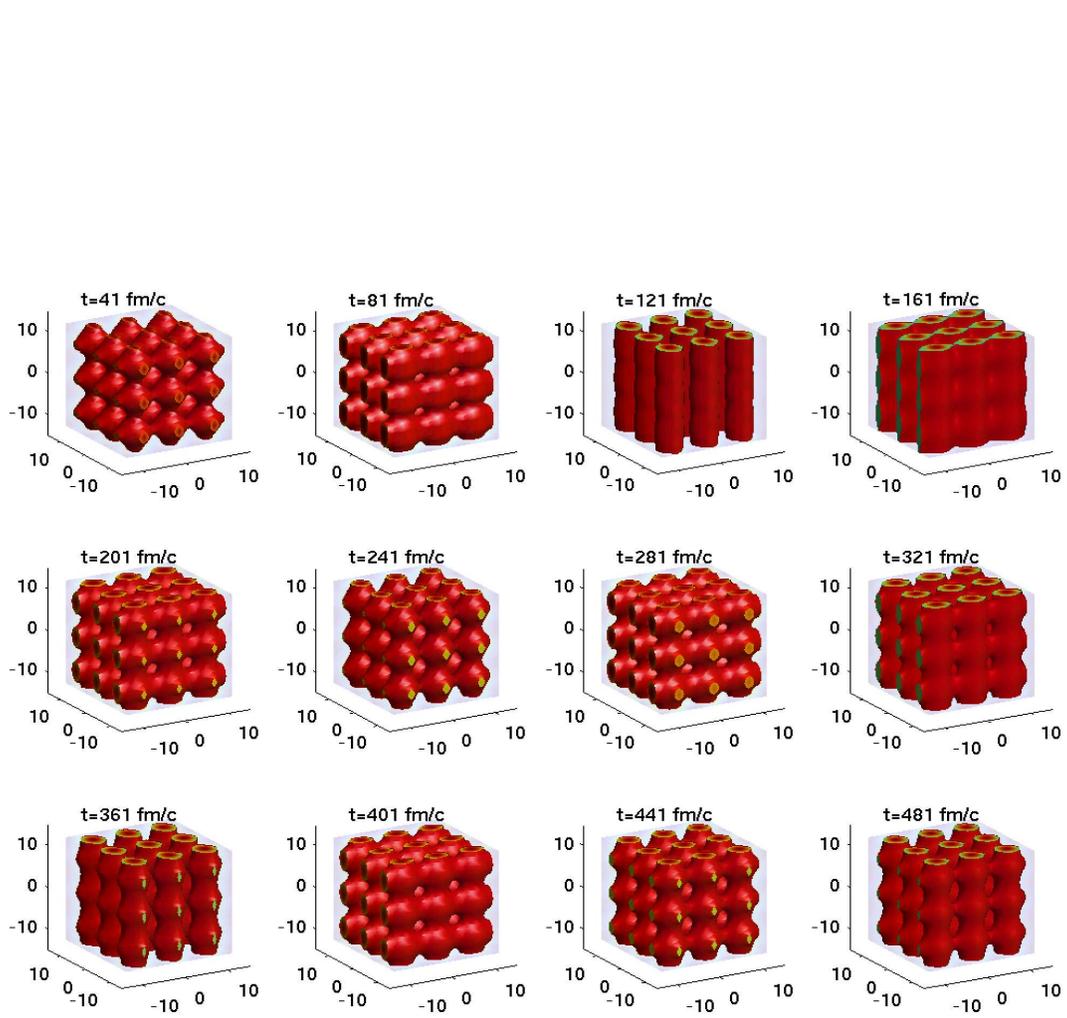


FIG. 5.2 – Evolution temporelle de la densité de neutrons pour un seuil de densité neutron de 0.065 fm^{-3} , la fraction protonique est de $x=0.1$, et la densité moyenne macroscopique est de $\langle \rho \rangle = 0.0725 \text{ fm}^{-3}$.

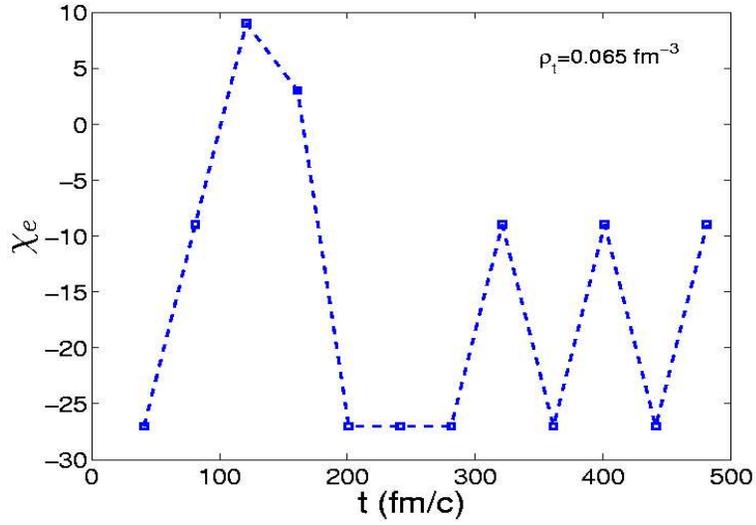


FIG. 5.3 – Caractéristiques d'Euler en fonction du temps pour les structures de la figure Fig. (5.2)

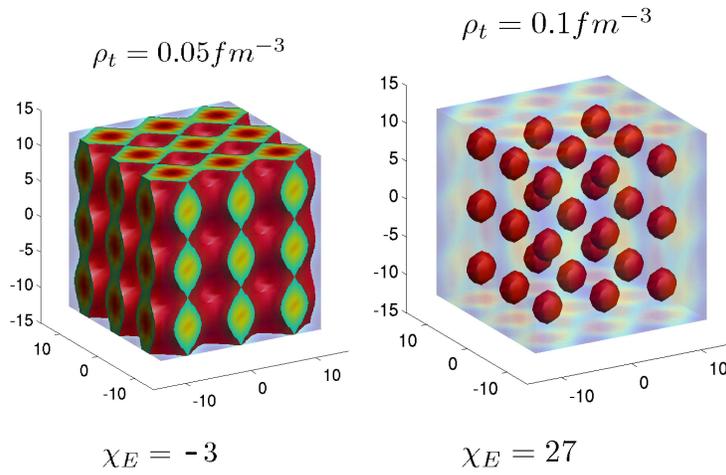


FIG. 5.4 – Densité de neutrons pour le même système qu'à la figure (5.2) à $t=201$ fm/c pour deux valeurs du seuil de densité ρ_t .

on s'attend plutôt à des réseaux du type fcc ou bcc alors qu'ici nous travaillons avec un réseau cubique simple beaucoup moins stable. Il s'agissait ici de tester la modélisation numérique mise en place, pour que par la suite lors de la mise en place des fluctuations nous ne soyons pas perturbés par des erreurs d'ordre numérique. Le fait que l'on arrive à conserver les symétries du système pendant plus de 1000 fm/c, sur un cas très instable, nous assure de la stabilité de la modélisation.

Dans le but de visualiser efficacement le type de structure présente nous utilisons la caractéristique d'Euler. Sur la figure 5.3 nous représentons l'évolution temporelle de cette dernière pour la simulation correspondante à la figure 5.2. En nous reportant à la table (5.1) nous voyons que le système passe successivement par les structures : éponge, plaques trouées, cylindres, plaques, éponge, puis oscille entre éponge et plaques trouées. Il faut noter que les structures visualisées sont iso-densité dépendante. Sur la figure (5.4) nous représentons des isosurfaces en densité de neutrons, pour deux densités seuil différentes ($\rho_t = 0.05 fm^{-3}$ et $\rho_t = 0.1 fm^{-3}$). Elles correspondent au profil de la figure 5.2 au temps $t = 201 fm/c$. Il faut remarquer, que selon la densité seuil choisie nous obtenons des sphères ou des trous cylindriques. Le système est composé de toute une hiérarchie de structures emboîtées. La caractérisation de telles structures s'en trouve complexifiée.

5.3 Influence de l'équation d'état et sensibilité à la partie isovectorielle de l'interaction

Dans le but d'étudier l'impact de l'équation d'état et de la composition de la matière sur la formation de ces structures, nous sortons la caractéristique d'Euler asymptotique pour toute une collection de densités moyennes, fractions protoniques, et paramètres d'équation d'état.

Sur la figure 5.5 nous représentons les structures observées en fonction de la densité seuil de neutrons choisie et de la densité moyenne nucléaire, pour deux fractions protoniques ($x = 0.2$ et $x = 0.5$) et différentes valeurs du paramètre ω , dans le but d'analyser la sensibilité à l'équation d'état. Pour faciliter la lisibilité du type de structures observées, nous les représentons par un dégradé de gris comme suit : Sphère (noir), cylindre (gris clair), plaques (gris foncé), éponge (blanc), bulles (gris).

Pour la fraction protonique $x = 0.2$, si l'on regarde à une densité seuil ρ_t fixée, le système passe par toutes les structures décrites précédemment, avec l'augmentation de la densité moyenne, et ce, dans le même ordre. Cette succession de structures est en accord avec les calculs QMD des auteurs [49]. Il est important de noter que le diagramme présenté usuellement dans la littérature, et spécialement pour les auteurs cités ci-dessus, est un diagramme à une dimension. Cela revient à suivre une courbe $\rho_t(\rho)$. Globalement, on obtient un diagramme équivalent en prenant $\rho_t = 0.05 fm^{-3}$.

Pour la matière symétrique, on n'observe aucune sensibilité à l'équation d'état. Bien que la matière soit globalement symétrique, la densité locale de neutrons et de protons peuvent différer. Le potentiel coulombien, qui bien évidemment ne s'applique qu'aux protons provoque ce genre d'asymétrie sur les profils de densité. Mais malgré cela, l'impact de la partie isovectorielle de l'interaction n'a quasiment aucune influence, si ce n'est pour l'EOS la plus dure qui présente une légère augmentation de la zone des cylindres.

