

Calculs microscopiques en structure et réactions nucléaires

Application à des noyaux légers

- Partie I -

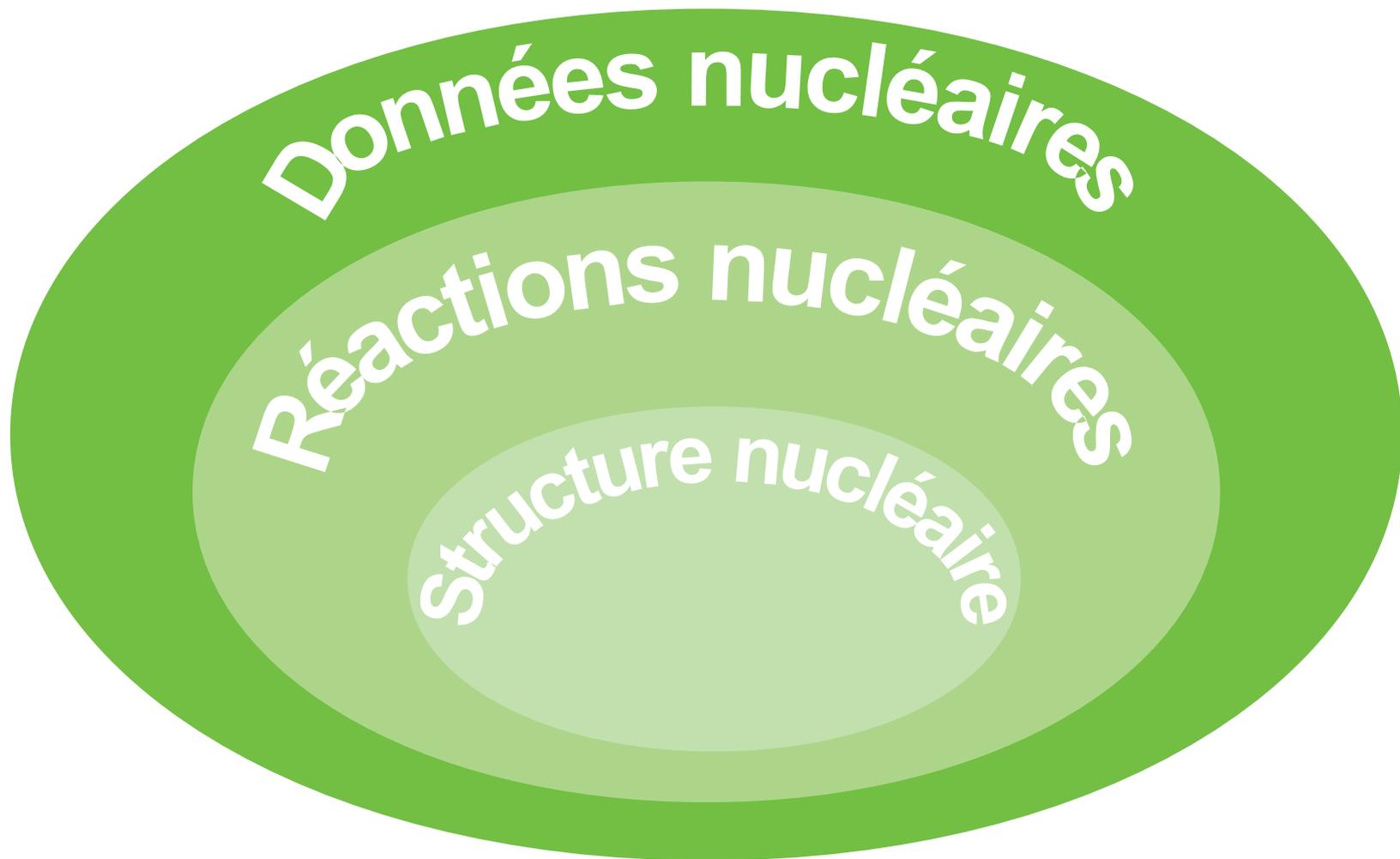
N. Pillet
CEA DAM DIF

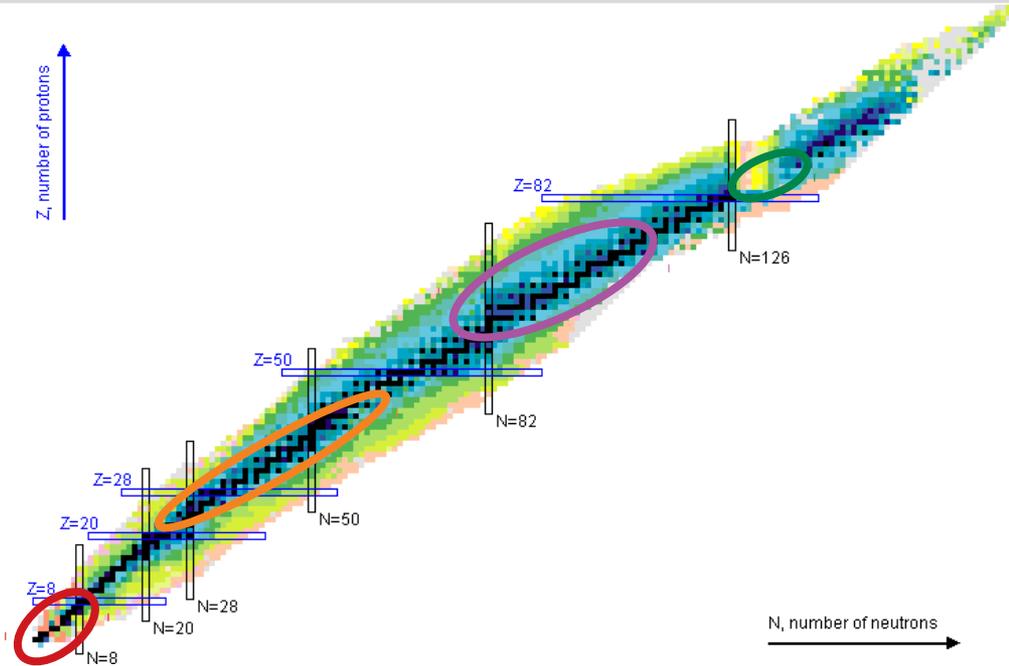
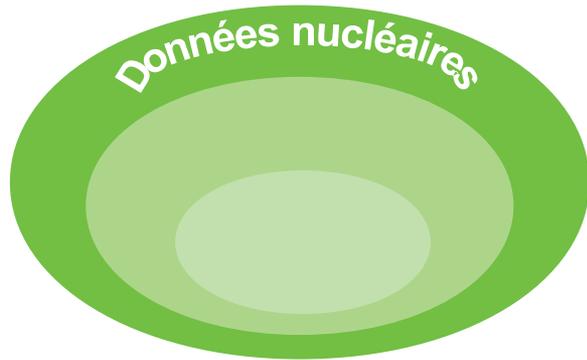
Collaborateurs

P. Chau, CEA DAM DIF
M. Dupuis, CEA DAM DIF
G. Hupin, CNRS IJCLab
C. Robin, Universität Bielefeld & GSI

Workshop NACRE

“ La structure nucléaire et les données
nucléaires pour les réacteurs ”
27-28 June 2022
Digiteo Saclay





Noyaux d'intérêts

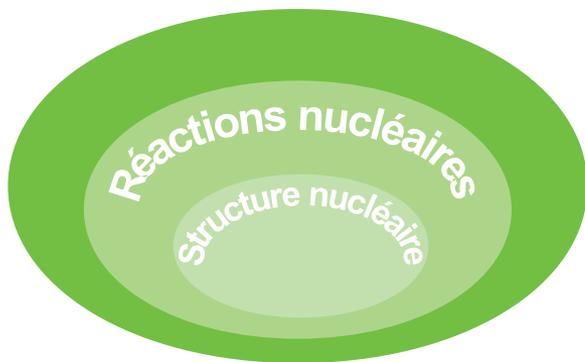
H Li Be B C N O Mg Al Si
 Ti V Cr Fe Ni Cu Ga Y Zr Nb Mo
 Xe Sm Eu Gd Ta W Re Ir Pt Au Pb
 Po Ra Th U Np Pu Am

(énergie nucléaire, médecine, sécurité nationale, contre-prolifération)

- Sections efficaces de capture radiative (n, γ)
- Sections efficaces (n, n') améliorées (grande gamme d'énergie)
- Multiplicité neutrons pour la fission induite par neutrons
- Rendements de fission cumulés
- Sections efficaces (n, xn)
- ...

[1] A.J. Köning et al., JRC Scientific and Technical Reports, 2009

[2] Nuclear Data Needs and Capabilities for Applications, 2015, LBNL (CA), USA



Description **microscopique** de la structure et des réactions

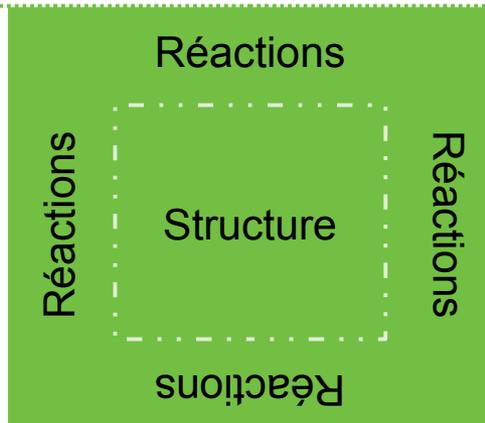
Information du système contenue dans la **fonction d'onde**

- **courte distance**: information sur la **partie liée**
- **longue distance**: condition asymptotique dictée par le **continuum**

Besoin de **modèles de structure** sous-jacents prédictifs

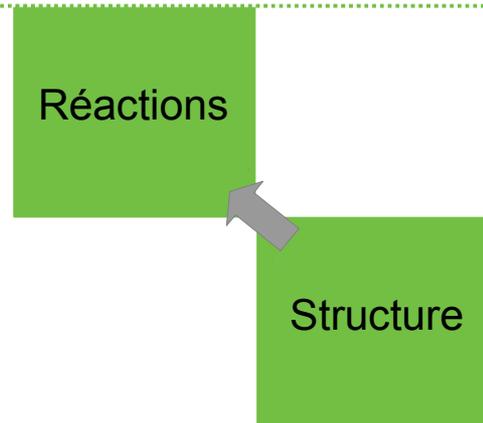
Modèles microscopiques

Structure et réactions traitées dans un même modèle



(G. Hupin, Partie II)

