



Approche novatrice de l'évaluation des réactions nucléaires par une modélisation multivoie unificatrice

Aloys Nizigama

► To cite this version:

Aloys Nizigama. Approche novatrice de l'évaluation des réactions nucléaires par une modélisation multivoie unificatrice. Physique [physics]. Aix-Marseille Université (AMU), 2019. Français. NNT : . tel-02563752

HAL Id: tel-02563752

<https://cea.hal.science/tel-02563752>

Submitted on 5 May 2020

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

AIX-MARSEILLE UNIVERSITÉ
ECOLE DOCTORALE 352 - PHYSIQUE ET SCIENCE DE LA
MATIERE
CEA CADARACHE

Laboratoire d'accueil : CEA/DEN/DER/SPRC/Laboratoire d'Etudes de Physique

THESE PRESENTEE POUR L'OBTENTION DU GRADE DE DOCTEUR

Discipline : Energie, Rayonnement, Plasma

Aloys NIZIGAMA

APPROCHE NOVATRICE DE L'EVALUATION DES
REACTIONS NUCLEAIRES PAR UNE MODELISATION
MULTIVOIE UNIFICATRICE

Soutenue le 04/11/2019 devant le jury composé de :

José BUSTO	Professeur (CPPM)	Président
Luiz LEAL	Directeur de Recherche (IRSN)	Rapporteur
Ludovic BONNEAU	Maître de Conférences (CENBG)	Rapporteur
Olivier SEROT	Directeur de Recherche (CEA)	Examineur
Maëlle KERVENO	Chargée de Recherche (IPHC)	Examinatrice
Olivier BOULAND	Expert Sénior (CEA)	Directeur de thèse
Pierre TAMAGNO	Ingénieur-Chercheur (CEA)	Encadrant de thèse, invité
Caroline RAEPSAET	Experte (CEA)	Invitée

Numéro national de thèse/suffixe local : 2017AIXM0001/001ED62

Remerciements

Le chapitre des remerciements est réputé le plus difficile à écrire. Pardon donc d'ores et déjà à tous ceux que j'ai côtoyés au cours de cette thèse mais qui ne se trouveront pas cités sur ces pages.

Je voudrais en premier lieu adresser mes vifs remerciements à l'endroit de J. C. Bosq et C. de Saint Jean, respectivement chef du SPRC et chef du LEPH, pour avoir accepté et soutenu ma candidature pour cette thèse.

J'aimerais également remercier les membres de mon jury de thèse : J. Busto, L. Leal, L. Bonneau, O. Serot, M. Kerveno, C. Raepsaet pour avoir accepté d'évaluer mon travail et pour leurs remarques pertinentes. Merci à L. Leal, L. Bonneau et C. Raepsaet pour les corrections et ajouts suggérés qui ont amélioré sensiblement la qualité ce manuscrit.

De manière particulière, je remercie O. Bouland et P. Tamagno, respectivement directeur et encadrant de cette thèse. Merci à P. Tamagno pour m'avoir fait franchir un grand pas dans la programmation et pour ses avis tranchants sur les sujets traités tout au long de la thèse. Merci à O. Bouland pour les discussions enrichissantes qui m'ont fait acquérir de larges connaissances en Physique des réacteurs et sur tous les aspects de la Physique nucléaire; et merci de s'être toujours assuré que tout se passe bien dans ma vie personnelle.

Je voudrais aussi remercier les membres du SPRC et particulièrement ceux du LEPH pour les trois ans passés à leurs côtés. Merci à G. Noguère, P. Archier, M. Diakaki, D. Bernard et J. Tommasi qui ont répondu à mes questions chaque fois que je me suis adressé à eux et à A. Herrenschmidt qui a relu mon manuscrit. Merci également aux membres du groupe Données Nucléaires pour leurs interventions lors de la préparation de la soutenance.

Mes remerciements s'adressent également à l'endroit des membres du groupe théorie du Centre d'Etudes Nucléaires de Bordeaux Gradignan (CENBG) pour leur accueil chaleureux et le soutien financier du CENBG lors de mon séjour à Bordeaux pour présenter mon travail dans un séminaire.