Pour la fraction protonique $x = 0.2$, le système présente plus de types de structures différentes, avec notamment l'apparition d'une phase de plaque. Les structures complexes sont présentes sur une plus large plage en densité seuil. On observe une claire dépendance à l'équation d'état, avec notamment, pour l'équation d'état la plus dure une quasi disparition des phases à une et deux dimension au profit de phases à symétrie 3D : structure type éponge et bulles. La structure type éponge est aussi observée dans les simulations QMD par les auteurs [49] sous le

nom de phase intermédiaire. La plage des sphères est elle aussi augmentée avec une diminution de la limite basse en seuil de densité. Pour interpréter ces résultats nous allons nous reporter aux calculs réalisés en matière infinie dans la section (3.6.1). Si l'on se reporte à la figure, on observe que l'énergie gagnée en symétrisant le système aux hautes densités est supérieure à l'énergie dépensée pour augmenter la densité de la matière neutronique aux faibles densités, spécialement pour l'équation d'état dure. Ceci est d'autant plus vrai que la "dilution" de neutrons se fait sur 3 dimensions, d'où une accentuation des phases à symétrie 3D. On peut faire la même déduction à partir des potentiels chimiques. Celui des protons devient fortement négatif à forte densité, alors que celui des neutrons reste faiblement positif aux basses densités.

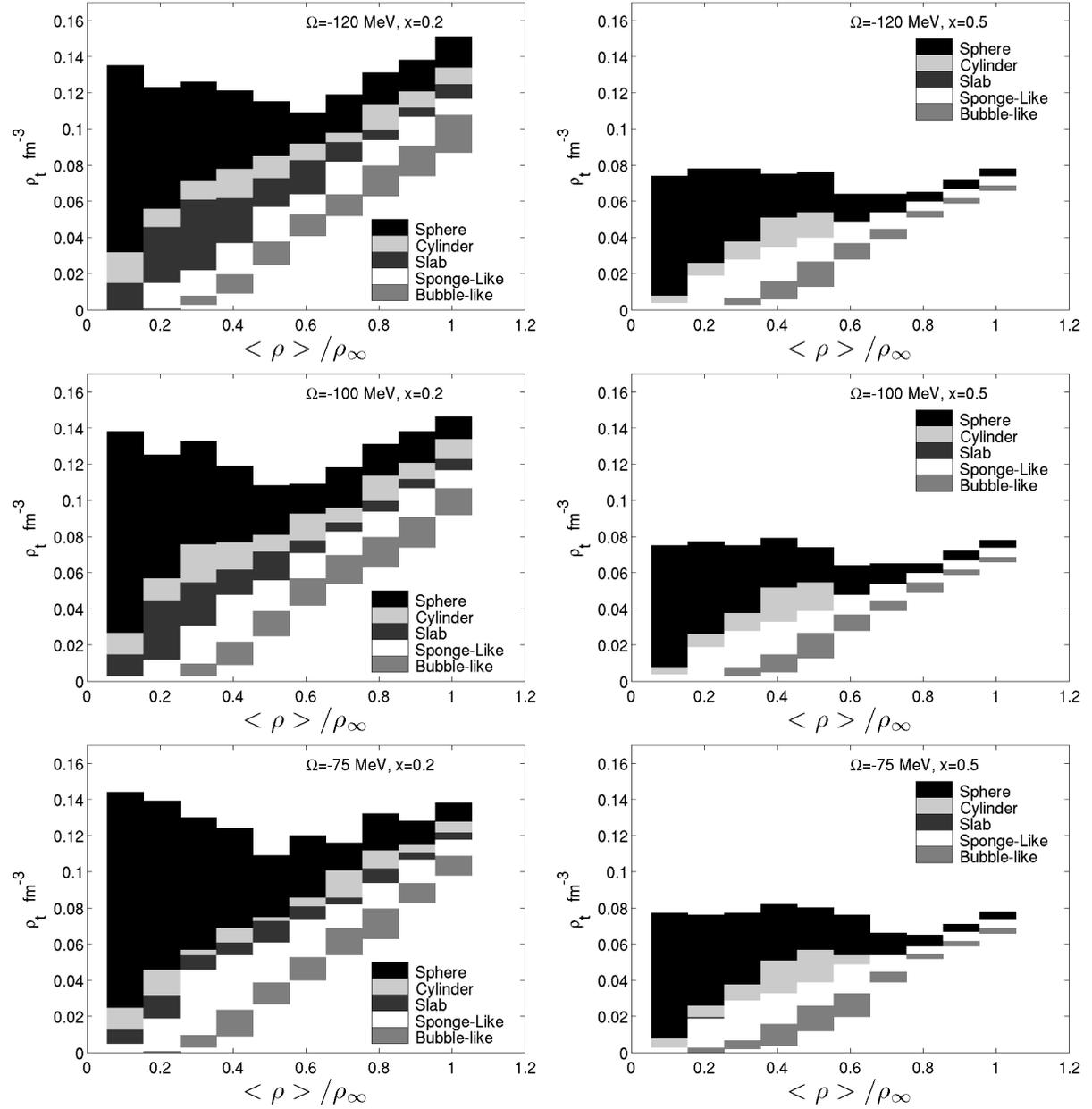


FIG. 5.5 – Densité seuil de neutrons en fonction de la densité moyenne macroscopique normalisée à la densité de saturation pour différentes valeurs de Ω et deux fractions protoniques : $x=0.2$ (à gauche) et $x=0.5$ (à droite). Les différentes structures sont données en échelles de gris.

5.4 Fluctuations et perturbations du réseau cristallin initial

L'investigation de la formation de structures géométriques exotiques a été entreprise précédemment dans une approche de champ moyen pure, sans source de fluctuations potentielle. Cette approche est aussi dynamique, dans le sens où une faible énergie est communiquée essentiellement aux degrés de liberté collectifs, de façon à ce que le système nucléaire étudié puisse explorer différentes configurations géométriques d'énergies extrêmement proches, comme on s'y attend dans la croûte des étoiles à neutrons. En cohérence avec le contexte donné par les étoiles à neutrons, la température des système a été considérée dans un premier temps comme étant nulle. Conformément au cadre inhérent à une approche dynamique, des conditions initiales doivent être formulées.

Bien évidemment de multiples conditions initiales peuvent être envisagées, mais compte tenu du contexte, plusieurs d'entre elles présentent un intérêt particulier. Il a donc été regardé plus spécifiquement les cas de différentes structures de réseaux cristallins, dont les sites sont occupés par des gouttes de matière nucléaires de différentes natures. Dans une première exploration le réseau a été pris homogène dans ses caractéristiques nucléaires, mais peut aisément être généralisé à des configurations hétérogènes.

Dans une première étape il a été fait un choix délibéré de partir de réseaux cubiques simples, dont on sait que relativement à l'interaction Coulombienne il n'est pas a priori le plus favorable énergétiquement, et bien que par ailleurs, les densités moyennes macroscopiques explorées impliquent des proximités spatiales où s'imbriquent étroitement les composantes répulsives aussi bien de l'interaction Coulombienne que nucléaire. On s'attend en conséquence dans cette configuration à générer possiblement des états métastables, dont les symétries pourraient être brisées par différentes sources de fluctuations. C'est la raison pour laquelle nous avons porté une attention particulière à contrôler que les systèmes n'étaient pas perturbés par les fluctuations d'origine numérique, et qu'en conséquence les fluctuations d'origine physique pourraient être analysées en toute confiance. Les résultats des sections précédentes en attestent.

L'impact et la réponse de systèmes nucléaires aux perturbations, en particulier dans le cas de fortes asymétries en isospin est bien entendu d'importance, comme le souligne différents travaux [93], [94]. Ils mettent en évidence que la croûte interne des étoiles à neutrons constitue un système extrêmement riche et compliqué siège d'effets antagonistes qui pourraient s'avérer conduire à des phases désordon-

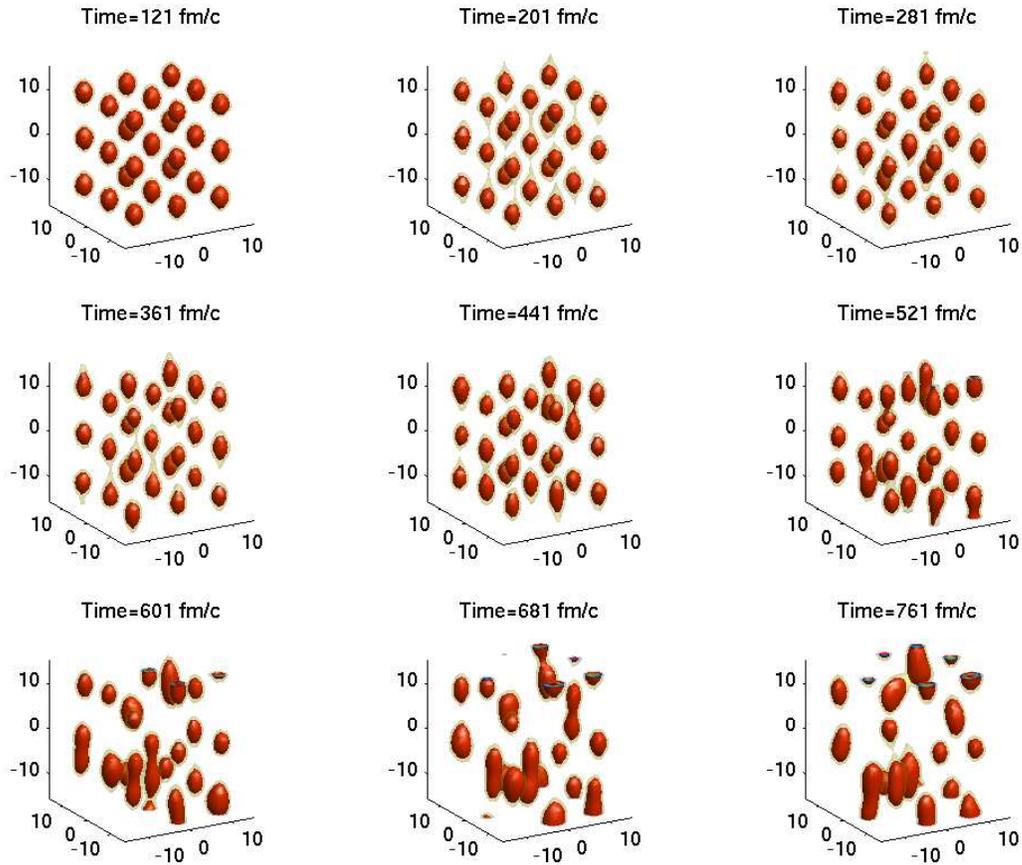


FIG. 5.6 – Evolution temporelle d'un système nucléaire constitué initialement d'un réseau cristallin de noyaux d'oxygène très faiblement écartés des sites du réseau pour en briser les symétries, fraction protonique $x=0.5$, réseau cubique simple, avec une densité moyenne de 0.1 fois la densité de saturation de la matière nucléaire

nées. Bien que l'énergie soit une fonction lentement variable avec les positions, les déformations spatiales ont un impact important sur les états à une particule, des phénomènes d'interférence sont susceptibles de se produire quand des noyaux sont déplacés de leur position d'équilibre initial. Il est ainsi vraisemblable que des réseaux déformés ou avec défauts soient ainsi favorisés.