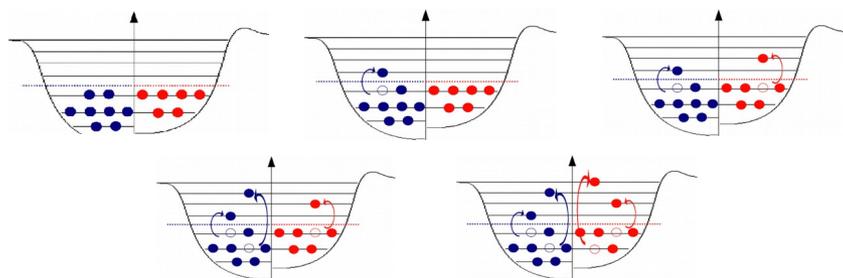
Structure et réactions traitées dans 2 modèles différents



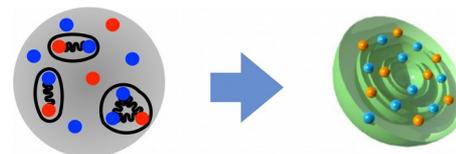
(N. Pillet, Partie I)

Principe général de l'approche MPMH [3-5]

Fondée sur la détermination
d'une **fonction d'onde type CI**



Le **champ moyen** sous-jacent et les **états à une particule** évoluent avec les corrélations du système



Approche complètement auto-cohérente et variationnelle

Système de 2 équations couplées

$$\begin{cases} \delta_A \mathcal{E}[\Psi] = 0 \Leftrightarrow \sum_{\beta} A_{\beta} \langle \phi_{\alpha} | \hat{H} | \phi_{\beta} \rangle = \lambda A_{\alpha} \\ \delta_{\varphi} \mathcal{E}[\Psi] = 0 \Leftrightarrow [\hat{h}[\rho], \hat{\rho}] = \hat{G}[\sigma] \end{cases}$$

- Coefficients du mélange
- Orbitales optimisées

[3] N. Pillet, E. Caurier, J.F. Berger, PRC 78, 024305 (2008)

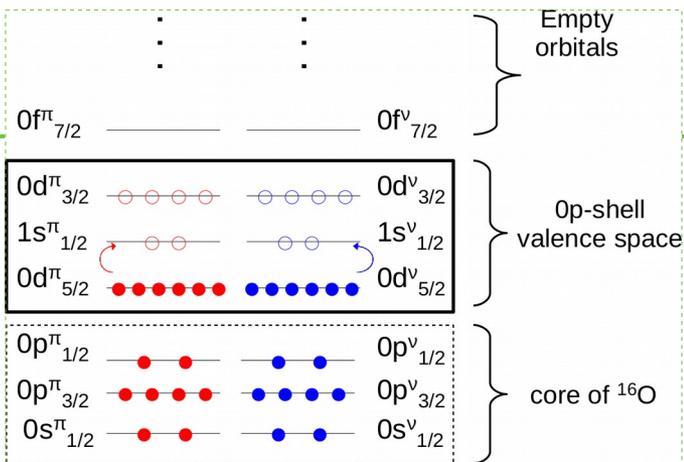
[4] C. Robin, N. Pillet, D. Peña Arteaga, J.-F. Berger, PRC 93, 024302 (2016)

[5] C. Robin, N. Pillet, M. Dupuis, J. Le Bloas, D. Peña Arteaga, J.-F. Berger, PRC 95, 044315 (2017)

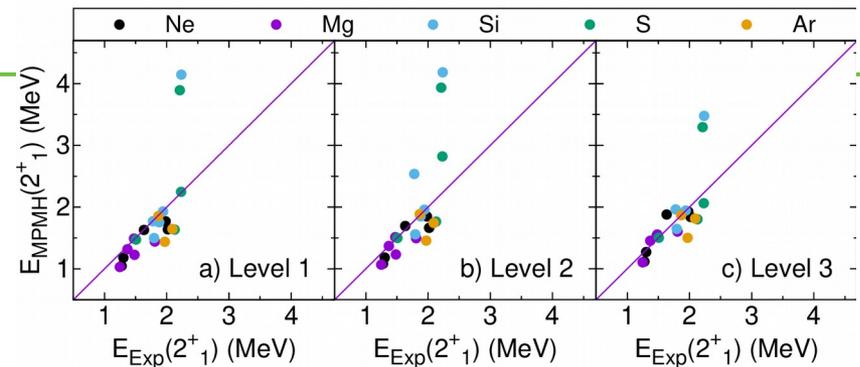
Noyaux pairs-pairs de la couche sd (Ne, Mg, Si, S, Ar)

Choix des configurations

- Coeur d' ^{16}O + Valence \equiv couche sd
- Troncation: Configurations à $0\hbar\omega$
- MPMH Level 1: orbitales HF
MPMH Level 3: orbitales optimisées
- Interaction D1S de Gogny

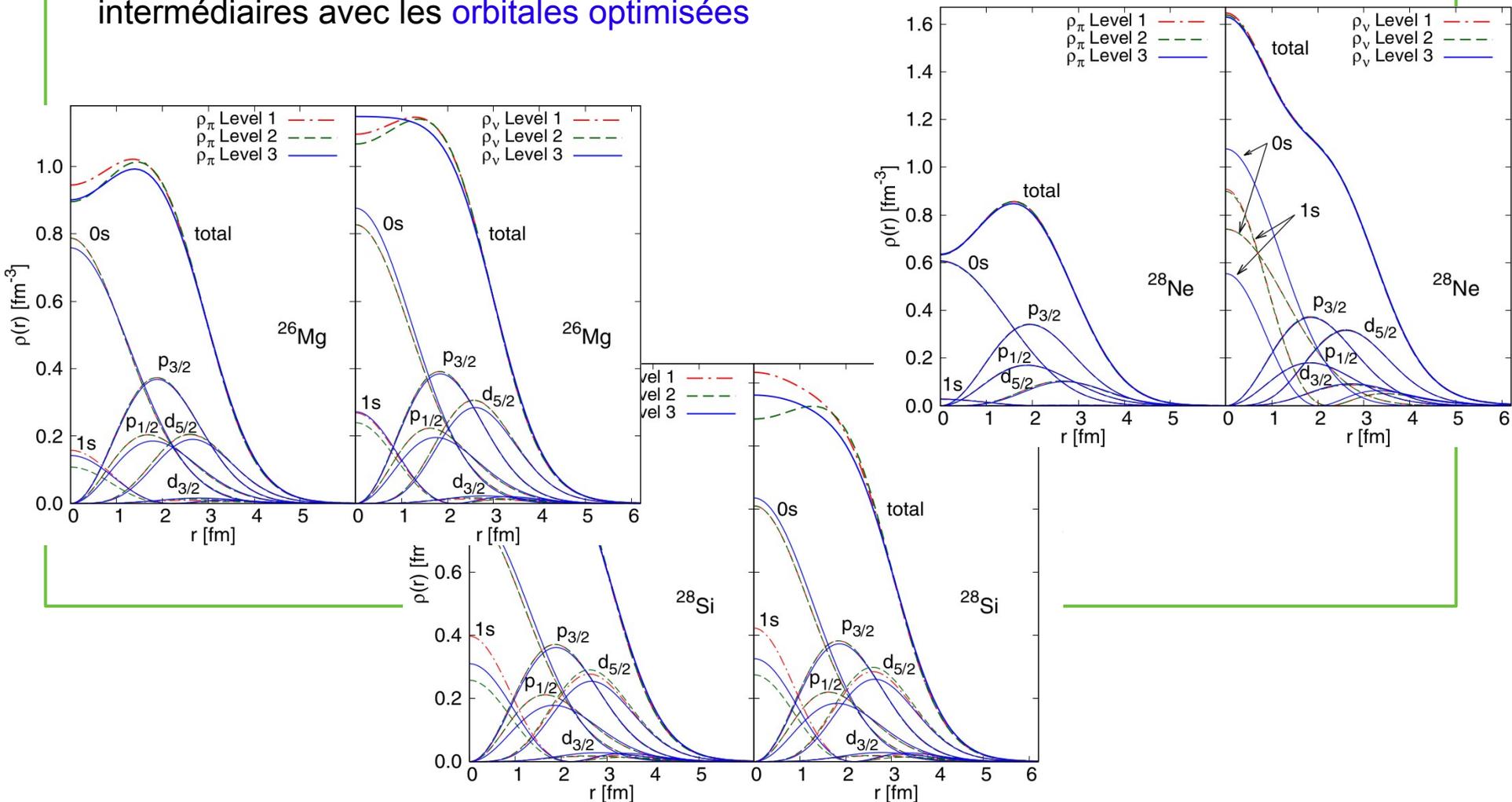
Energies d'excitation des états 2^+_1

- Résultats très satisfaisants (sans ^{30}Si & ^{30}S)
 - Level 1: $\langle \Delta E(2^+_1) \rangle = 0.227\text{MeV}$, $\sigma(\Delta E_1) = 0.214\text{MeV}$
 - Level 3: $\langle \Delta E(2^+_1) \rangle = 0.149\text{MeV}$, $\sigma(\Delta E_1) = 0.121\text{MeV}$
- ^{30}Si & ^{30}S : problème monopolaire de l'interaction
 - Level 1: $\langle \Delta E(2^+_1) \rangle = 0.418\text{MeV}$, $\sigma(\Delta E_1) = 0.680\text{MeV}$
 - Level 3: $\langle \Delta E(2^+_1) \rangle = 0.286\text{MeV}$, $\sigma(\Delta E_1) = 0.494\text{MeV}$



Densités de protons et de neutrons

- Variations notables des densités proton et neutron dans les parties internes et intermédiaires avec les orbitales optimisées