Je remercie aussi mes compagnons thésards et stagiaires avec qui j'ai partagé mon quotidien durant les trois ans de thèse. Merci surtout à Bastien, Daniela,

Martin et Shengli que j'ai souvent « malmené » avec toute sorte de questions.

J'adresse mes vifs remerciements aux membres de la section football de Cadarache pour les moments inoubliables passés avec eux.

Je remercie ceux qui ont aidé à la préparation du pot de thèse : Jeanne, Nobel, Musore, Moses, Martin (pour la liste des provisions) et Josélyne venue de Lille.

Je remercie aussi tous ceux qui sont venus à la soutenance et ceux qui ne sont pas venus mais qui m'ont envoyé un mot d'encouragement.

Enfin, un grand merci à mon épouse Sapience dont le soutien au cours de ces trois ans de thèse a été également déterminant.

Résumé long

La méthode classique d'évaluation des données nucléaires pour la Physique des réacteurs, en vigueur depuis quatre décennies, atteint maintenant ses limites en terme de réduction des incertitudes sur les sections efficaces neutroniques. Ce constat nous a conduit à définir une approche nouvelle plus exhaustive en terme de processus physiques et de types d'observables capitalisables. Le travail de thèse présenté ici a pour objectif la démonstration qu'une amélioration qualitative majeure sur les paramètres a posteriori dans l'ajustement des sections efficaces, est réalisable en changeant de référentiel de travail, passant du cadre historique du neutron incident sur un noyau cible (c'est à dire de la spectroscopie neutronique) au cadre plus universel du centre de masse du système composé excité. Un tel changement de philosophie implique la modélisation effective simultanée de toutes réactions nucléaires menant au même système composé, ouvrant par voie de conséquence une inter-comparaison immédiate entre paramètres des modèles nucléaires provenant des différents pans de la physique, qu'ils soient issus des applications en physique de réacteurs ou de problématiques d'astrophysique ou de structure de la matière. La méthode ici décrite présente l'avantage de réunir des activités d'une même thématique (l'évaluation de données), habituellement exécutées séparément et ce, en regroupant les différentes bases de données expérimentales et différents jeux de paramètres; qu'ils soient qualifiés d'« a priori » ou d'« a posteriori » dans le processus d'ajustement des données. Cette procédure a été mise en œuvre au travers du développement d'un nouveau module dénommé TORA (TOol for Reactions Analysis) du code CONRAD (COde for Nuclear Reaction Analysis and Data Assimilation) du Commissariat à l'Energie Atomique et aux Energies Alternatives (CEA). Ce nouvel outil permet de calculer de façon autonome toutes sections efficaces neutroniques ou particules chargées microscopiques différentielles ou intégrées en angle qu'elles soient mesurées par rapport au référentiel des particules incidentes ou émergentes. Après une validation numérique des résultats des voies isolées de réaction par rapport aux codes institutionnalisés (CONRAD, SAMMY, NJOY, etc.) et après une comparaison des résultats TORA avec ceux d'un cas test de référence établi au niveau de la communauté scientifique des données nucléaires et traitant du système composé ${}^7\text{Be}^*$, l'accent a été mis sur une application concrète et d'actualité : le système composé ${}^{17}\text{O}^*$.