Pour apporter quelques éléments de réponse, nous allons présenter une première étude, qui compte tenu des remarques formulées précédemment a consisté à déplacer très faiblement et de façon aléatoire les noyaux par rapport aux sites de différents types de réseaux cristallins cubiques initiaux. L'investigation systéma-

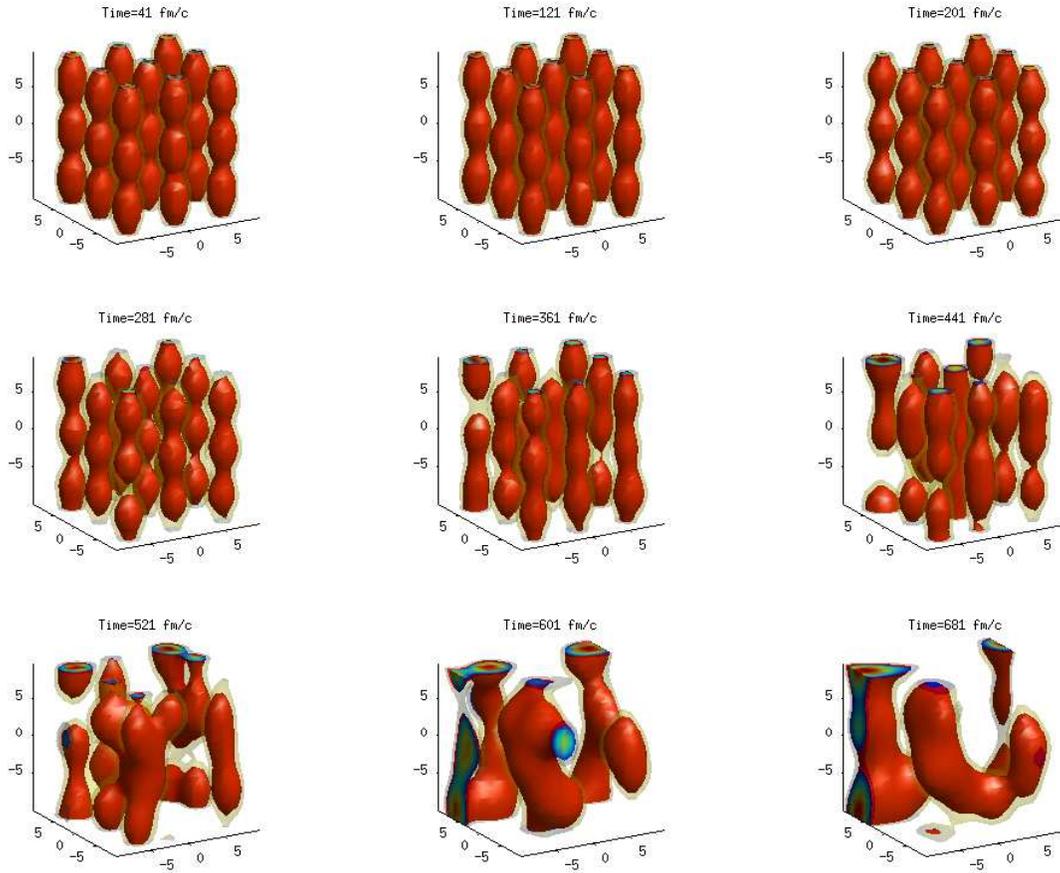


FIG. 5.7 – Evolution temporelle d'un système nucléaire constitué initialement d'un réseau cristallin de noyaux d'Oxygène très faiblement écartés des sites du réseau pour en briser les symétries, fraction protonique $x=0.5$, réseau cubique simple, avec une densité moyenne de 0.4 fois la densité de saturation de la matière nucléaire

tique est en cours et la présentation qui en sera faite ne sera donc pas exhaustive. Pour commencer avec la figure (5.6) nous allons présenter les effets d'une très faible perturbation de la position des sites d'un réseau cubique simple, site occupés par des noyaux d'oxygène de fraction protonique $x=0.5$, sachant qu'en absence de perturbation la dynamique en champ moyen pure préserve les symétries pendant plusieurs milliers de fm/c. On remarque sur la figure (5.6) que cette fois ci, pour une densité moyenne macroscopique de 0.1 fois la densité de saturation de la matière nucléaire, les symétries sont brisées, et comme on s'y attend la matière se réorganise en formant des fragments de plus grande taille.

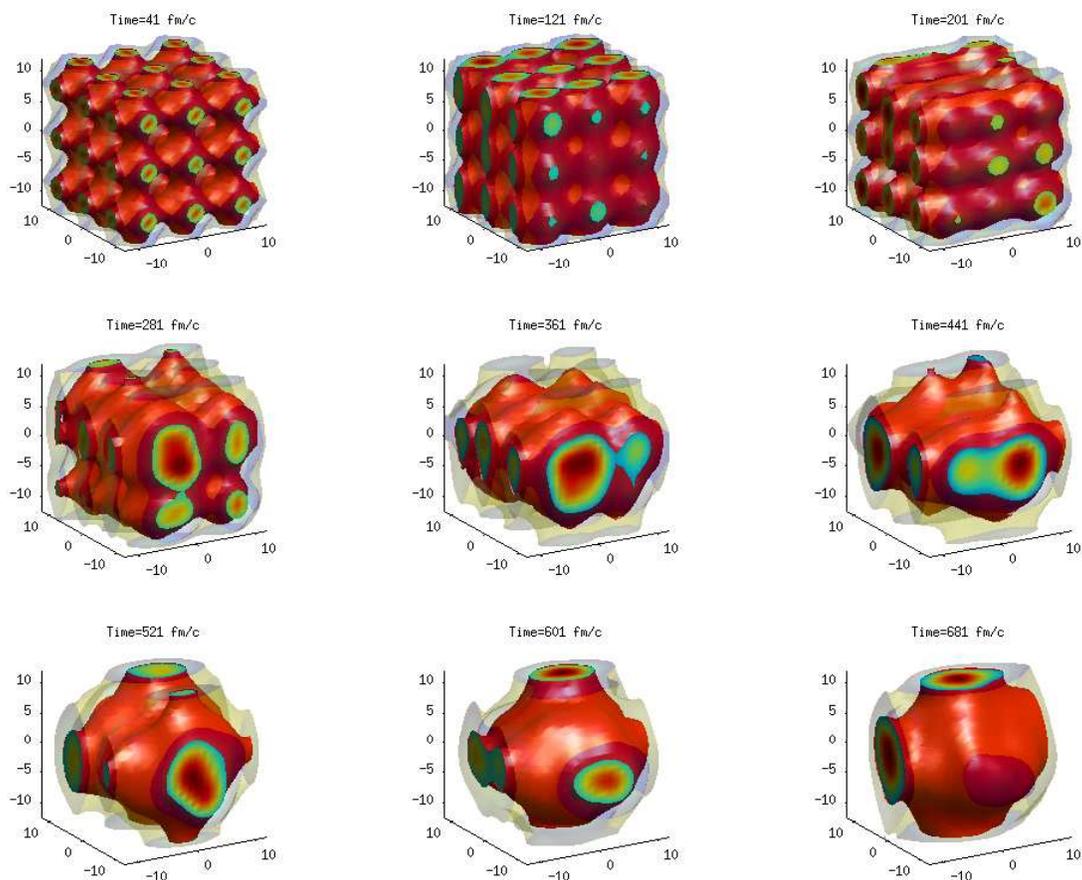


FIG. 5.8 – Evolution temporelle d'un système nucléaire constitué initialement d'un réseau cristallin de noyaux d'Oxygène très faiblement écartés des sites du réseau pour en briser les symétries, fraction protonique $x=0.2$, réseau cubique simple, avec une densité moyenne de 0.4 fois la densité de saturation de la matière nucléaire

La figure 5.7 montre maintenant un exemple de configuration lorsque la densité moyenne macroscopique est prise comme étant 0.4 fois la densité de saturation de la matière nucléaire. A cette densité moyenne les faibles perturbations initiales font apparaître de fortes fluctuations et réorganisation dans les fragments, qui ont bien entendu tendance à former des entités plus importantes. Ce comportement est à comparer avec celui émergeant dans la figure 5.8 qui montre l'évolution du système pour une même densité macroscopique moyenne, mais une fraction protonique plus faible. La diminution de la fraction protonique s'accompagne d'une plus grande diffusivité des fonctions d'onde des neutrons, voire de leur délocalisation. Un complément d'étude sur la topologie du système accompagné d'une prolonga-