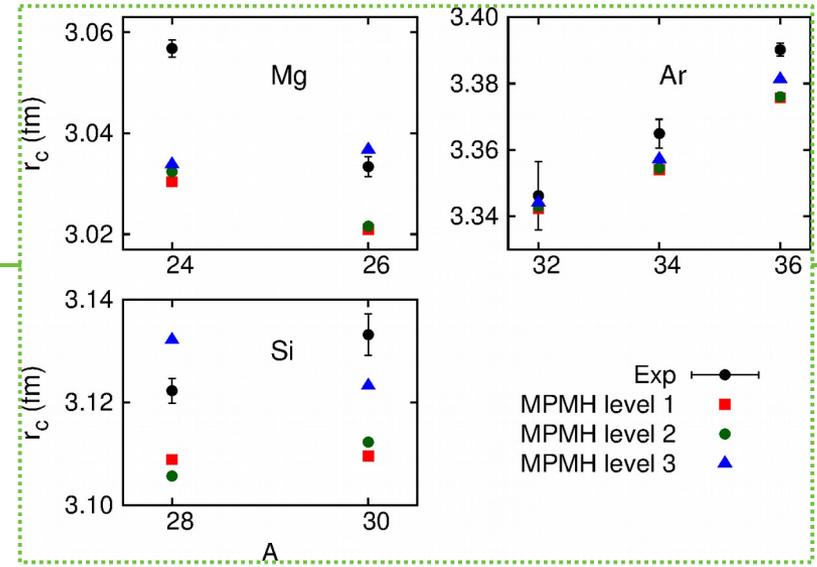
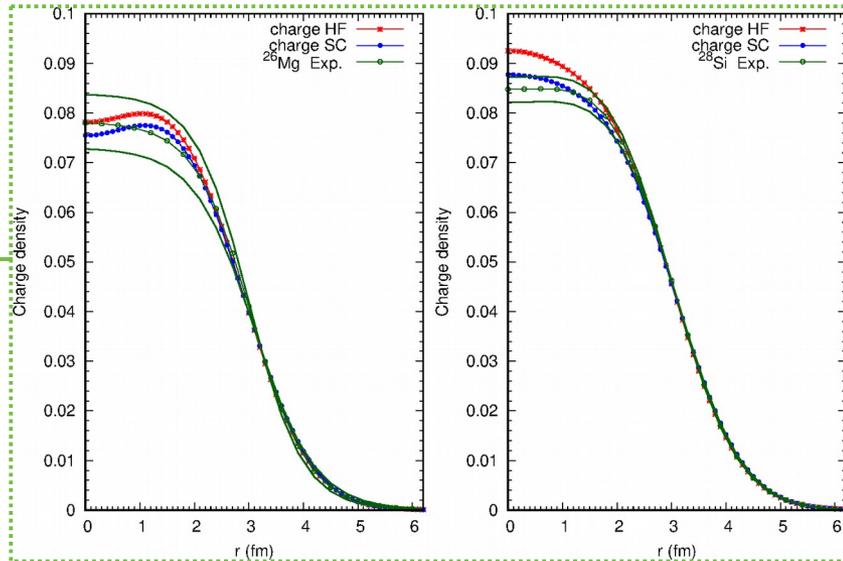


Densités de charge et rayons de charge

- **Modification des densités de charge avec les orbitales renormalisées:**

- diminution au centre du noyau, augmentation pour des grandes valeurs de r
- **compatibilité voire amélioration** avec les données expérimentales [6]

- **Rayons de charge: amélioration (quasi-)systématique** avec les orbitales renormalisées



[6] H. de Vries, C. W. De Jager, and C. De Vries, Atomic Data and Nuclear Data Tables 36, 495536 (1987)

Densités de transition et diffusion inélastique d'électrons sur des états discrets

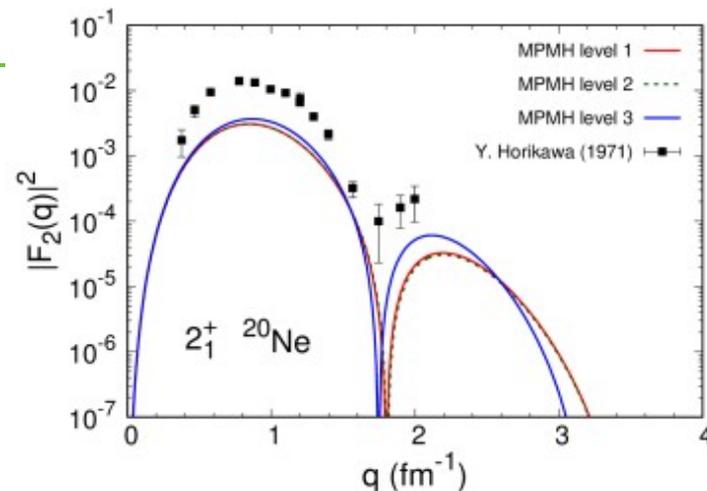
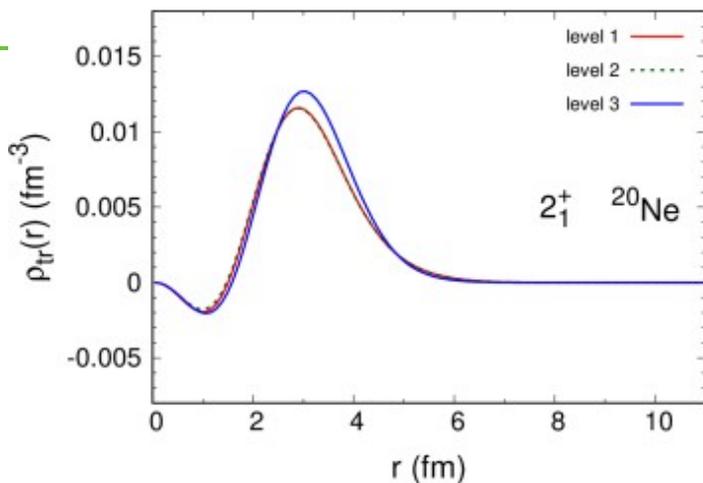
- Facteur de forme:

$$F_\lambda(q) = \frac{\sqrt{4\pi}}{Z} \sqrt{\frac{2J_f + 1}{2J_i + 1}} \int_0^\infty r^2 dr j_\lambda(qr) \rho_{tr}(r)$$

- Rôle joué par la renormalisation des orbitales
- Bonne description des rayons de charge
- Manque un facteur ~ 2 sur l'amplitude du facteur de forme:

$$\rho_{\alpha\alpha'}^{nn'} = \langle \psi_{n'} | a_{\alpha'}^\dagger a_\alpha | \psi_n \rangle$$

→ Besoin des configurations à $2\hbar\omega$ pour les transitions $\lambda=2$ parité conservée (en cours)



Densités de transition et diffusion inélastique de nucléons sur des états discrets

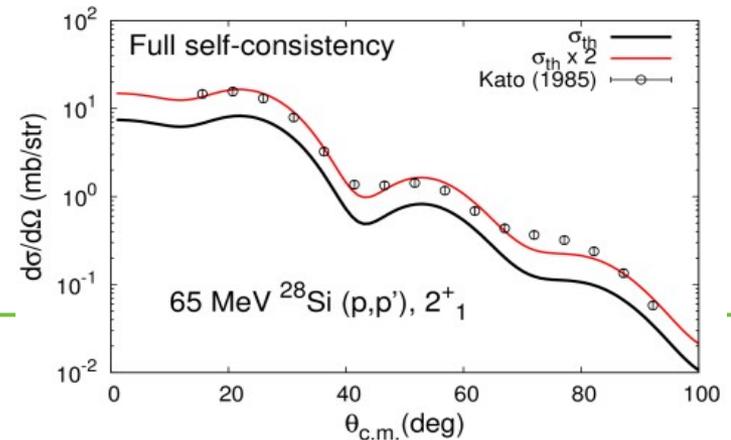
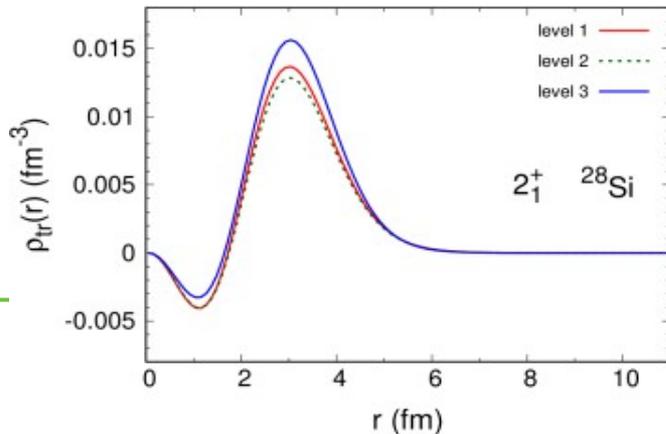
- Section efficace partielle de diffusion

$$\frac{d\sigma_{I \rightarrow F}(k_i, k_f)}{d\Omega} = \frac{\mu^2}{4\pi^2 \hbar^4} \frac{k_f}{k_i} |T_{IF}|^2$$

- Equations pour la diffusion inélastique résolues à l'approximation DWBA (M. Dupuis [7])
- Potentiels optiques et de transition: U_{00} , U_{n0} et $U_{nn'}$

$$\hat{U}_{nn'} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\alpha' k k'} \langle k' \alpha' | V_{eff} | k \alpha \rangle \rho_{\alpha\alpha'}^{nn'} a_{k'}^\dagger a_k$$

Etats de la cible ← Matrice G de Melbourne → Densités de transition $\rho_{\alpha\alpha'}^{nn'} = \langle \psi_{n'} | a_{\alpha'}^\dagger a_\alpha | \psi_n \rangle$