La problématique de la réduction des incertitudes des sections efficaces neutroniques de l' ^{16}O impliquant le système composé $^{17}\text{O}^*$, a été mise récemment en lumière au travers du projet international CIELO (Collaborative International Evaluation Library Organisation) qui a abouti en particulier à une clarification sur l'amplitude de la section efficace $^{16}\text{O}(\text{n}, \alpha)^{13}\text{C}$, réévaluée à la hausse de 40%. C'est le type de problème que l'approche unifiée de ce travail doit permettre à terme de prévenir en ayant un jeu unique cohérent de paramètres nucléaires (les paramètres fondamentaux de la théorie de la matrice R ; les amplitudes réduites γ_c par voie d'excitation c d'un état du système composé) pour la reproduction des résonances observées quelle que soit la spectroscopie de réaction. En effet, historiquement les sections efficaces mesurées $^{16}\text{O}(\text{n}, \alpha)^{13}\text{C}$ et $^{13}\text{C}(\alpha, \text{n})^{16}\text{O}$, ne pouvaient être l'objet d'un ajustement simultané et la mesure de la section efficace $^{13}\text{C}(\alpha, \text{n})^{16}\text{O}$ devait être renversée (temporellement) pour rejoindre la base expérimentale neutronique de ^{16}O sous la forme d'une pseudo-mesure $^{16}\text{O}(\text{n}, \alpha)^{13}\text{C}$ et ainsi pouvoir compléter l'information disponible pour l'évaluation des données de $^{17}\text{O}^*$. Au-delà de cette question argumentée dans le manuscrit, une ébauche d'ajustement des sections efficaces neutroniques de ^{16}O au travers de mesures de la base expérimentale rassemblée par le projet CIELO est réalisée avec comme produit fini des paramètres de résonance sous forme d'amplitudes réduites (et non pas sous forme de largeurs à mi-hauteur observées comme habituellement) avec rattachement à la structure nucléaire de l' ^{17}O , puisque étant définis par rapport à une énergie d'excitation dont l'origine de l'échelle se trouve être l'énergie de l'état fondamental de ce dernier. Une question, connexe au traitement matrice R et à l'énergie reportée dans la bibliographie pour les résonances observées, repose sur le choix de la convention choisie pour le calcul du facteur de déphasage, S_ℓ , et ses implications notamment à l'ouverture énergétique (seuil) d'une réaction. Un survol de la problématique est donné dans le manuscrit.

Table des matières

Remerciements	i
Résumé long	iii
Introduction	1
I Théorie des réactions nucléaires	9
I.1 Introduction	9
I.2 Les différents types d'interaction en physique nucléaire	10
I.2.1 Les réactions directes	11
I.2.2 Les réactions nucléaires du noyau composé	11
I.3 La subdivision de l'espace des configurations	14
I.3.1 L'espace interne	14
I.3.2 Espace externe ou espace des voies	19
I.4 Interaction d'un projectile avec une cible	20
I.4.1 Le cas simple de la diffusion d'un projectile neutre sans spin par une cible sans spin	20
I.4.2 Cas général	33
I.5 Rôle des facteurs de déphasage φ , de décalage S, de pénétrabilité P et corrélations avec les conditions aux limites B et a_c	41
I.5.1 Le facteur de déphasage sur sphère dure φ	41
I.5.2 Le facteur de décalage énergétique S (ou shift)	42
I.5.3 Le paramètre de condition aux limites B	42
I.5.4 Le rayon de voie a_c	44
I.6 Approximation Reich-Moore (RM) de la théorie de la matrice R . .	46
I.7 Conclusion sur le chapitre	47
II Le système unifié dans la modélisation des sections efficaces et choix du système composé $^{17}\text{O}^*$ pour application	48
II.1 Introduction	48
II.2 Du référentiel du laboratoire au centre de masse (CM) dans le système composé excité	49
II.2.1 Référentiel du laboratoire avec référence au seuil d'émission du projectile (resp. ejectile)	49