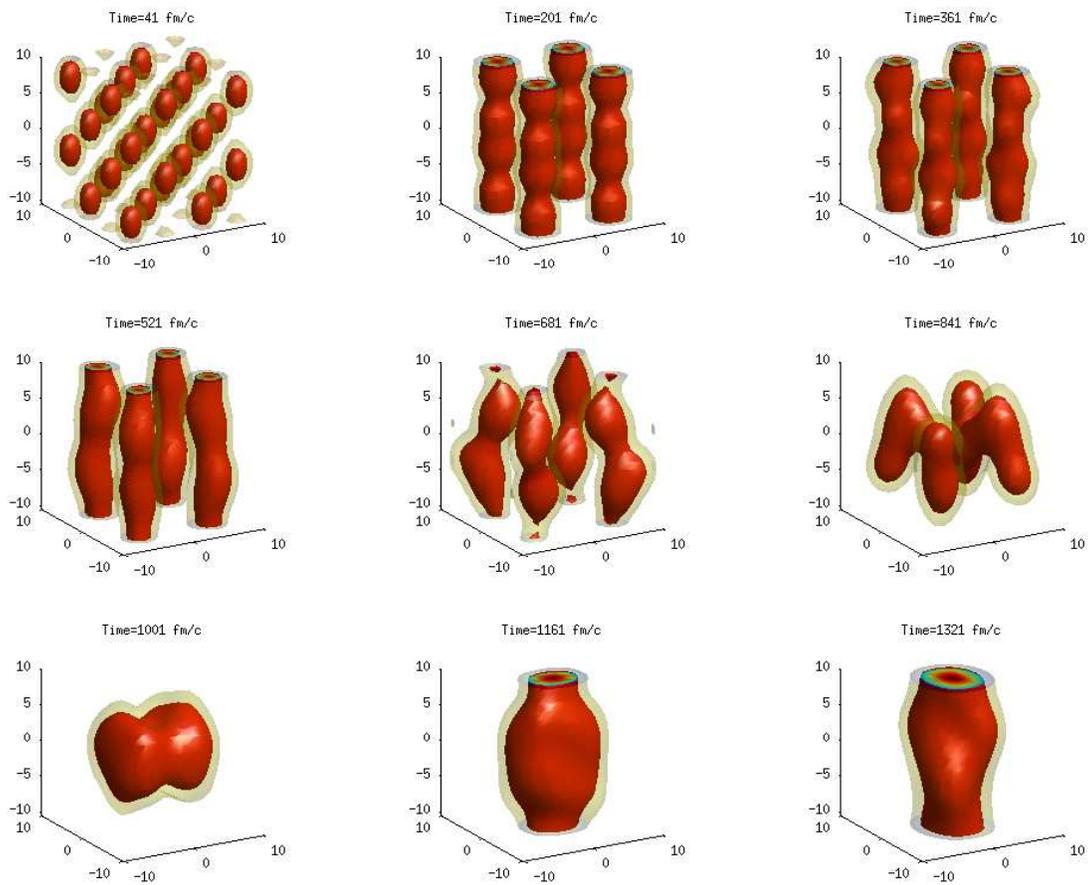


FIG. 5.9 – Evolution temporelle d'un système nucléaire constitué initialement d'un réseau cristallin de noyaux d'Oxygène très faiblement écartés des sites du réseau pour en briser les symétries, fraction protonique $x=0.5$, réseau cubique Faces centrées, avec une densité moyenne de 0.4 fois la densité de saturation de la matière nucléaire

tion de la dynamique doit permettre une analyse précise des transitions engagées.

Des éléments d'informations relatifs à l'impact de la structure cristalline sont abordés par l'intermédiaire de la figure 5.9, qui montre le comportement du système pour une densité macroscopique moyenne de 0.4 fois la densité de saturation de la matière nucléaire. Dans le cas d'un réseau cubique à faces centrées, on constate que malgré les faibles perturbations aléatoires des positions des sites, le système tente de préserver des symétries, en privilégiant des structures filamenteuses, qui finalement, en suivant la tendance observée précédemment ont pour effet d'accroître

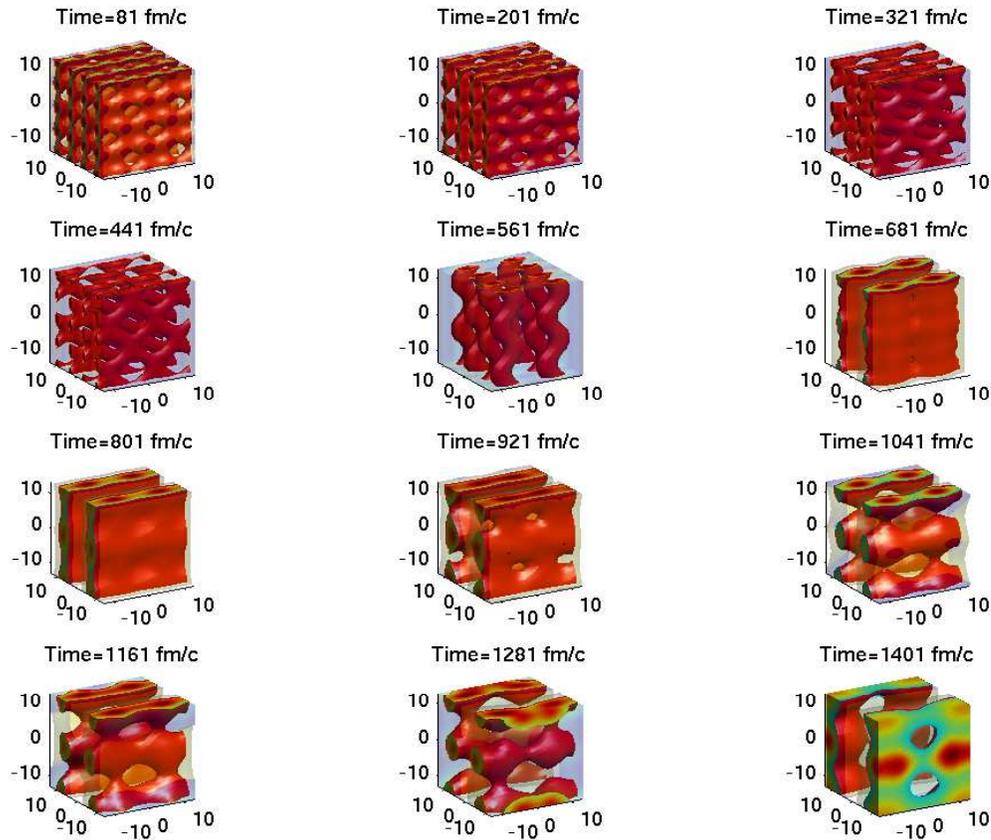


FIG. 5.10 – Evolution temporelle d'un système nucléaire constitué initialement d'un réseau cristallin de noyaux d'oxygène très faiblement écartés des sites du réseau pour en briser les symétries, fraction protonique $x=0.2$, réseau cubique Faces centrées, avec une densité moyenne de 0.4 fois la densité de saturation de la matière nucléaire

la taille des fragments, vont conduire dans le domaine de la supercellule a un seul filament.

Cette tendance à vouloir préserver les symétries et un comportement structuré dans le cas d'un système partant initialement d'un réseau cubique à faces centrées, est également observé sur la figure 5.10, où la tendance semble encore amplifiée par l'augmentation de l'asymétrie en isospin qui dans ce cas atteint une valeur de 0.2. A titre illustratif la figure 5.11 donne l'évolution du système ayant initialement une configuration de réseau cubique corps centré, qui comme indiqué voit ses sites

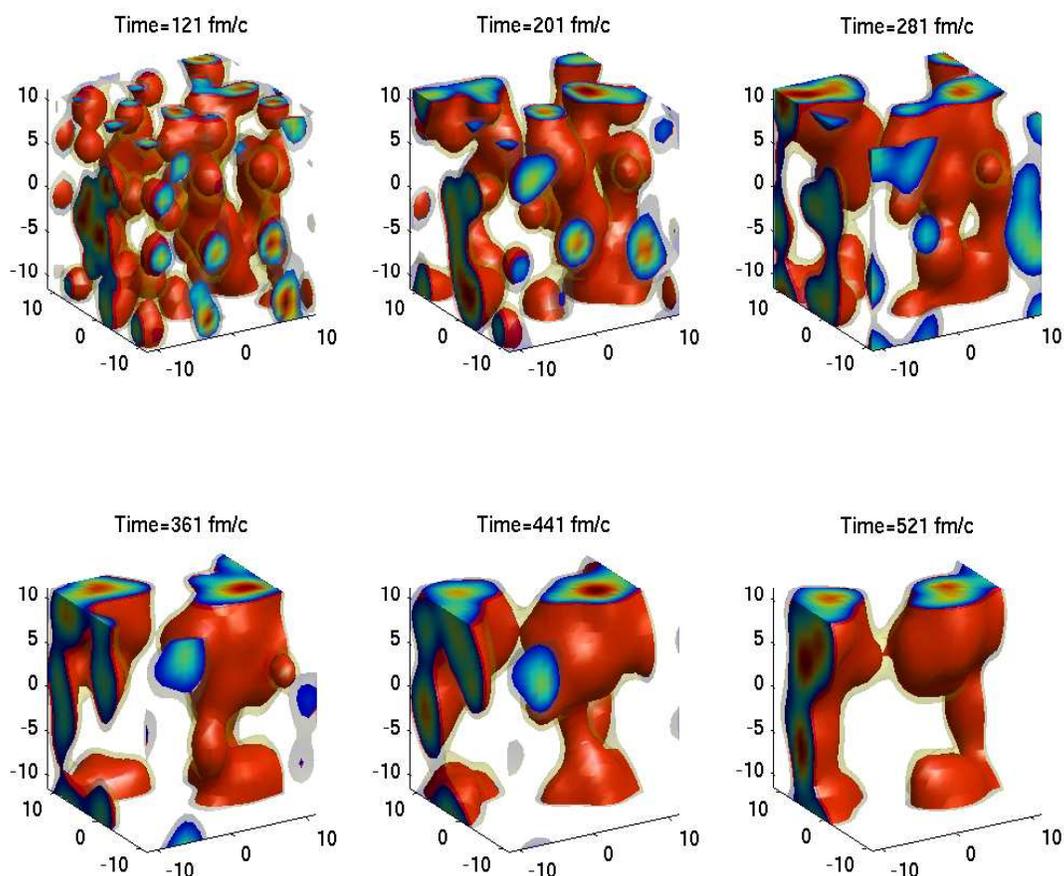


FIG. 5.11 – Evolution temporelle d'un système nucléaire constitué initialement d'un réseau cristallin de noyaux d'oxygène très faiblement écartés des sites du réseau pour en briser les symétries, fraction protonique $x=0.5$, réseau cubique corps centré, avec une densité moyenne de 0.4 fois la densité de saturation de la matière nucléaire

subir de très faibles déplacements aléatoires. Seul le cas d'une fraction protonique de 0.5 est illustré pour ce réseau, taille déjà assez importante, le traitement du cas d'une fraction protonique de 0.2 est en cours.