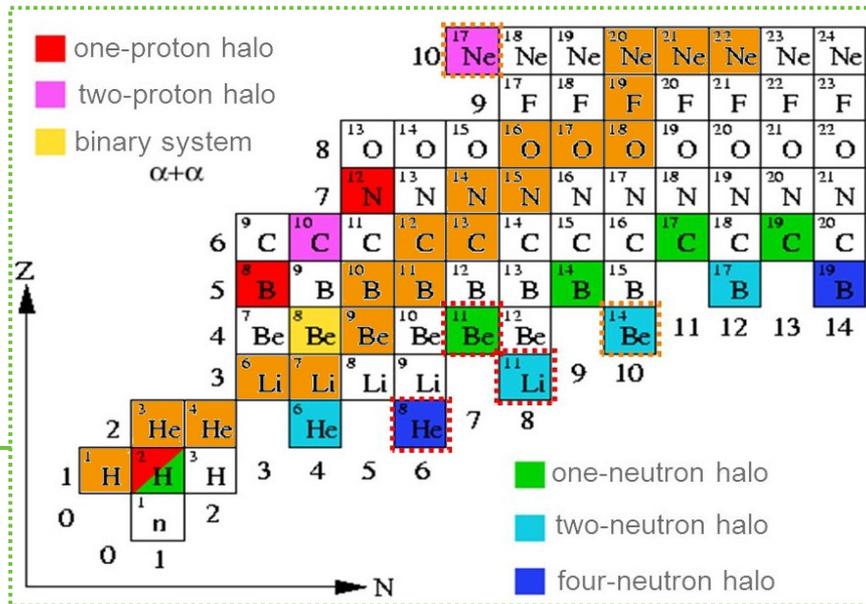
→ Besoin des configurations à $2\hbar\omega$

Noyaux très légers

- Structures inhabituelles qui sont le reflet de corrélations particulières

Halos, clusters et continuum

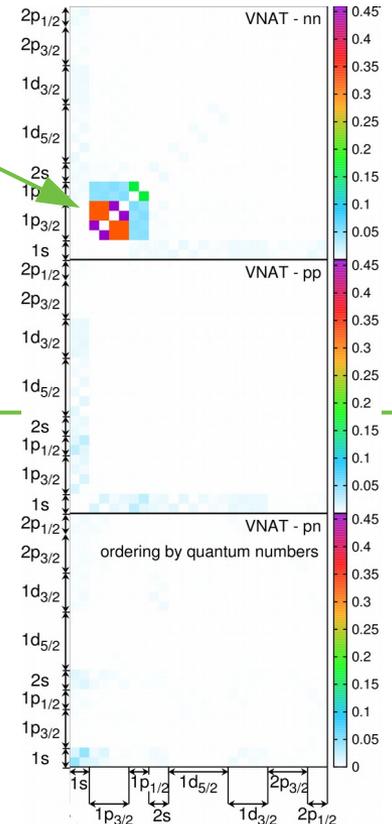
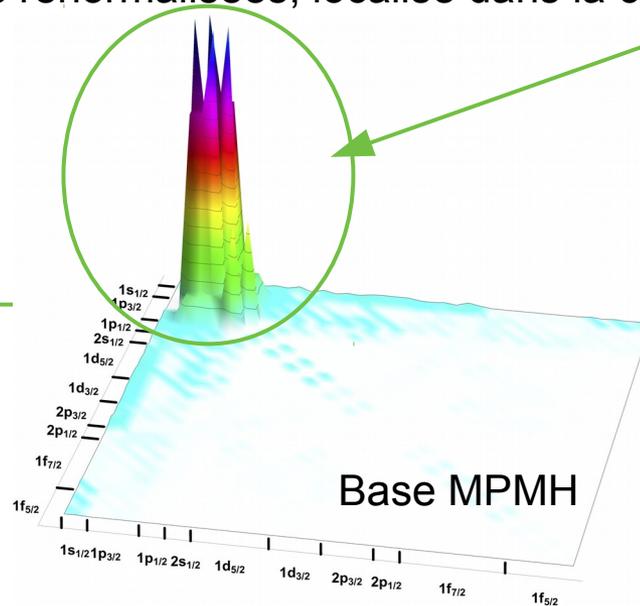
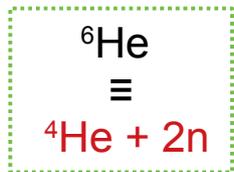
- Phénomènes de basse densité



Be isotopes	E/A	S_n	S_p	S_{2n}	Décroissance	$T_{1/2}$	J^π
^7Be	5,371	10,677	5,606	37,500	ϵ	53.22j	$3/2^-$
^8Be	7,062	18,898	17,254	29,576	α	7.10^{-17}s	0^+
^9Be	6,462	1,664	16,886	20,563	stable		$3/2^-$
^{10}Be	6,497	6,812	19,636	8,476	β^-	$1.51.10^6\text{a}$	0^+
^{11}Be	5,952	0,501	20,164	7,313	β^-	13.76ms	$1/2^+$
^{12}Be	5,720	3,170	22,939	3,672	β^-	21.46ms	0^+
^{13}Be	5,241	-0,510	22,640	2,661	n	$2.7.10^{-21}\text{s}$	$(1/2^+)$
^{14}Be	4,994	1,780	24,320	1,270	β^-	4.35ms	0^+
^{11}Li	4,155	0,396	15,760	0,369	β^-	8.75ms	$3/2^-$
^6He	4,878	1,710	22,590	0,975	β^-	806.7ms	0^+
^{208}Pb	7,867	7,367	8,003	14,105	stable		0^+

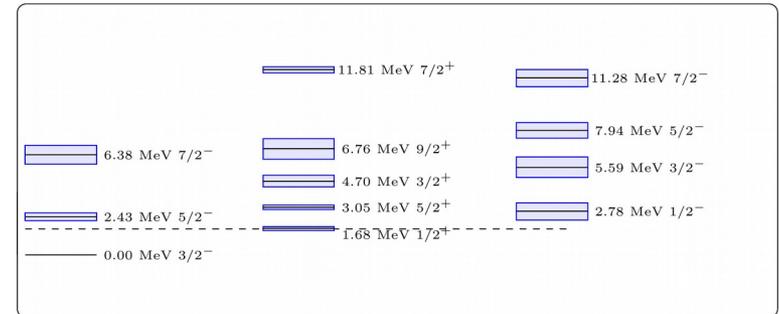
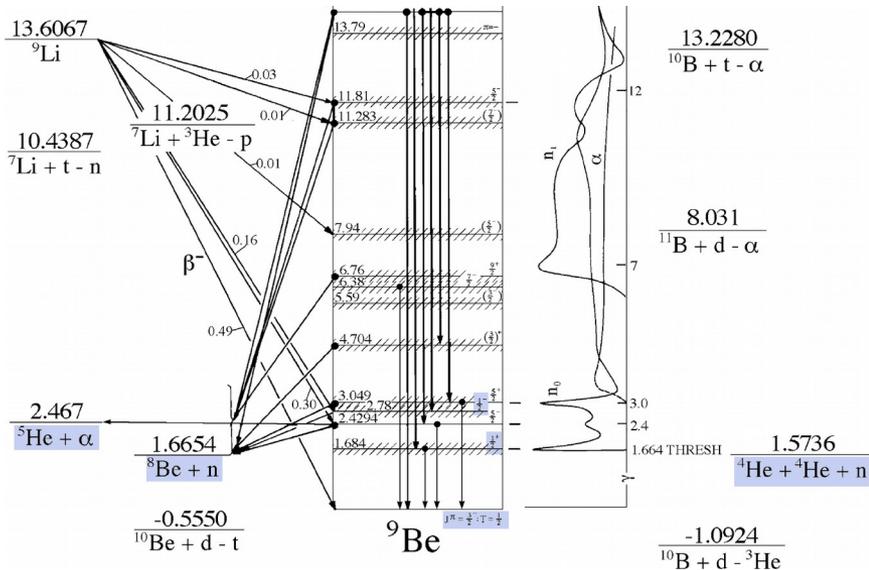
Description du halo à 2 neutrons de l' ${}^6\text{He}$

- **Calcul MPMH 'no core'** (base $N=7$) + Interaction chirale [8]
 - reproduction de l'énergie de liaison et du rayon de charge expérimentaux
- **Entropies N-corps de Von Neumann:** caractérisation de l'intrication quantique des orbitales
- **Information mutuelle neutron-neutron:** Caractérisation du halo à 2n avec les orbitales renormalisées, localisé dans la couche p



Diffusion (n,n') sur le ^9Be

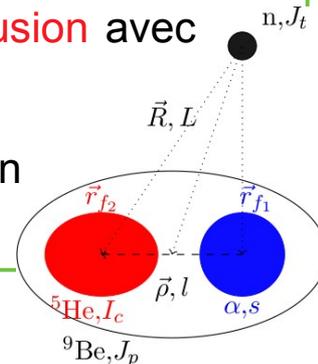
• Spectre expérimental du ^9Be



- Décroissance des états de basse énergie en différents clusters: $^5\text{He}+\alpha$, $^8\text{Be}+n$, $2\alpha+n$
- Structure en bandes de rotation à basse énergie
- 3 têtes de bande: les états $3/2^-$, $1/2^+$ et $1/2^-$

• Méthode XCDCC: Résolution du système d'équations couplées pour la diffusion avec la prise en compte du continuum (P. Chau [9])

- Potentiels optiques (n, ^5He), (n, α): Köning-Delaroche [10] + ajustement fin
- Structure pour le ^9Be : $^5\text{He}+\alpha$ simulé par un potentiel WS ajusté [11]