II.2.2	Le référentiel unifié du centre de masse du système composé excité	50
II.2.3	L'avantage du passage du système du laboratoire au système unifié du centre de masse du noyau composé excité	51
II.2.4	Le problème de l'inversion de données	52
II.3	Justification du choix du système composé $^{17}\text{O}^*$ pour application . .	53
II.3.1	La réaction $^{16}\text{O}(n, \alpha)^{13}\text{C}$; enjeu de la sûreté des réacteurs . .	55
II.3.2	L' ^{16}O , un enjeu dans les calculs de criticité des réacteurs . .	55
II.3.3	La structure nucléaire de l' ^{17}O	55
II.3.4	Evolution en dents de scie de l'évaluation neutronique de l' ^{16}O et écarts de normalisation entre bases de données évaluées et expérimentales	56
II.3.5	Importance du système $^{17}\text{O}^*$ comme source de neutrons au sein du processus s dans le domaine d'Astrophysique	58
II.4	Conclusion sur le chapitre	59
III	L'environnement contextuel à la thèse	61
III.1	Introduction	61
III.2	Les codes de calcul pertinents	62
III.2.1	Le code CONRAD	62
III.2.2	Le code SAMMY	64
III.2.3	Le code NJOY	64
III.2.4	Le code TALYS	65
III.3	Bases de données expérimentales préalables aux études	65
III.3.1	Le système en interaction ($n + ^{16}\text{O}$)	65
III.3.2	Le système en interaction ($\alpha + ^{13}\text{C} \leftrightarrow ^{17}\text{O}^*$)	71
III.3.3	Le système en interaction ($\alpha + ^3\text{He} \leftrightarrow ^7\text{Be}^*$)	72
III.3.4	Le système en interaction ($p + ^6\text{Li} \leftrightarrow ^7\text{Be}^*$)	73
III.3.5	Le système en interaction ($n + ^{23}\text{Na} \leftrightarrow ^{24}\text{Na}^*$)	73
III.3.6	Le système en interaction ($n + ^{238}\text{U} \leftrightarrow ^{239}\text{U}^*$)	75
III.4	Les fichiers des paramètres de résonance exploités au cours de la thèse	76
III.4.1	Le fichier de paramètres évalués du système ($n + ^{16}\text{O}$)	76
III.4.2	Les fichiers de paramètres des systèmes en interaction ($\alpha + ^3\text{He}$) et ($p + ^6\text{Li}$) $\leftrightarrow ^7\text{Be}^*$	77
III.4.3	Le fichier de paramètres du système ($n + ^{23}\text{Na}$)	78
III.4.4	Le fichier de paramètres du système en interaction ($n + ^{238}\text{U}$)	79
III.5	Conclusion sur le chapitre	80
IV	Mise en place et validation du module de calcul de sections efficaces TORA (<i>T</i>ools for <i>R</i>eactions <i>A</i>nalysis))	81
IV.1	Introduction	81
IV.1.1	Justification du développement d'un nouveau module	82
IV.2	Developpement et validation de l'outil	82

IV.2.1	Formalisme de la matrice R sans approximation	82
IV.2.2	Le formalisme Reich-Moore	89
IV.3	Calcul des sections efficaces	93
IV.3.1	Calcul des sections efficaces intégrées	94
IV.3.2	Calcul des sections efficaces différentielles en angle	103
IV.4	Conclusion sur le chapitre	111
V	Premiers apports du code	112
V.1	Introduction	112
V.2	Mise en situation expérimentale de la section efficace nucléaire . . .	113
V.2.1	Effet Doppler	113
V.2.2	Fonction de résolution en énergie	114
V.2.3	Cumul des effets Doppler et Résolution	116
V.3	Traitement des niveaux extérieurs au domaine d'analyse	118
V.3.1	La méthode de duplication des résonances internes	119
V.3.2	La méthode analytique de paires de résonances externes . . .	120
V.3.3	La méthode du rayon effectif (R') constant ou variable en énergie	121
V.4	Approche spécifique à ce travail pour le traitement des résonances externes	123
V.4.1	Utilisation d'un calcul TALYS pour simuler dans le calcul matrice R la contribution de la réaction élastique directe (section efficace élastique potentielle)	124
V.5	Importance de la non inversion de données dans un ajustement . . .	129
V.6	Calcul matrice R exacte	132
V.6.1	Validation numérique du calcul TORA en matrice R	133
V.6.2	Estimation de l'imprécision apportée par l'approximation Reich-Moore sur un noyau cible moyennement léger (^{23}Na) .	133
V.6.3	Imprécision apportée par l'approximation Reich-Moore pour un noyau cible lourd (^{238}U)	138
V.6.4	Conclusion générale sur les comparaisons Reich-Moore et matrice R (ou pseudo-matrice R)	145
V.7	Conclusion sur le chapitre	146
	Conclusion	147
	Perspectives	149
	Bibliographie	152
	Annexe	160
A	Complément au calcul des coefficients des polynômes de Legendre dans le formalisme de Blatt et Biedenharn	160

B	Expression de la quantité de mouvement de la particule émise lors d'une collision entre deux particules	162
C	Transformations entre le système du laboratoire et le système du CM pour la section efficace différentielle en angle	164
D	Choix du fichier a priori pour l'ajustement de paramètres des résonances dans le référentiel unifié et résultats préliminaires obtenus	168
	Résumé court	173
	Short summary	174
	Glossaire	175