Tout en conservant une structure de réseau cubique homogène, il est aussi intéressant de comprendre l'influence de la nature des noyaux participant à cette configuration initiale. Ceci est illustré dans la figure 5.12, où on observe un comportement assez différent de celui manifesté dans la figure 5.6 correspondant toutefois au même cas de densité macroscopique moyenne de 0.1 fois la densité de saturation

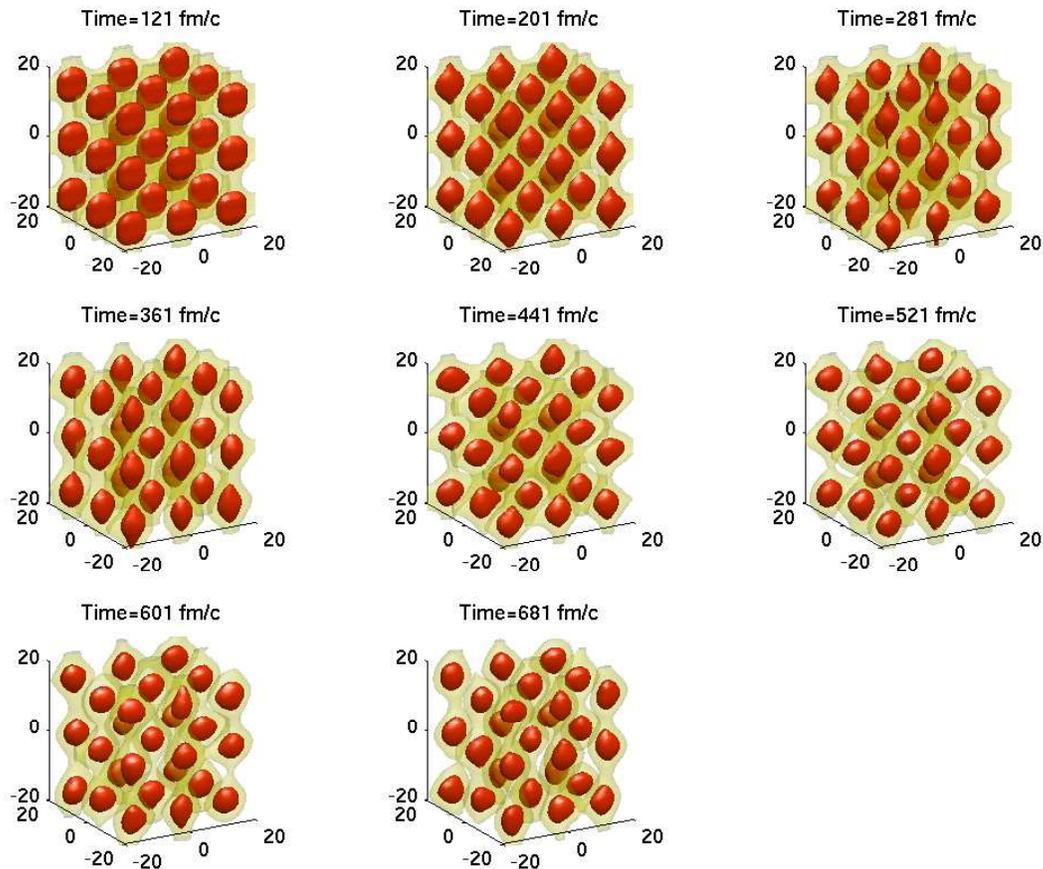


FIG. 5.12 – Evolution temporelle d'un système nucléaire constitué initialement d'un réseau cristallin de noyaux de fer très faiblement écartés des sites du réseau pour en briser les symétries, fraction protonique $x=0.5$, réseau cubique simple, avec une densité moyenne de 0.1 fois la densité de saturation de la matière nucléaire

de la matière nucléaire. On remarque en effet dans la figure (5.12) que le réseau cubique simple de noyaux de fer oeuvre à préserver les symétries initiales, quand il n'y parvient pas dans le cas du réseau cubique simple de noyaux d'oxygène, tel qu'on peut le constater sur la figure 5.6. Ce comportement est aussi remarqué sur les figures 5.13 et 5.14 qui donnent les évolutions associées à des réseaux cubiques de noyaux de Fer, dans le cas de densité macroscopique moyenne de 0.4 fois la densité de saturation de la matière nucléaire. On observe dans ces deux cas que des configurations de type plaques se manifestent.

Ces diverses études demandent à être prolongées de façon systématique, pour

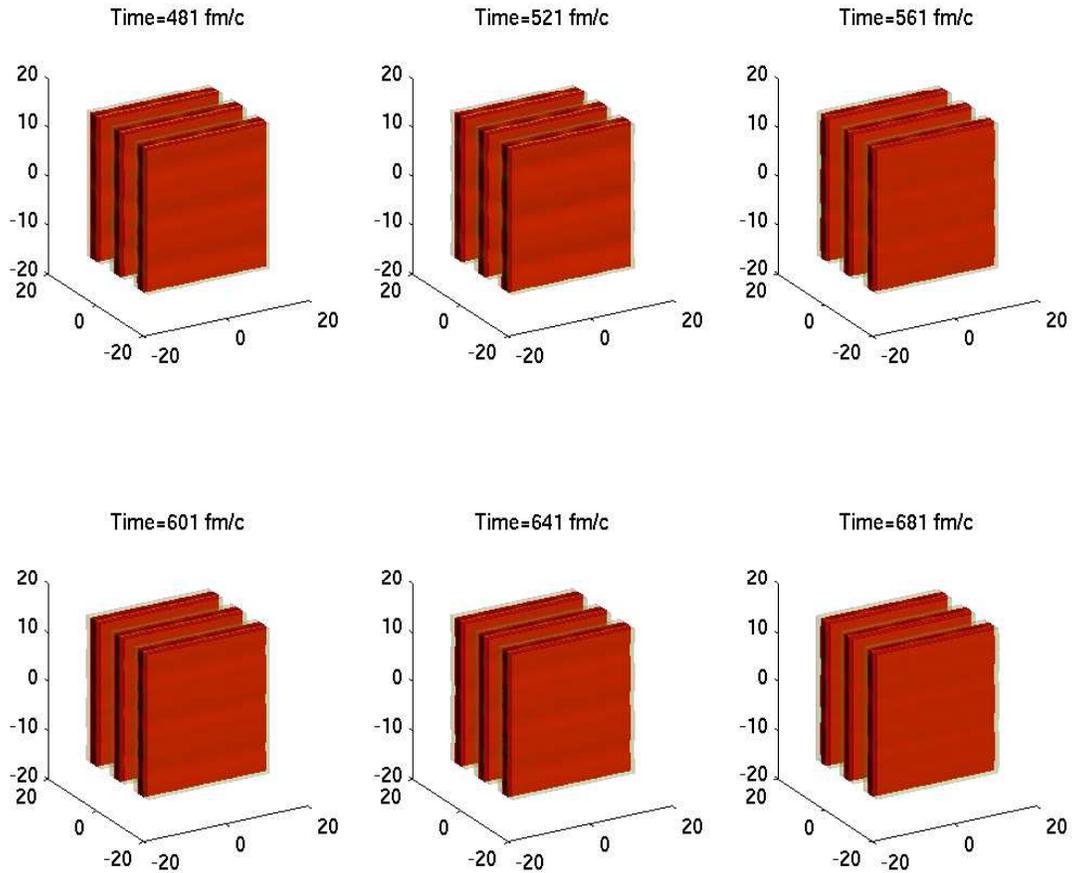


FIG. 5.13 – Evolution temporelle d'un système nucléaire constitué initialement d'un réseau cristallin de noyaux de fer très faiblement écartés des sites du réseau pour en briser les symétries, fraction protonique $x=0.5$, réseau cubique simple, avec une densité moyenne de 0.4 fois la densité de saturation de la matière nucléaire

évaluer différents effets liés par exemple à la nature des réseaux, leur hétérogénéité, le type des noyaux sur site, mais aussi différentes sources de fluctuations notamment microscopiques, ainsi que l'influence de la température.

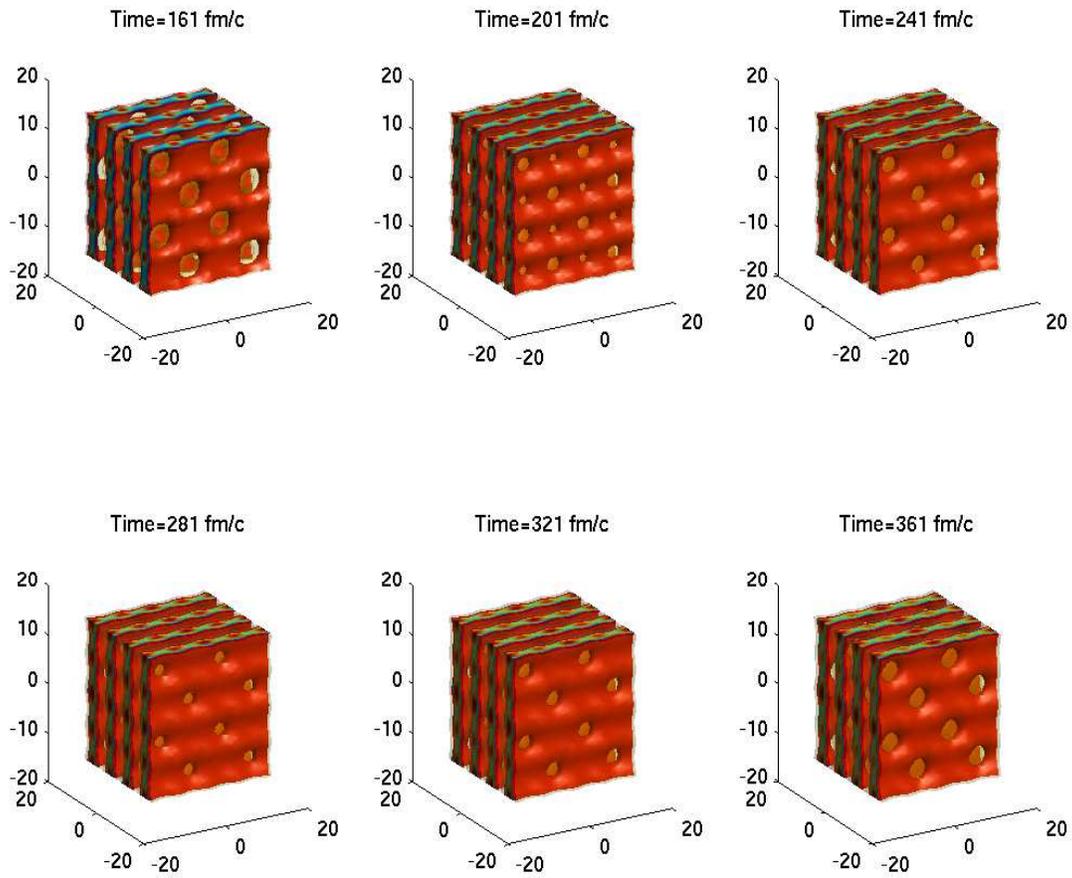


FIG. 5.14 – Evolution temporelle d'un système nucléaire constitué initialement d'un réseau cristallin de noyaux de fer très faiblement écartés des sites du réseau pour en briser les symétries, fraction protonique $x=0.5$, réseau cubique faces centrées, avec une densité moyenne de 0.4 fois la densité de saturation de la matière nucléaire