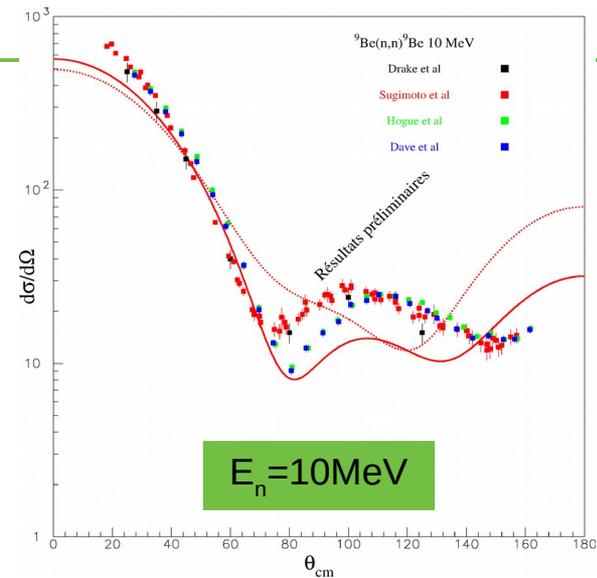
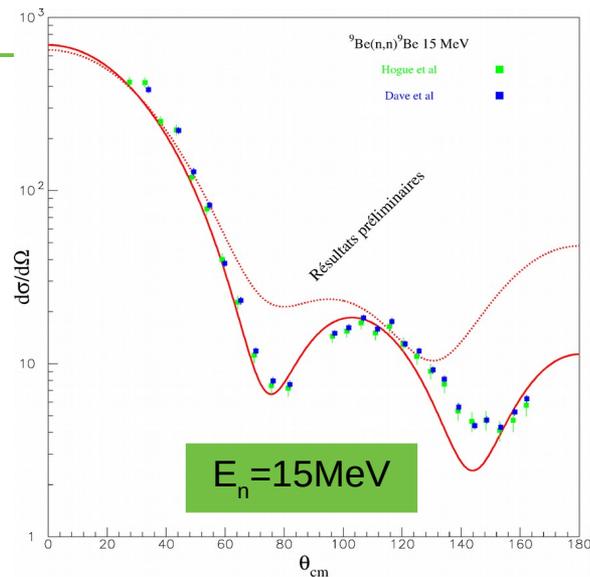
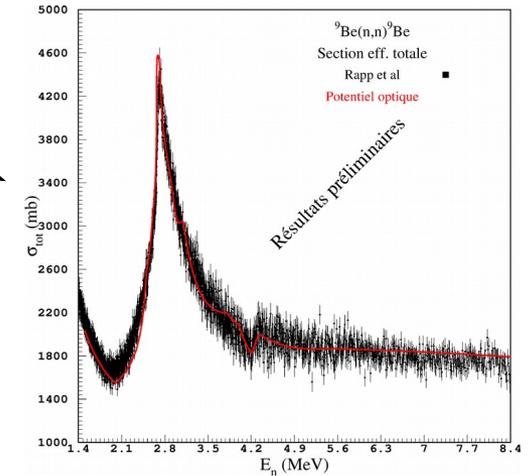
[9] H.-T. P. Chau, EPJ A 51, 166 (2015)

[10] A.J. Köning and J.P. Delaroche, NPA 713, 231 (2003)

[11] N. Keeley, K. W. Kemper et K. Rusek, PRC 64, 031602(R) (2001)

Section efficaces totale et partielles ${}^9\text{Be}(n,n){}^9\text{Be}$

- Relativement bonne description de la **section efficace totale**
- **Sections efficaces partielles**
 - Importance de la prise en compte du continuum
 - Description moins bonne pour des énergies du neutron incident plus faibles
 - Problème: compensation des sections efficaces partielles



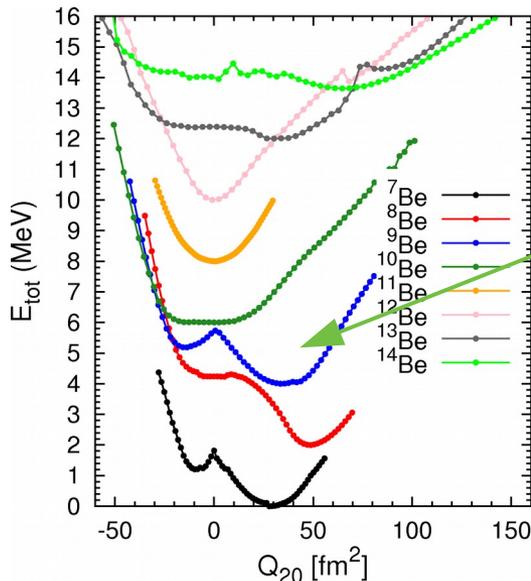
Pistes d'amélioration avec MPMH + Interaction chirale:

- Description de la structure du ${}^9\text{Be}$
- Potentiels optiques déduits microscopiquement

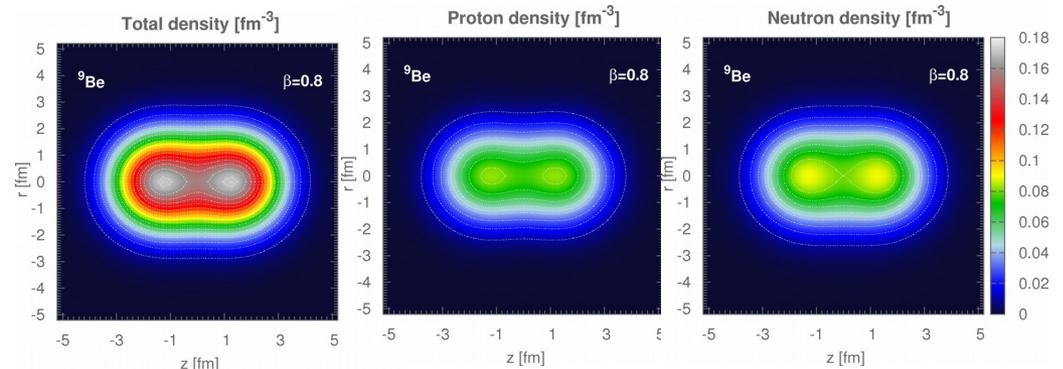
Quelques indications au niveau du champ moyen HFB avec l'interaction D1S de Gogny

- $E/A ({}^9\text{Be}) = 6.323 \text{ MeV}$ (exp: 6.462 MeV) $R_c ({}^9\text{Be}) = 2.494 \text{ fm}$ (exp: 2.519(12) fm [12])
- $E/A (\alpha) = 7.548 \text{ MeV}$ (exp: 7.127 MeV) $R_c (\alpha) = 1.820 \text{ fm}$ (exp: 1.681(4) fm [13])

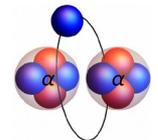
• Etat fondamental du ${}^9\text{Be}$ SANS brisure de parité



Densités de nucléons du ${}^9\text{Be}$



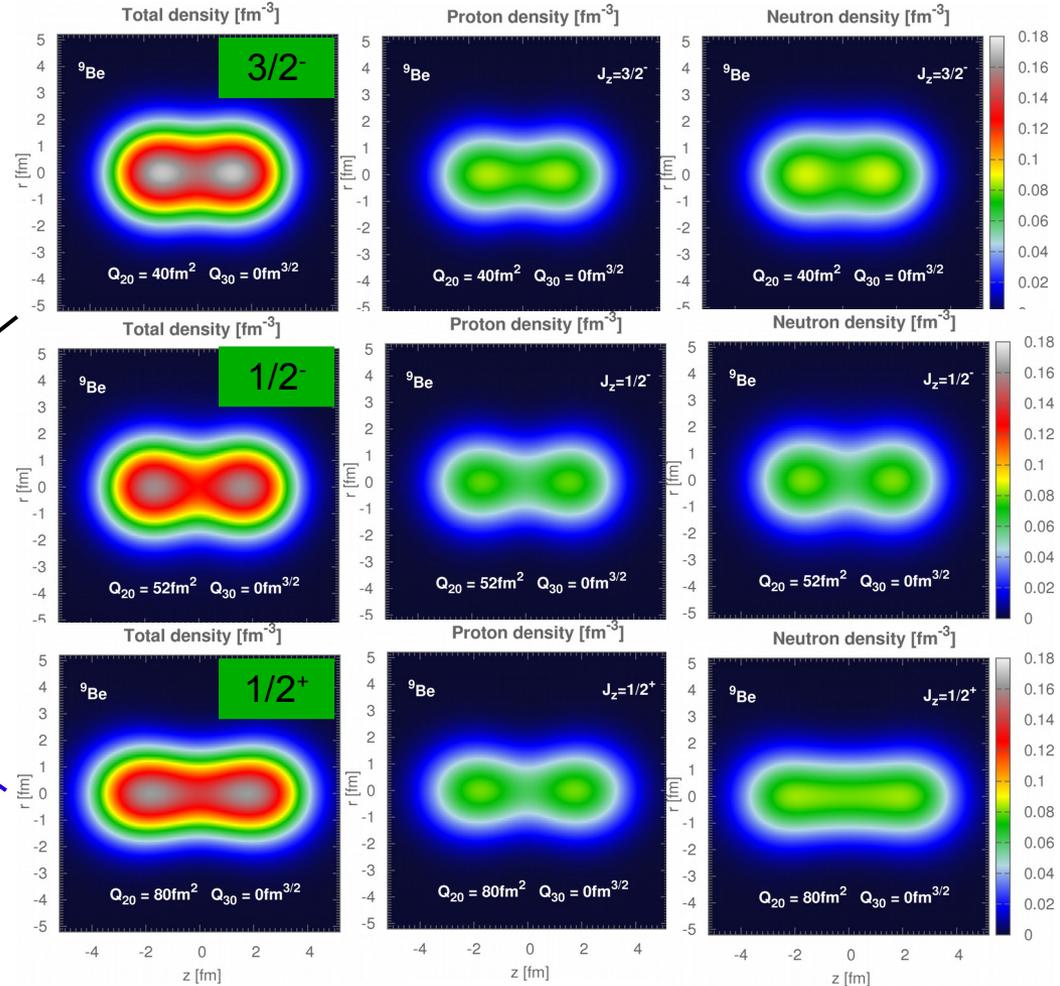
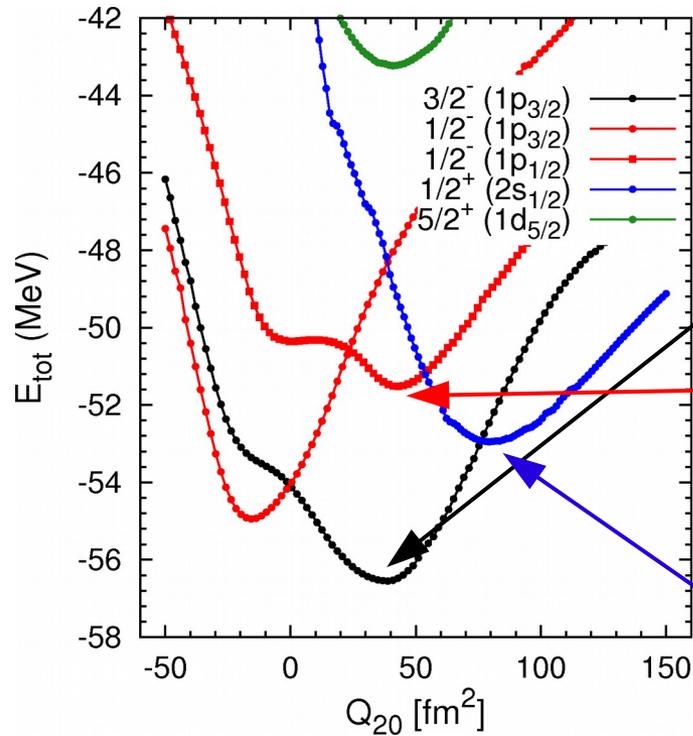
→ Structure moléculaire du ${}^9\text{Be}$