Table des figures

0.0.1 Sections efficaces totales de plusieurs noyaux de nombres de masse A différents	2
I.2.1 Le schéma d'interactions nucléaires	10
I.3.1 La subdivision de l'espace des configurations (vue unidimensionnelle).	15
I.3.2 Potentiel réel V en fonction de la distance r	17
I.3.3 Comparaison entre le rayon nucléaire R et le rayon de voie a_c	18
I.4.1 Le centre de masse et le système de coordonnées relatives des variables.	21
I.5.1 Section efficace de diffusion élastique du système $(n + {}^{16}\text{O})$ avec pour conditions aux limites $B_{cc} = S_{cc}$ et $B_{cc} = -\ell$	43
I.5.2 Section efficace de diffusion élastique du système $(n + {}^{16}\text{O})$ avec les conditions aux limites $B = S$ pour deux options différentes de choix de rayons	45
II.2.1 Comparaison des paramètres utilisés et des réactions pouvant être observées dans les méthodes classiques et la méthode unifiée dans le cas du système composé ${}^{17}\text{O}^*$	52
II.3.1 Evolution de l'évaluation de la section efficace ${}^{16}\text{O}(n, \alpha)$ dans les bibliothèques d'évaluation ENDF/B et JEFF	58
IV.2.1 Facteurs de pénétrabilité pour le système $(n + {}^{16}\text{O})$ calculés par TORA et par CONRAD	87
IV.2.2 Facteurs de décalage énergétique pour le système $(n + {}^{16}\text{O})$ calculés par TORA et par CONRAD	88
IV.2.3 Les éléments de la matrice des collisions de la voie ${}^{16}\text{O}(n, n)$ sous l'approximation Reich-Moore	90
IV.2.4 Les éléments de la matrice des collisions de la voie ${}^{16}\text{O}(n, n)$ sous l'approximation Reich-Moore (agrandissement au niveau de trois résonances positives de $J^\pi = 1/2^+$)	91
IV.2.5 Les éléments de la matrice des collisions de la voie ${}^{16}\text{O}(n, \alpha)$ sous l'approximation Reich-Moore	92
IV.2.6 Les éléments de la matrice des collisions de la voie ${}^{16}\text{O}(n, \alpha)$ sous l'approximation Reich-Moore (agrandissement au niveau des résonances positives de $J^\pi = 1/2^+$)	93

IV.3.1	Section efficace de la réaction $^{16}\text{O}(n, n)^{16}\text{O}$ calculée par TORA et comparée à celles issues de CONRAD et NJOY	95
IV.3.2	Section efficace à 0 K de la réaction $^{23}\text{Na}(n, n)^{23}\text{Na}$ calculée par TORA à partir des paramètres de la bibliothèque JEFF-3.3	96
IV.3.3	Section efficace des réactions $^{16}\text{O}(n, \alpha)^{13}\text{C}$ et $^{13}\text{C}(\alpha, n)^{16}\text{O}$ calculée par le module TORA dans le référentiel du laboratoire	97
IV.3.4	Sections efficaces des réactions $^{16}\text{O}(n, \alpha)^{13}\text{C}$ et $^{13}\text{C}(\alpha, n)^{16}\text{O}$ calculées par le module TORA dans le référentiel du CM unifié	98
IV.3.5	Section efficace neutronique totale du système $(n + ^{16}\text{O})$ calculée par TORA, CONRAD et NJOY	99
IV.3.6	Section efficace $^{16}\text{O}(n, \gamma)^{17}\text{O}$ calculée par TORA, CONRAD et NJOY	101
IV.3.7	Section efficace $^{238}\text{U}(n, \gamma)$ calculée par le module TORA et le code SAMMY	102
IV.3.8	Section efficace de la réaction $^{16}\text{O}(n, n)^{16}\text{O}$ calculée par TORA sur base des paramètres de résonances	105
IV.3.9	Section efficace de la réaction $^{16}\text{O}(n, n)^{16}\text{O}$ calculée par TORA à partir des coefficients des polynômes de Legendre expérimentaux	106
IV.3.10	Section efficace différentielle angulaire calculée sur la base des paramètres de résonance du système $(^3\text{He} + ^4\text{He})$ pour la voie $^3\text{He}(\alpha, \alpha)^3\text{He}$	108
IV.3.11	Section efficace différentielle angulaire calculée sur la base des paramètres de résonances du système $(p + ^6\text{Li})$ pour la voie $^6\text{Li}(p, \alpha)^3\text{He}$	109
IV.3.12	Section efficace différentielle angulaire calculée sur la base des paramètres de résonances du système $(p + ^6\text{Li})$ pour la voie $^6\text{Li}(p, p)^6\text{Li}$	110
V.2.1	Influence de l'effet Doppler pour deux résonances étroites dans la mesure de la section efficace neutronique totale de l' ^{16}O	114
V.2.2	Influence de l'effet Doppler et de la résolution dans la mesure de la section efficace neutronique totale de l' ^{16}O	116
V.2.3	Influence de l'effet Doppler et de la résolution dans la mesure de la section efficace neutronique totale de l' ^{16}O . Agrandissement sur l'intervalle (2,8 - 3,5 MeV)	117
V.3.1	Illustration des domaines énergétiques situés de part et d'autre du domaine d'analyse I intervenant dans le calcul de la matrice R.	119
V.4.1	Evolution des valeurs normalisées des facteurs de pénétrabilité P_ℓ en fonction de l'énergie.	125
V.4.2	Tentative d'ajustement de la section efficace totale de diffusion élastique potentielle calculée par le code TALYS	126
V.4.3	Résultats de l'ajustement des rayons de voie à la section efficace de diffusion potentielle fournie par TALYS	128