Chapitre 6

Conclusions et Perspectives

L'objet de ce manuscrit a été de présenter mes travaux sur l'étude des transitions entre structures exotiques au sein des astres compacts réalisés dans le cadre de mon doctorat. Le contexte physique abritant ces phénomènes a été présenté lors des deux premiers chapitre de ce manuscrit. Il a été vu que l'étude des astres compacts est un champ pluridisciplinaire de la physique qui fait appel à la relativité générale, l'astrophysique, l'hydrodynamique, la physique du solide ou la physique nucléaire. Dans le deuxième chapitre, après un parcours de la littérature il apparaît qu'il est nécessaire de fournir des modélisations qui regroupent les avantages d'une simulation dynamique, comme les approches QMD [49], et ceux d'un calcul statique, comme les études de type Hartree-Fock.

Le modèle DYWAN présente ce double avantage. Formellement, DYWAN calcule les états d'un noyau donné, puis construit un réseau infini et le laisse évoluer dans le temps en résolvant les équations étendues de Hartree-Fock. Cette deuxième phase se fait au delà de l'approximation de Wigner-Seitz, ni les symétries, ni les formes des noyaux ne sont contraintes. En ce sens il se rapproche des simulations dynamiques QMD [49]. ceci est un avantage sur les simulations statiques, comme par exemple les simulations de type Hartree-Fock. Les modèles QMD reposent sur des principes de physique classique, et n'ont qu'une approche effective des effets de la mécanique quantique. En particulier le principe de Pauli n'est pris en compte que via un potentiel effectif. Dywan innove en reposant sur un cadre formel quantique, en résolvant les équations TDHF. Ceci offre l'avantage de pouvoir prendre en compte les effets quantiques comme les effets de couches, le principe de Pauli, la distribution de Fermi Dirac.

Les nouvelles expériences sur faisceaux radioactif comme SPIRAL2, FAIR, ou RIA offrent une nouvelle voie dans l'exploration de l'équation d'état nucléaire loin de la vallée de stabilité. SPIRAL 2 possède un programme d'étude de noyaux

fortements asymétriques et riches en neutrons. Cette région de l'équation d'état largement incertaine possède de fortes implications en astrophysique, et spécialement dans la compréhension des étoiles à neutrons et supernovae. La réalisation de telles expériences demandera des modèles théoriques (spécialement dans le cadre de la physique de l'isospin [51]) et dynamiques adaptés, or DYWAN est initialement un code provenant des collisions d'ions lourds dans le domaine des basses énergies, il a déjà obtenu dans sa version actuelle simplifiée des résultats en accord avec les données expérimentales, sur l'analyse de la peau de neutrons ou de la section efficace nucléon-nucléon.

Au moment où l'astrophysique nécessitent de plus en plus un recours à la physique nucléaire pour la compréhension d'objets comme les étoiles à neutrons, l'utilisation d'un modèle adapté à ces deux domaines est d'un intérêt particulier.

Nous avons vu dans le chapitre 5 que les premiers résultats obtenus avec la version "astres compacts" de DYWAN sont en relativement bon accord avec la littérature, En particulier la séquence de structure trouvée à température nulle est en relativement bon accord avec celle du modèle QMD des auteurs [49]. Ce fait est particulièrement intéressant, pour la version simplifiée de l'interaction utilisée pour ces premières simulations. Nous avons vu que les structures formées sont sensibles à l'équation d'état, et plus particulièrement sa partie isovectorielle. Ce fait a été confirmé récemment par [71]. Autre fait mis en avant dans ce manuscrit est la sensibilité à la symétrie du réseau initial, par l'étude de 3 types de réseaux : cubique simple avec lequel ont été obtenus les résultats précédents, cubique face centrée et cubique corps centré. La composition de ces réseaux est une autre donnée qui a un fort impact sur la dynamique. Dans ce chapitre a été comparée l'évolution d'un réseau d'oxygène à un réseau de fer pour des densités et des fractions protoniques identiques, les structures formées diffèrent d'un cas à l'autre.

Ces travaux montrent l'intérêt d'utiliser un modèle comme DYWAN dans l'étude des étoiles à neutrons. DYWAN tel qu'il a été adapté actuellement, reste une version simplifiée vouée à être améliorée. Pour le modèle lui-même il est important de perfectionner la force effective utilisée pour l'interaction nucléaire. Des travaux en ce sens ont été abordés, pour implémenter une interaction de type Gogny. La prise en compte de la température finie du système et des fluctuations sous-jacentes, est une possibilité offerte par le modèle, mais dont l'étude reste à effectuer. Sur l'écorce de l'étoile, une étude systématique de l'effet des conditions initiales est en cours. il serait aussi intéressant de réaliser ces calculs sur des super-cellules plus importantes pour analyser les effets de taille finie. Cela nécessiterait des capacités de calcul plus importantes. Enfin dans le but d'apporter des

données pour les modèles de dynamique global de l'astre (refroidissement, supernovae, glitches) il pourrait être envisagé de calculer les coefficients de transport dans la matière modélisée. En particulier la capacité calorifique, la section efficace neutrino-matière, l'élasticité.

Chapitre 7

Annexe A : Les fonctionnelles de Minkowski

7.0.1 Présentation rapide des fonctionnelles de Minkowski

L'analyse morphologique de l'image par les intégrales géométriques (appelée MIA) est un outil utilisé dans de nombreux domaines pour tirer des informations quantitatives à partir d'images. Elle est notamment utilisée en astrophysique pour analyser la distribution des galaxies, et des amas galactiques, ou encore en médecine pour étudier la solidité des os. Bien que facile à mettre en oeuvre numériquement elle repose sur une théorie mathématique complexe ([66]).

La MIA utilise des fonctionnelles d'images¹ pour tirer les informations utiles. Les fonctionnelles d'images additives, Hadwiger a prouvé qu'il en existe exactement une de plus que le nombre de dimensions de l'image. Dans un espace à trois dimensions, qui nous intéresse, ainsi qu'à deux dimensions ces fonctionnelles additives sont appelées fonctionnelles de Minkowski et représentent : la surface de l'objet, sa courbure moyenne, son volume, et sa caractéristique d'euler (3D). Cette dernière représente une mesure topologique de l'image. Elle est définie comme suit :

$$\chi_e = n_{elements} - n_{tunnels} + n_{cavites}$$

Sur la figure 7.1 est représenté un Tore avec sa caractéristique d'Euler. Un tore plein est constitué d'un élément et d'un tunnel, ce qui donne une caractéristique d'Euler égale à zéro.

Pour utiliser facilement ces fonctionnelles nous avons besoin de travailler sur des images bicolores : un fond blanc, et une image constituée de pixels noirs. La

¹fonctionnelles dont le domaine d'application est défini par une image

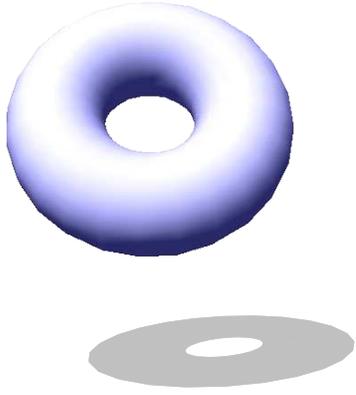


FIG. 7.1 – La caractéristique d’Euler d’un tore est de 0, en effet nous avons un tunnel, et un élément.

première étape est donc de traduire une image multicolore en une image bicolore. En ce qui concerne l’image, elle est composée par la fonction densité de matière nucléaire, qui prend des valeurs continues sur tout un domaine. Pour traduire cette densité en une image bicolore on choisit un seuil de densité. Chaque point du réseau ayant une densité supérieure à ce seuil sera remplacé par un pixel noir.

La variation de ce seuil nous permet d’étudier les différents états de notre système : un seuil haut nous permettra d’étudier les parties solides, un seuil bas de densité nous fournira une indication sur les phases gazeuses, liquides.

Dans le cadre d’une étude d’un réseau cristallin cubique simple composé de 27 noyaux, il existe une relation quasiment bijective entre la valeur de la caractéristique d’Euler et le type de forme. Ces fonctionnelles peuvent nous apprendre énormément sur la structure de la matière étudiée : par exemple une matière spongieuse comme le fromage suisse (structure à bulles) indiquée plus haut aura un volume important, une faible surface et une caractéristique d’Euler importante, alors qu’une structure spaghetti (des cylindres) aura un faible volume, une surface importante et une caractéristique d’Euler moyenne. Voir la figure (5.1) pour une représentation de ces structures. Utiliser ces fonctionnelles nous permet de donner une information sur la structure de la matière rapidement, traitable informatiquement, nous offrant la possibilité de faire des études systématiquement efficace.

7.1 Cadre Formel

Nous allons ici présenter, de façon simplifiée, le cadre mathématique qui permet le traitement d'images par les fonctionnelles de Minkowski. Nous allons en premier lieu présenter quelques définitions de topologie nécessaires à la bonne compréhension de cette théorie.

7.1.1 Quelques notions de topologie

Ensemble convexe

Un ensemble K convexe, est un ensemble dont les points du segment reliant tout couple d'éléments de K sont inclus dans K . illustration figure (7.2).