[12] W. Nörtershäuser et al., PRL 102, 062503 (2009)

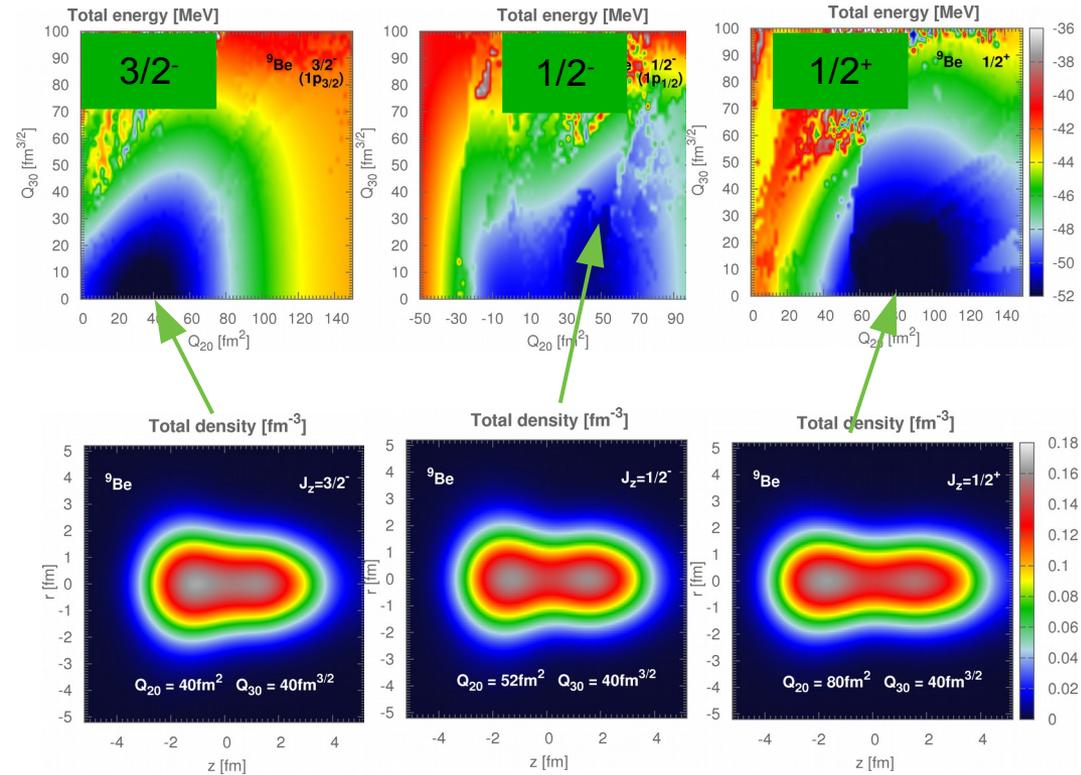
[13] Julian J. Krauth et al., Nature vol. 589, 527 (2021)

Etats excités du ${}^9\text{Be}$ SANS brisure de parité



- Différences notables (structure et extension spatiale)
- Structure en 2 "fragments", Structure moléculaire $\alpha+n+\alpha$

Etats fondamental et excités du ${}^9\text{Be}$ AVEC brisure de parité



État du ${}^9\text{Be}$	Q_{20}, Q_{30}	A_L/A_R	Z_L/Z_R	Énergie	Configuration
$3/2^-$	40, 40	5,2/3,8	2,2/1,8	~ 4	${}^5\text{He} + \alpha$
	40, 90	4,0/5,0	1,9/2,1	~ 12	${}^5\text{He} + \alpha$
	110, 40	4,8/4,2	2,0/2,0	~ 8	${}^5\text{He} + \alpha$
	110, 70	5,0/4,0	2,0/2,0	~ 9	${}^5\text{He} + \alpha$
	110, 90	5,3/3,7	2,2/1,8	~ 12	${}^5\text{He} + \alpha$
$1/2^+$	80, 40	4,8/4,2	2,1/1,9	~ 1.5	${}^5\text{He} + \alpha$
	80, 70	5,0/4,0	2,2/1,8	~ 6	${}^5\text{He} + \alpha$
	140, 40	4,6/4,4	2,0/2,0	~ 2	${}^5\text{He} + \alpha$
	140, 70	5,1/3,9	2,2/1,8	~ 6	${}^5\text{He} + \alpha$
$1/2^-$	52, 18	4,9/4,1	2,1/1,9	~ 0	${}^5\text{He} + \alpha$
	52, 40	5,0/4,0	2,1/1,9	~ 4	${}^5\text{He} + \alpha$
	100, 18	4,6/4,4	2,0/2,0	~ 4.5	${}^5\text{He} + \alpha$
	100, 40	4,7/4,3	2,0/2,0	~ 4.5	${}^5\text{He} + \alpha$

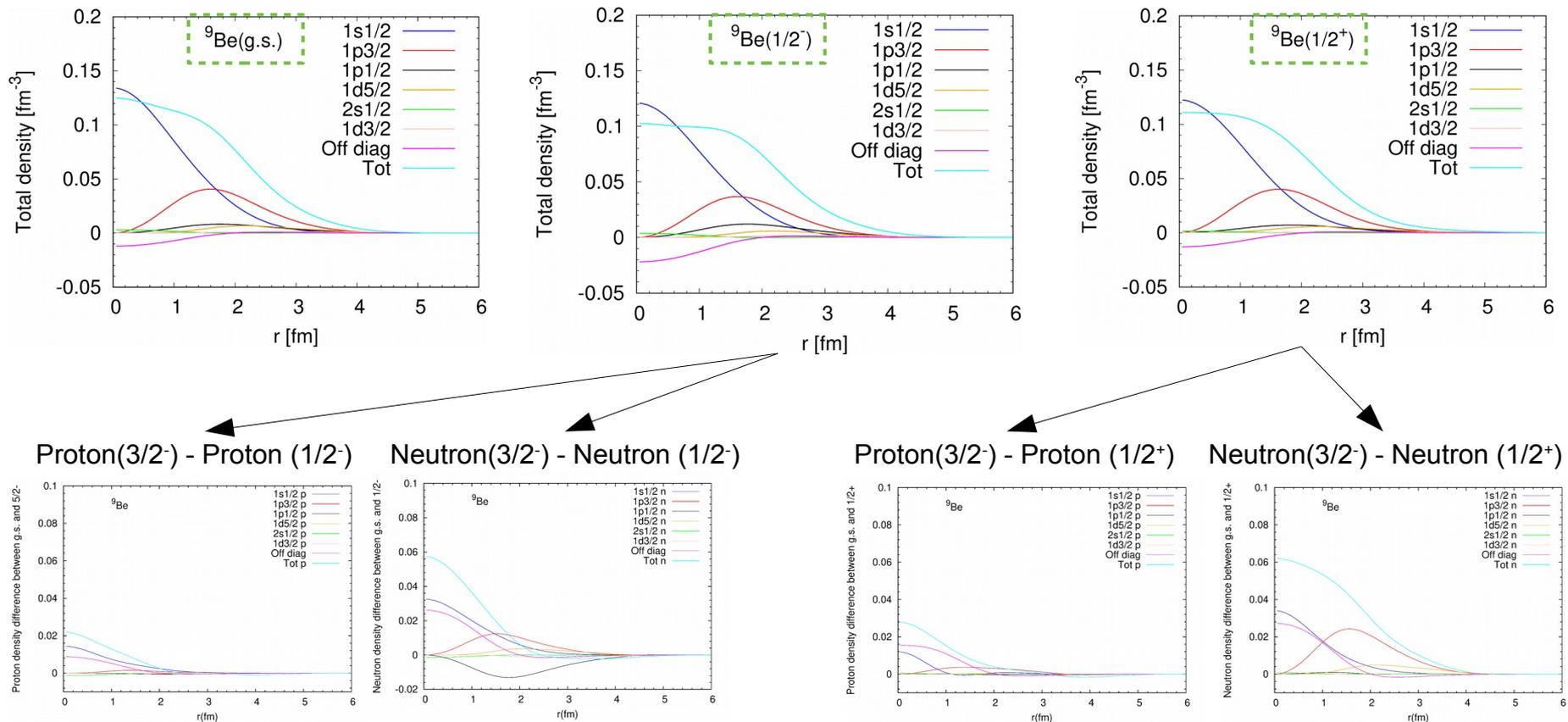
- Répartition $Z_L \approx Z_R \approx 2$ semble robuste
- Configurations à partir d'He favorisées
- Structure de type $\alpha + {}^5\text{He}$ pour $Q_{30} \neq 0$

- Molesse des PES en fonction de Q_{30}
- Minimum HFB avec $Q_{30} \neq 0$ pour $1/2^-$
- Structure en 2 fragments différents
- **Différence:** forme? Nombre de nucléons?

Fonction d'onde du ${}^9\text{Be}$
 $\alpha + {}^5\text{He} \oplus \alpha + n + \alpha$

Et dans le cas du mélange de configurations MPMH...