V.5.1	Comparaison pour les sections efficaces $^{16}\text{O}(\text{n}, \alpha)^{13}\text{C}$ et $^{13}\text{C}(\alpha, \text{n})^{16}\text{O}$ de calculs TORA « directs » et inversés	130
V.5.2	Comparaison pour les sections efficaces $^{16}\text{O}(\text{n}, \alpha)^{13}\text{C}$ et $^{13}\text{C}(\alpha, \text{n})^{16}\text{O}$ du calcul TORA avec respectivement la mesure de J. K. Bair et F. X. Haas ou son inverse	131
V.6.1	Section efficace de capture et de diffusion neutronique par le ^{23}Na en matrice R exacte calculée par TORA et SAMMY	132
V.6.2	Facteurs de déphasage sur sphère dure (φ) pour le moment orbital $\ell = 0$ et pour la voie $\text{n} + ^{23}\text{Na}$ calculés par TORA en utilisant les rayons de voie recommandés par JEFF-3.1 et JEFF-3.3	134
V.6.3	Section efficace de capture neutronique du ^{23}Na en fonction de l'énergie d'excitation du système composé $^{24}\text{Na}^*$ calculée par TORA en matrice R exacte	135
V.6.4	Section efficace de diffusion neutronique du ^{23}Na en fonction de l'énergie d'excitation du système composé $^{24}\text{Na}^*$ calculée par TORA en matrice R exacte	136
V.6.5	Sections efficaces de capture neutronique du ^{23}Na calculées par TORA en matrice R exacte en testant l'impact des signes des largeurs des voies de désexcitation radiative individuelles	137
V.6.6	Sections efficaces de capture neutronique de l' ^{238}U calculées par TORA en pseudo-matrice R en prenant les signes des amplitudes tels que fournis dans le fichier original	138
V.6.7	Sections efficaces de capture neutronique de l' ^{238}U calculées par TORA en pseudo-matrice R en prenant les signes des amplitudes tels que fournis dans le fichier original puis les signes des amplitudes imposés tous positifs	139
V.6.8	Sections efficaces de capture neutronique de l' ^{238}U calculées par TORA en pseudo-matrice R pour l'intervalle réduit aux énergies d'excitation entre 4807020 et 4807080 eV et en prenant des signes aléatoires des amplitudes	141
V.6.9	Sections efficaces de capture neutronique de l' ^{238}U calculées par TORA en pseudo-matrice R pour l'intervalle réduit aux énergies d'excitation entre 4807097 et 4807140 eV et en prenant des signes aléatoires des amplitudes	142
V.6.10	Sections efficaces de diffusion neutronique de l' ^{238}U calculées par TORA en pseudo-matrice R pour différentes options de signes des amplitudes	143
V.7.1	Source de neutron $\text{C} - 13(\alpha, \text{n})\text{O} - 16$ estimée par calcul sur le combustible (UPuAm)C	150
V.7.2	Modélisation des sections efficaces dans le référentiel unifié du CM du système $^{17}\text{O}^*$ par TORA	151
C.1	Collision de deux particules dans le référentiel du laboratoire.	164