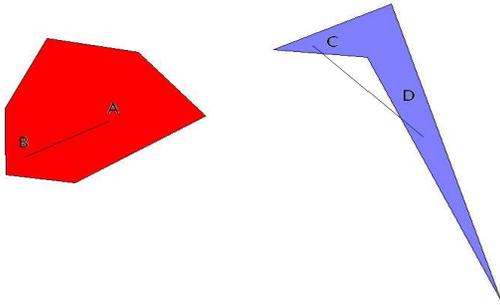


FIG. 7.2 – Ensemble convexe : la figure de gauche est une ensemble convexe. la figure de droite n'est pas un ensemble convexe, on voit que le segment $[C,D]$ possède des points à l'extérieure de l'ensemble.

Ensemble parallèle

Soit L un ensemble de points. L'union des boules ouvertes de rayon r et de centre chacun des points de L est appelé ensemble parallèle, et est noté L_r . Figure (7.3).

Intéressons nous maintenant à l'aire de ces ensembles (sauf pour la ligne cas 1D, où seul la longueur est pertinente) :

$$A(D_r) = \pi(a+r)^2 = \pi a^2 + 2\pi ar + \pi r^2 \quad (7.1)$$

$$A(C_r) = a^2 + 4ar + \pi r^2 \quad (7.2)$$

$$A(T_r) = \frac{\sqrt{3}}{4}a^2 + 3ar + \pi r^2 \quad (7.3)$$

On en déduit une formule générale pour le calcul de l'aire :

$$A(k_r) = A(k) + U(k)r + \pi r^2 \quad (7.4)$$

où $A(K)$, et $U(K)$ sont respectivement, l'aire, et le périmètre de l'ensemble K .

La formule de Steiner [67], généralisée à un espace de dimension quelconque d :

$$v^{(d)}(K_r) = \sum_{\nu=0}^d C_\nu^{(d)} W_\nu^{(d)}(K) r^\nu \quad (7.5)$$

où sont les $W_\nu^{(d)}(K)$ fonctionnelles de Minkowski :

$$W_0^{(3)}(K) = V(K), \text{ Volume} \quad (7.6)$$

$$W_1^{(3)}(K) = \frac{1}{3}S(K), \text{ Surface} \quad (7.7)$$

$$W_2^{(3)}(K) = \frac{2\pi}{3}B(K), \text{ Courbure moyenne} \quad (7.8)$$

$$W_3^{(3)}(K) = \frac{4\pi}{3}, \text{ Caractéristique d'Euler} \quad (7.9)$$

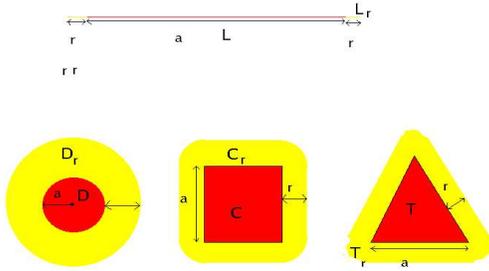


FIG. 7.3 – Illustration des ensembles parallèles. l'union de la partie jaune et rouge forme l'ensemble parallèle de rayon r de l'ensemble rouge. L_r forme l'ensemble parallèle de L , C_r de C , D_r de D et T_r de T

Invariance par déplacement

On dit d'une fonctionnelle ϕ qu'elle est invariante par déplacement si : $\phi(gk) = \phi(k)$. Où g est un élément du groupe de toutes les translations et de toutes les rotations. En appliquant cette condition sur nos fonctionnelles cela nous assure d'avoir des grandeurs indépendantes du système de coordonnées utilisé.

fonctionnelles C-additive

Une fonctionnelle C-additive est une fonctionnelle qui vérifie l'égalité :

$$\phi(K_1 \cup K_2) = \phi(K_1) + \phi(K_2) - \phi(K_1 \cap K_2) \quad (7.10)$$

Où K_1 et K_2 sont des éléments de l'ensemble de tous les convexes tels que $K_1 \cup K_2$ le soit aussi.

Cette dernière condition est extrêmement restrictive, sachant que la plupart de nos images ne sont pas forcément des ensembles convexes. Hadwiger généralise les précédentes définitions, données sur des ensembles convexes, à un nouveau type d'objet mathématiques : les anneaux convexes.[67]

Anneaux convexes

Un anneau convexe est un ensemble qui peut être exprimé comme l'union finie d'ensembles convexes :

$$A = \cup_i^n K_i \quad (7.11)$$

Où K_i est un ensemble convexe.

Théorème de Hadwiger

Une fonctionnelle ϕ , invariante par déplacement, continue, et C-additive peut s'écrire :

$$\phi(K) = \sum_{\nu=0}^d a_\nu W_\nu^d(K) \quad (7.12)$$

où a_ν est un coefficient réel. Donc les fonctionnelles de Minkowski forment un système complet, et il en existe $d+1$ [67].[66]

Hadwiger a montré [67]que son théorème s'appliquait aussi au cas des anneaux convexes. Ce résultat est extrêmement important. En effet, ,pour le cas 3D par exemple, les quatre fonctionnelles utilisé dans notre algorithme² sont les seules existantes, et fournissent donc une mesure complète de la morphologie de notre système. On peut donc décrire notre image en termes d'union de convexe où chaque convexe "unité" est un pixel.

Hadwiger redéfinit la caractéristique d'Euler de la façon suivante :

$$\begin{aligned} \chi(K) &= 1 \text{ si } k \neq \emptyset \\ \chi(K) &= 1 \text{ si } k = \emptyset \end{aligned}$$

et montre qu'elle satisfait aux propriétés d'additivité, de continuité, d'invariance par déplacement, sur les anneaux convexes. De cette conclusion il construit les fonctionnelles de Minkowski pour l'ensemble A sur des anneaux convexes de la façon suivante :

$$W_\nu^{(d)} = \int \chi(A \cap gE_\nu) dg, \nu = 0, \dots, d - 1 \quad (7.13)$$

²Aire, volume, courbure moyenne, caractéristique D'Euler

Où E_ν est un élément de base du plan de dimension ν dans \mathbb{R}^d , et g un élément du groupe de toutes les translations et rotations. Intégré sur ce dernier permet en quelque sorte de déplacer l'élément de base d'un plan de dimension ν (Dans le cas euclidien 3D : aire, volume, courbe) dans tout son espace. On réalise l'intersection avec l'ensemble A , Pour ne pas récupérer les contributions de tout l'espace, mais bien de notre ensemble A .

Calculer les fonctionnelles de Minkowski pour des espaces fermés peut s'avérer compliqué. L'idée est de séparer notre pixel en espace topologique ouvert plus simple. Pour notre cas de pixel en 3D :

Un cube est la réunion : de son intérieur, de ses faces, de ses arêtes, et de ses sommets.

On peut montrer que [68]

$$W_\nu^{(d)}(\check{A}) = (-1)^{d+n+\nu} W_\nu^{(d)}(A), \nu = 0, \dots, d \quad (7.14)$$

Donc pour le pixel $\mathcal{P}(\mathbf{x}, \mathbf{q})$ on obtient :

$$W_\nu^{(d)}(\mathcal{P}) = \sum_m W_\nu^{(d)}(\check{N}_m) n_m(\mathcal{P}) \quad (7.15)$$

où n_m représente le nombre d'espaces topologiques ouvert dans \mathcal{P} . Pour nos pixels cubes : 1 volume N_3 , 6 faces N_2 , 8 arête N_1 , 8 sommet (vertex) N_0 .

Il apparait que l'algorithme de calcul de ces fonctionnelles sera simple a mettre en oeuvre, malgré la complexité mathématique du formalisme : il suffit de tester pour chacun des pixels si il est noir ou non, si oui alors regarder les vertex, faces, et arêtes déjà utilisés et de sommets selon (7.15) et en utilisant les équations (7.14). Ce qui nous donne pour notre cas, les équations suivantes :

$$V = n_e \quad (7.16)$$

$$S = -6n_c + 2n_f \quad (7.17)$$

$$2B = 3n_c - 2n_f + n_e \quad (7.18)$$

$$\chi = -n_c + n_f - n_e + n_v \quad (7.19)$$

Bibliographie

- [1] *Landau* Physik Zeito, sowjetunion, 285 (1932)
- [2] *W.Baade, F.Zwicky* Phys. Rev. 46 (1934) 76
- [3] *Hewish, et al* Nature 217 (1968) 709-713
- [4] *Gold T.* Nature 218 (1968) 731-732
- [5] J.M.Lattimer, P.Prakash, arXiv :astro-ph/0405262v1
- [6] *Henning Heiselberg* Neutron Star Masses, Radii and Equation of State, arXiv :astro-ph/0201465 v2 16 Feb 2002
- [7] Ericourgoulhon, Objets compacts, poly de cours M2MR Sciences de l'Univers et Technologies Spatiales; Ericourgoulhon, Relativité Générale, poly de cours M2MR Sciences de l'Univers et Technologies Spatiales;
- [8] J.R. Oppenheimer, G.M. Volkov, Phys. Rev. 55,374 (1939)
- [9] J.M.Lattimer, P.Prakash, arXiv :astro-ph/0405262v1
- [10] . Henzla, D. Henzlova, M. Kilburna, G. Verdeb, D. Browna, A. Chbihi, D. Couplanda, J. Elsond M. Famianoe, C. Herlitziusa, S. Hudanf, J. Leea, S. Lukyanova, W. Lyncha, A. Rogersa, A. Sanetullaeva, L. Sobotkad, R. T. de Souza, Z. Y. Suna, B. Tsanga, M. Wallaceg, K. Xua, and M. Youngsa, Nuclear Physics A 834 (2010) 552
- [11] P.Haensel et ie, Neutron stars 1, edition springer (2006)
- [12] *V.R Pandharipand, Nucl. Phys. A178 (1971)123*
- [13] Mesons in Nuclei, vol 3, M.Rho,D. Wilkinson, Edition North-Holland, Amsterdam, 1979; D.B. Kaplan, A.E Nelson. phys. Lett. B175, 57(1986); D.B. Kaplan, A.E Nelson. phys. Lett. B179, 409 E (1986)
- [14] J.C Collins, M.J. Perry, phys. Rev. Lett. 34, 1353 (1975)
- [15] A.Burrows, D.Klein, R.Gandhi, Phys. Rev. D 45,(2000) 45; A.Burrows, J.M. Lattimer, astrophys. J.307, 178(1986);
- [16] K.Hirata et al., Phys.Rev. Lett. 58,1490(1987);
- [17] R.M.Bionta et al, Phys. Rev. Lett. 58, 1494(1987);