- Obtention des solutions exactes (quasi-exactes) pour les noyaux légers (calculs no core)
- Calculs effectués dans le repère du laboratoire (états physiques)



En conclusion de la partie I

- Besoin de la mise en place d'un schéma de troncation des configurations optimal dans le cadre de l'approche MPMH
- → Troncation type $N\hbar\omega$
 - Opérateurs effectifs adaptés pour chaque type d'opérateur (probabilités de transition...)
 - Noyaux de masse intermédiaire et au-delà
- Détermination des entropies à 3 et 4-corps à partir de la fdo MPMH pour étudier des corrélations de type triton et alpha
- Approche XCDCC et MPMH
 - Prise en compte d'informations venant de la microscopie
 - Pour décrire la structure du ${}^9\text{Be}$
 - Pour déterminer les potentiels optiques nécessaires “ $n+\alpha$ ” et “ $n+{}^5\text{He}$ ”

Modèles microscopiques:

Modèles où structure et réaction sont traitées sur le même plan (ex: partie liée + états de diffusion)

→ **ab initio**: traitement de l'ensemble des voies ouvertes, pb à N-corps traité exactement, noyaux légers (Présentation G. Hupin, Partie II)

→ traitement approché du pb N-corps avec interaction chirale ou effective
Exemple: potentiel optique microscopique RPA

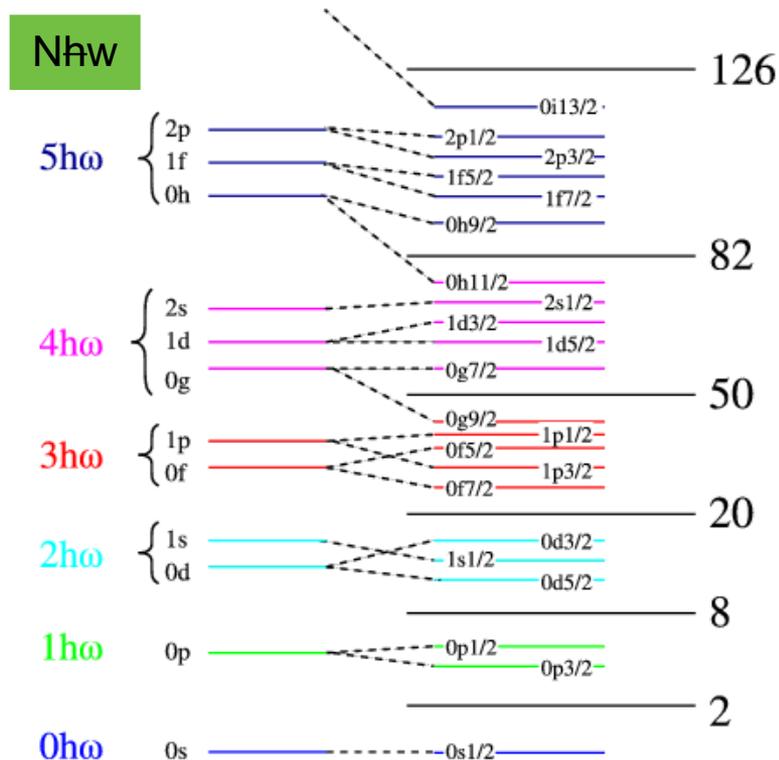
Approches plus effectives où des ingrédients de structure sont introduits dans des modèles de réactions

→ **Ingrédients modèles de structure pour réactions**: Energies de liaison, S_n et S_p , moment angulaire total, parité, E^* , rayons de charge, densités de matière, densités de transition, probabilités de transition EM, rapports de branchement, fonction de force γ , facteurs spectroscopiques (overlap pour les réactions de transferts), rendements de fission, propriétés des fragments de fission

→ Exemple: Potentiels optique et de transition construits à partir des densités de matières (JLM, Matrice G)

Schémas de troncation possibles pour sélectionner les configurations

- Ordre d'excitation particule-trou
- Energie d'excitation
- Coeur + espace de valence (CI)
- En $N \hbar\omega$ (no core shell model)
- Une combinaison des différentes troncations ...

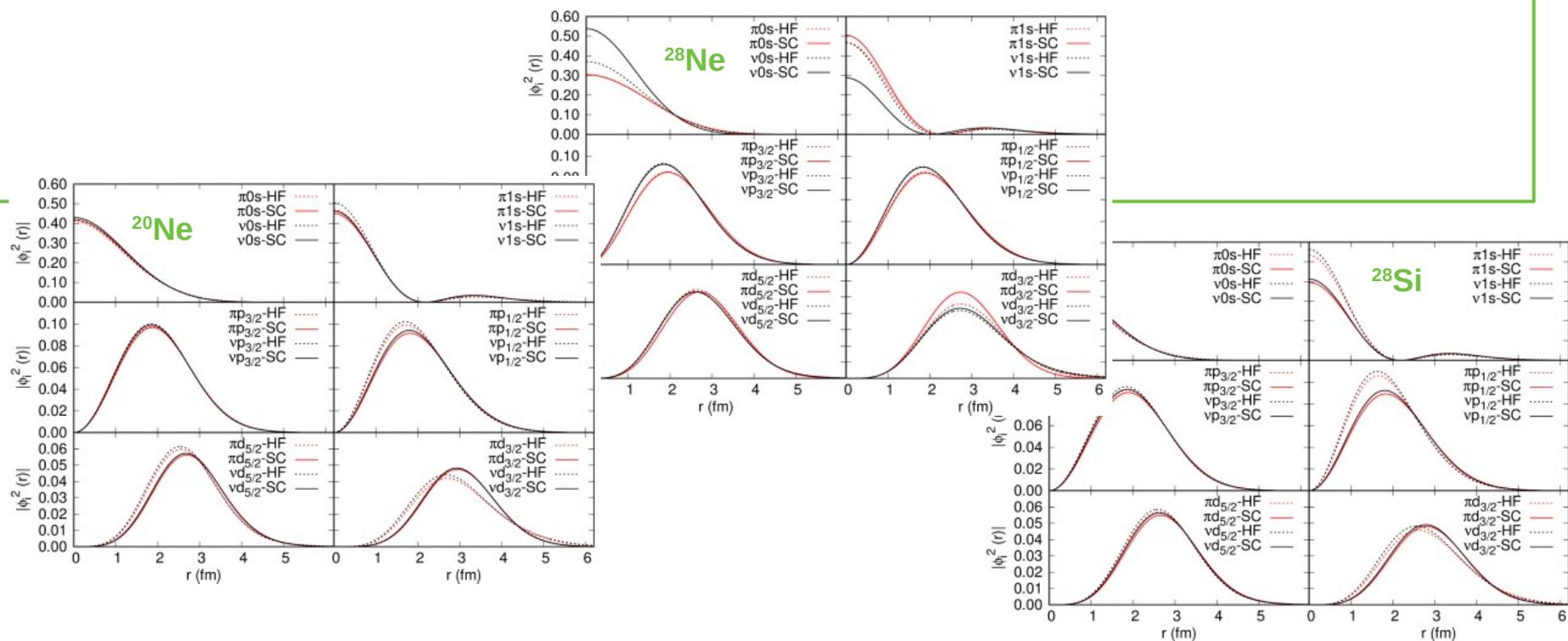


Exemple: Configurations importantes pour les énergies, les opérateurs de transition M1 et E2

- Energies: $\Delta N=0\hbar\omega$ (troncation standard CI)
- B(M1): $\Delta N=0\hbar\omega$ et a priori $\Delta N=1\hbar\omega$. Conservation de la parité => seulement $\Delta N=0\hbar\omega$ => la force M1 est principalement contenue dans la couche majeure
- B(E2): $\Delta N=0\hbar\omega$ et $\Delta N=2\hbar\omega$

Orbitales auto-cohérentes

- Modifications des propriétés spatiales des orbitales proton et neutron
- Exemple dans l'espace de valence: π et ν $1d_{3/2}$ du ^{20}Ne , ν $1s_{1/2}$ du ^{28}Ne
- Exemple dans le coeur d' ^{16}O : π et ν $1p_{1/2}$ du ^{28}Si



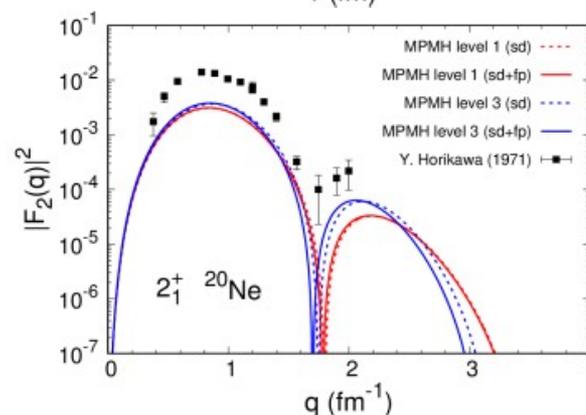
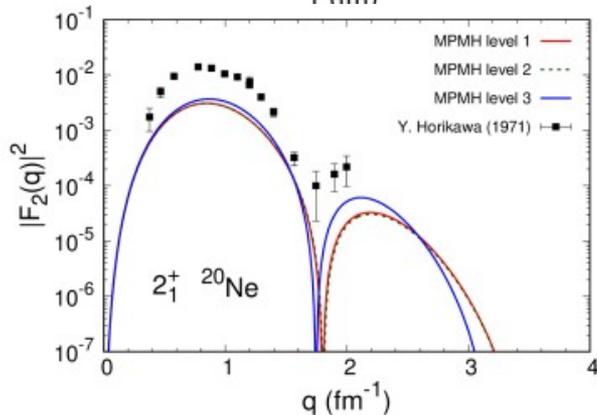
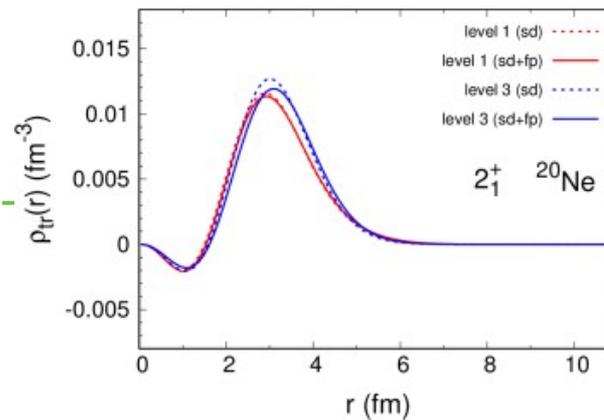
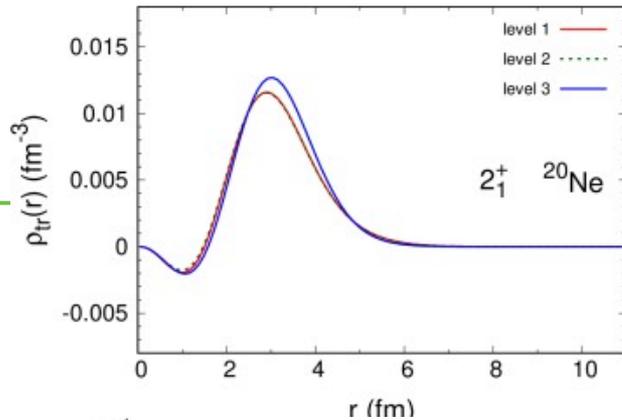
Densités de transition et diffusion inélastique d'électrons sur des états discrets

- Facteur de forme:

$$F_\lambda(q) = \frac{\sqrt{4\pi}}{Z} \sqrt{\frac{2J_f + 1}{2J_i + 1}} \int_0^\infty r^2 dr j_\lambda(qr) \rho_{tr}(r)$$

$$\rho_{\alpha\alpha'}^{nn'} = \langle \psi_{n'} | a_{\alpha'}^\dagger a_\alpha | \psi_n \rangle$$

- Rôle joué par la renormalisation des orbitales



Manque un facteur
~2 sur le facteur
de forme:

Importance des
configurations à
 $2\hbar\omega$ pour les
transitions $\lambda=2$ (en
cours)

Densités de transition et diffusion inélastique de nucléons sur des états discrets

$$\frac{d\sigma_{I \rightarrow F}(k_i, k_f)}{d\Omega} = \frac{\mu^2}{4\pi^2 \hbar^4} \frac{k_f}{k_i} |T_{IF}|^2 \quad \begin{cases} I \equiv (\psi_0, \chi_{\mathbf{k}_i}^+) \\ F \equiv (\psi_n, \chi_{\mathbf{k}_f}^-) \end{cases}$$

Modèle microscopique

- Distorted Wave Born Approximation (DWBA)

$$T_{IF} \simeq \langle \chi_{\mathbf{k}_f}^- | \hat{U}_{n0} | \chi_{\mathbf{k}_i}^+ \rangle \quad \begin{cases} (\hat{T}_0 + \hat{U}_{00}) | \chi_{\mathbf{k}_i}^+ \rangle = E_{k_i} | \chi_{\mathbf{k}_i}^+ \rangle \\ (\hat{T}_0 + \hat{U}_{nn}) | \chi_{\mathbf{k}_f}^- \rangle = E_{k_f} | \chi_{\mathbf{k}_f}^- \rangle \end{cases}$$

- Potentiel optique et de transition: U_{00} , U_{n0} et U_{nn}

$$\hat{U}_{nn'} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\alpha'kk'} \langle k'\alpha' | V_{eff} | k\alpha \rangle \rho_{\alpha\alpha'}^{nn'} a_{k'}^\dagger a_k$$

Matrice G de Melbourne

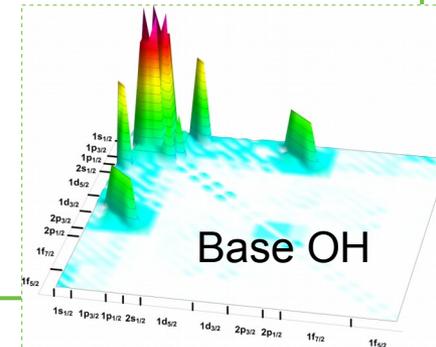
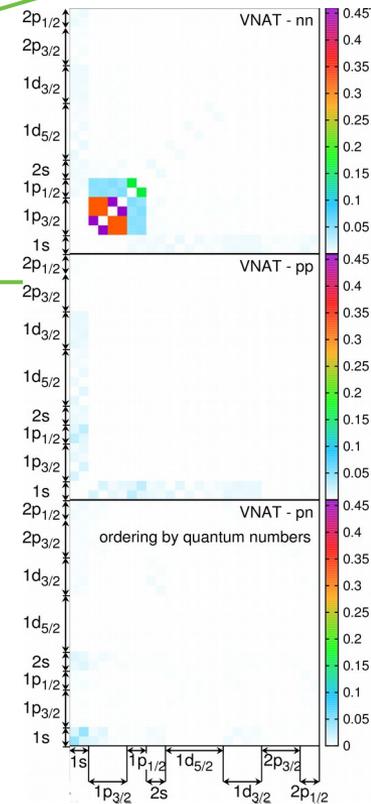
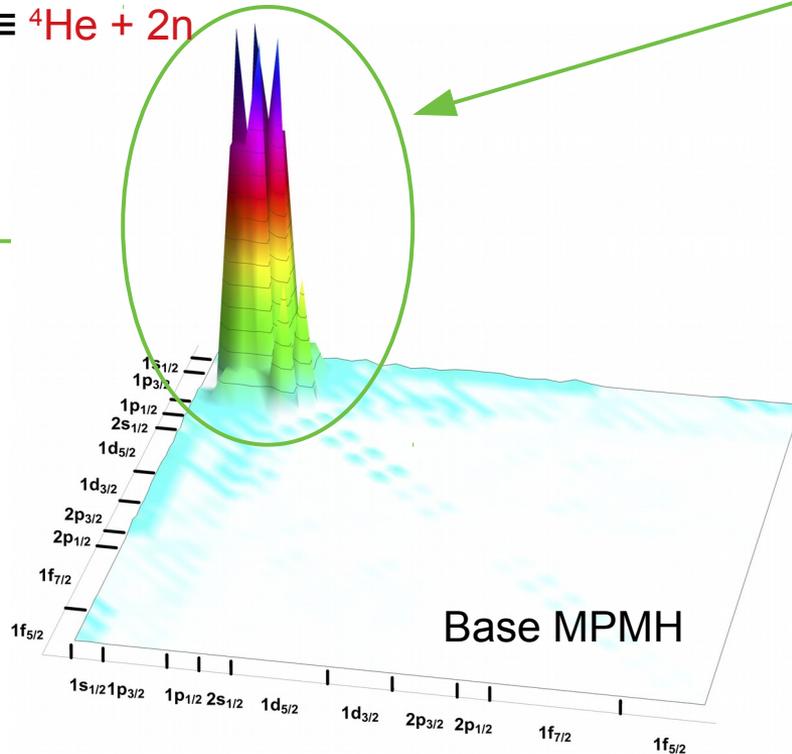
Densités de transition

$$\rho_{\alpha\alpha'}^{nn'} = \langle \psi_{n'} | a_{\alpha'}^\dagger a_{\alpha} | \psi_n \rangle$$

Description de ${}^6\text{He}$ et de son halo à 2 neutrons

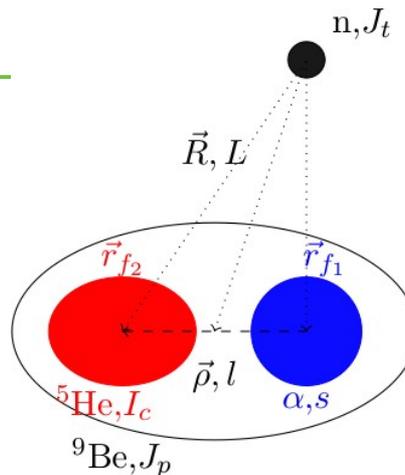
- Interaction chirale, résolution exacte à N-corps (MPMH, énergie de liaison, rayon de charge)
- **Entropies de Von Neumann**: caractérisation de l'intrication quantique
- **Information mutuelle neutron-neutron**: Caractérisation du halo à 2 neutrons avec les orbitales renormalisées qui est localisé dans la couche p:

$${}^6\text{He} \equiv {}^4\text{He} + 2n$$



Diffusions (n,n) et (n,n') sur le ${}^9\text{Be}$

- **Méthode XCDCC:** Résolution exacte du système d'équations couplées avec des ingrédients phénoménologiques pour la structure du ${}^9\text{Be}$ et les potentiels optiques
- **Potentiel optique (n, ${}^5\text{He}$), (n, α):** Dépendance identique au [potentiel optique Koning-Delaroche](#) + ajustement fin
- **Structure choisie pour le ${}^9\text{Be}$:** cluster ${}^5\text{He}+\alpha$ représenté par un [potentiel Wood-Saxon](#) ajusté de sorte à reproduire l'énergie de liaison et le rayon de charge du ${}^9\text{Be}$
 - Etats fondamental et excités déterminés par le moment orbital relatif du ${}^5\text{He}$ et l' α
 - Réaction à 3 corps



Pistes d'amélioration:

- Description microscopique de la structure du ${}^9\text{Be}$
- Potentiel optique et de transition calculés microscopiquement

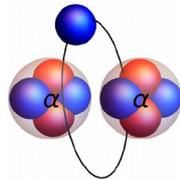
Quelques indications au niveau du champ moyen HFB

- Méthode de champ moyen (particule indépendante)
- Avec corrélations d'appariement (superfluidité)
- Conservation de N et Z en valeur moyenne, contraintes de déformations (brisures de symétrie, repère intrinsèque)
- Excitations élémentaires: les quasi-particules β (QP) de sorte que $\beta_i | \text{HFB} \rangle = 0$

$$| \text{noyau pair-pair} \rangle = \beta_i^+ \beta_j^+ | \text{HFB} \rangle$$

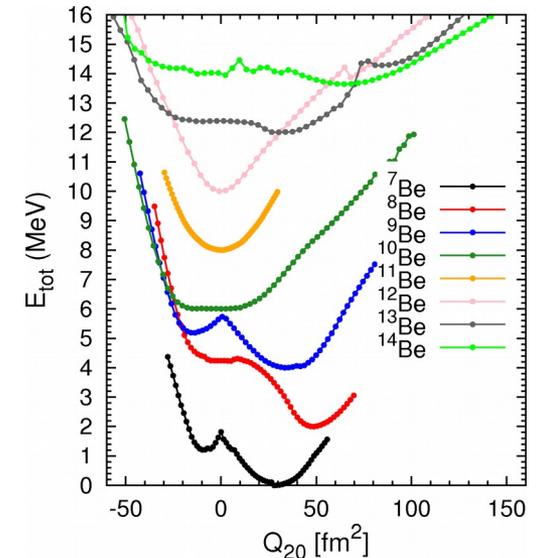
$$| \text{noyau impair} \rangle = \beta_i^+ | \text{HFB} \rangle$$

→ Structure moléculaire du ${}^9\text{Be}$



Etats fondamentaux des Be

Courbes d'énergie potentielle axiales SANS brisure de parité



Densités de nucléons du ${}^9\text{Be}$