- [18] A.Burrows, Nature 403, 727(2000)
- [19] *J.M.Lattimer and M.Prakash* The Physics of neutron star
- [20] J.W.Negele and D.Vautherin Nucl. Phys. A 207 (1973) 298-320
- [21] *R.P.Feynman, N.Metropolis, and E.Teller* Phys. Rev. 75 (1949),1561
- [22] G.Baym, C.Pethick, and P.Sutherland Astrophys. J 170, 299(1971)
- [23] *Salpeter E.E* Astrophys.J 134 (1961) 669-682
- [24] P.Haensel, B. Pichon, Astron. Astrophys. 248, 313-318
- [25] *Buchler J.R, Barkat Z.* Phys. Rev. Lett. 21 (1971) 48-51
- [26] *S.B. Ruster, M.Hempel, and J.Schaffner-Bielich* Phys. Rev. C 73,(2006) 035804
- [27] P. Napolitani, P. Chomaz, F. Gulminelli, K. Hasnaoui, Phys. Rev. Lett. 98 (2007) 131102.
- [28] P. Chomaz, F. Gulminelli, C. Ducoin, P. Napolitani, K. Hasnaoui, Phys. Rev. C 75 (2007) 065805.
- [29] D.G. Ravenhall, C.J. Pethick, J.R. Wilson, Phys. Rev. Lett. 50 (1983) 2066.
- [30] M. Hashimoto, H. Seki, M. Yamada, Prog. Theor. Phys. 71 (1984) 320.
- [31] D. Z. Freedman, D. N. Schramm, and D. L. Tubbs, Annu. Rev. Nucl. Sci. 27 (1977) 167 .
- [32] J. Margueron, J. Navarro and P. Blottiau, Phys. Rev. C 70, 028801 (2004).
- [33] M. Liebendoerfer, O. E. B. Messer, A. Mezzacappa, S. W. Bruenn, C. Y. Cardall, and F. K. Thielemann, astro-ph/ 0207036.
- [34] C. J. Horowitz, Phys. Rev. D 55, 4577 (1997)
- [35] C.J. Horowitz, M.A. Pérez-García, J. Pieckarewicz, Phys. Rev. C 69 (2004) 045804.
- [36] C. J. Horowitz, M. A. Pérez-García, J. Carriere, D. K. Berry, and J. Piekarewicz Phys. Rev C70, 065806 (2004)
- [37] H. Sonoda, G. Watanabe, K. Sato, T. Takiwaki, K. Yasuoka, T. Ebisuzaki, Phys. Rev. C 75 (2007) 042801
- [38] Z. Barkat, J.-R. Buchler, L. Ingber, Ap. J. 176 (1972)723
- [39] R. Ogasawara and K. Sato, Prog. Theor. Phys. 68 (1982) 222
- [40] R.D. Williams and S.E. Koonin, Nucl. Phys. A435, 844 (1985)
- [41] C. P. Lorenz, D.G. Ravenhall and C. J. Pethick, Phys. Rev. Lett 70 (1993) 379
- [42] C. J. Pethick and D.G. Ravenhall, Annu. Rev. Part. Sci. 45 (1995) 429.

- [43] G. Baym, H.A. Bethe, C.J. Pethick, Nucl. Phys. A175 (1971) 225 ; D.G. Ravenhall, C.D. Bennett, and C.J. Pethick, Phys. Rev. Lett. 28 (1972) 978 ; K. Oyamatsu, M. Hashimoto and M. Yamada, Prog. Theor. Phys. 72 (1984)373 ; F. Douchin and P. Haensel, Phys. Lett. B 485 (2000) 107 ; G. Watanabe, K. Iida, K. Sato, Nucl. Phys. A 676 (2000) 455 ; ibid 687 (2001) 512 ; ibid 726 (2003) 357.
- [44] C.J. Pethick, D.G. Ravenhall, C.P. Lorentz, Nucl. Phys. A 584 (1995) 675.
- [45] *Carter B., Chamel N, Haensel P.* Nucl. Phys. A 748 (2005) 675-697
- [46] N. Chamel, Nucl. Phys. A 747 (2005) 109 ; N. Chamel, Nucl. Phys. A 773 (2006) 263 ; N. Chamel, S. Naimi, E. Khan, and J. Margueron, Phys. Rev. C 75 (2007) 055806.
- [47] Kittel, Physique du solide, edition Dunod
- [48] P.D. Stevenson, D. Almeded, P.-G. Reinhard and J.A. Maruhn, Nucl. Phys. A 788 (2007) 343.
- [49] G. Watanabe, K. Sato, K. Yasuoka, T. Ebisuzaki, Phys. Rev. C 68 (2003) 035806
- [50] G. Watanabe, K. Sato, K. Yasuoka, T. Ebisuzaki, Phys. Rev. C 69 (2004) 055805
- [51] V. Barana, M. Colonna^{a,b}, V. Grecoc, M. Di Toro^a, Physics Reports 389 (2004) 263
- [52] L. Zamick, Phys. Lett. B 45 (1973) 313.
- [53] B. Friedman, V.R. Pandharipande, Nucl. Phys. A 361 (1981) 501.
- [54] G. Watanabe, K. Sato, K. Yasuoka, T. Ebisuzaki, Phys. Rev. C 68 (2003) 035806 ; G. Watanabe, K. Sato, K. Yasuoka, T. Ebisuzaki, Phys. Rev. C 69 (2004) 055805 ; H. Sonoda, G. Watanabe, K. Sato, T. Takiwaki, K. Yasuoka, T. Ebisuzaki, Phys. Rev. C 75 (2007) 042801 (R).
- [55] G. Baym, H.A. Bethe, C.J. Pethick, Nucl. Phys. A175 (1971) 225 ;
- [56] M. Baldo, C. Maieron, P. Schuck, X. Viñas, Nucl. Phys. A 736 (2004) 241.
- [57] J. Arponen, Nucl. Phys. A 191 (1972) 257.
- [58] K. Oyamatsu, K. Iida, Phys. Rev. C 75 (2007) 015801.
- [59] F. Douchin, P. Haensel, Phys. Lett. B 435 (2000) 107.
- [60] E. Chabanat, P. Bonche, P. Haensel, J. Meyer, R. Schaeffer, Nucl. Phys. A 635 (1998) 231.
- [61] G. Watanabe, T. Maruyama, K. Sato, K. Yasuoka, T. Ebisuzaki, Phys. Rev. Lett. 94 (2005) 031101.
- [62] K.Hasnaoui, These de doctorat caen (2008)

- [63] F. Sebillé, S. Figero, V. de la Mota, Nucl. Phys. A 822 (2009) 51-73
- [64] *Bruno JOUAULT* Thèse de doctorat Nantes (1996)
- [65] *B. Jouault, F. Sebillé, and V. de la Mota* Nucl. Phys. A628 (1998) 119
- [66] *K. Michielsen, H. De Raedt* Integral-geometry morphological image analysis
- [67] *H. Hadwiger* Vorlesungen über Inhalt, Oberfläche und Isoperimetrie, Springer, Berlin, 1957
- [68] *C.N Likos, K.R Mecke, H. Wagner* Statistical morphology of random interfaces in microemulsions, J.Chem.Phys.102(1995)9350-9361.
- [69] B. Jouault, F. Sébillé and V. de la Mota, Nucl. Phys. A 628 (1998) 119.
- [70] P. Ewald, Ann Phys. **64** (1921) 253
- [71] S. Yoshida and H. Sagawa, Phys. Rev. C **73** (2006) 044320.
- [72] C.J. Pethick, D.G. Ravenhall and C.R Lorenz, Nucl. Phys. A **584** (1995) 675.
- [73] R. Balian, Y. Alhassid, H. Reinhardt, Phys. Rep. 131 (1986) 1.
- [74] R. Balian, *école Joliot-Curie 1995*.
- [75] C. K. Chui, *An introduction to wavelets*, Academic Press (1992).
- [76] C. K. Chui, *Wavelets :a tutorial in theory*, Academic Press (1992).
- [77] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloë, *Mécanique quantique, tome 1*, Hermann (1980).
- [78] I. Daubechies, *Ten lectures on wavelets*, Ams Providence (1992).
- [79] B. Jouault, *Application de l'analyse en ondelettes à l'étude de l'espace des phases nucléaires*, Thèse université de Nantes (1996).
- [80] B. Jouault, F. Sébillé, V. de la Mota, Nucl. Phys. A 628 (1998) 119.
- [81] S. Mallat, IEEE Trans. Patt. and Mach. Intell. 11 (1989) 674.
- [82] V. de la Mota, F. Sébillé, Eur. Phys. J. A 12 (2001) 479.
- [83] J. Rau, B. Müller, Phys. Rep. 272 (1996) 1.
- [84] C. Toepffer, C. Y. Wong, Phys. Rev. C 25 (1982) 1018
- [85] A. Calderón, Studia Math. 24 (1964) 113.
- [86] J.R. Klauder, and B.-S. Skagerstam, "Coherent States", World Scientific, Singapore (1985).
- [87] J. Morlet, G. Arens, I. Fourgeau and D. Giard, Geophys. 47 (1982) 203.
- [88] H. Feldmeier, J. Schnack, Rev. Mod. Phys. 72 (2000) 655.
- [89] G. Watanabe, K. Sato, K. Yasuoka and E. Ebisuzaki, Phys. Rev C 66 (2002) 012801(R).

- [90] M.Unser and A. Aldroubi, Polynomial splines and wavelets- A signal processing perspective in *Wavelets : A tutorial in Theory*, Ed. C.K. CHUI, Academic Press (1992) 91-122.
- [91] R. Coifman and M.V. Wickerhauser, *IEEE Trans. Inf. Theo.* 38 (1992) 713.
- [92] C-Y. Wong, H.H.K. Tang, *Phys. Rev. C* 20 (1979) 1419.
- [93] P. Magierski and P.-H. Heenen, *Phys. Rev. C* 65 (2002) 045804.
- [94] A. Bulgac and P. Magierski, *Nucl. Phys. A* 683 (2001) 695.
- [95] Perelomov A.M., *Generalized coherent states and their applications* (1986), Springer Verlag.
- [96] S.Mallat, *A Wavelet Tour of Signal Processing* (Academic Press, New York, 1999)