C.2	Collision de deux particules dans le référentiel du CM.	165
D.1	Résultats préliminaire de l'ajustement des paramètres des résonances sur les données de transmission de Y. Danon	170
D.2	Résultats préliminaire de l'ajustement des paramètres des résonances sur les données de Cierjacks 1980 et Ohkubo 1987	171

Liste des tableaux

0.0.1 Incertitudes extraites de la bibliothèque COMAC V2.0 estimées en 2018 sur les sections efficaces neutroniques de capture (n,γ), de fission (n,f), de diffusion élastique (n,n) ou inélastique (n,n') pour les noyaux de Pu-239, U-236 et Fe-56	4
I.5.1 Résumé des différentes options pour le choix du rayon de voie prévues par le format ENDF	44
II.3.1 Récapitulatif de la présence de l'oxygène suivant le type du réacteur	54
II.3.2 Récapitulatif de la présence de l'oxygène suivant le type du réacteur dans les réacteurs de génération IV	54
II.3.3 Comparaison entre les paramètres des états liés provenant des bases d'Astrophysique et de Physique des réacteurs en utilisant le référentiel unifié.	56
III.3.1 Largeurs des transitions radiatives suite à une capture neutronique par l'isotope ^{23}Na	74
III.3.2 Largeurs de transitions radiatives de capture neutronique par l'isotope ^{238}U	75
III.4.3 Paramètres de résonance du système composé $^7\text{Be}^*$ convertis dans le référentiel du laboratoire de la particule α incidente.	77
III.4.4 Paramètres de résonance du système composé $^7\text{Be}^*$ convertis dans le référentiel du laboratoire du proton incident.	78
IV.3.1 Comparaison du résultat de calcul du module TORA et de ceux des codes CONRAD et NJOY pour la section efficace $^{16}\text{O}(n,\gamma)$ à l'énergie thermique ($E = 0,0253$ eV).	101
IV.3.2 Différentes options de présentation des sections efficaces différentielles angulaires par le module TORA.	104
IV.3.3 Les choix des expérimentateurs détectés au regard des données se trouvant dans la base EXFOR par rapport aux différentes options de présentation des sections efficaces différentielles angulaires dans les référentiels du laboratoire et du CM	105

V.2.1	Contribution de l'effet Doppler et de la résolution en énergie à la largeur à mi-hauteur (FWHM).	118
V.4.2	Energies "seuils" calculées à partir des valeurs des facteurs de pénétrabilité normalisées.	125
V.4.3	Valeurs a posteriori des coefficients $C_{\ell i}$ servant à calculer les rayons a_ℓ en fonction de l'énergie d'excitation.	127
V.6.4	Valeurs des amplitudes neutroniques (γ_n) des résonances de même $J^\pi = 2^-$ à $E_r = 35,38$ keV et $E_r = 53,04$ keV pour les fichiers JEFF-3.1 (2010) et JEFF-3.3 (2017).	134
V.6.5	Section efficace de capture neutronique par l' ^{238}U calculées en pseudo-matrice R à l'énergie thermique pour différentes options de signes des amplitudes	144
D.1	Paramètres a priori choisis pour les états liés du système composé $^{17}\text{O}^*$	169
D.2	Sections efficaces obtenues à l'énergie thermique ($E = 0,0253$ eV) avec les paramètres des résonances issus des résultats préliminaires de l'ajustement.	172

Introduction

Les données nucléaires stockées dans les bibliothèques d'évaluation constituent un outil indispensable pour les activités de production d'énergie d'origine nucléaire. Ces données interviennent notamment dans le contrôle de la réactivité d'un réacteur nucléaire dont le principe consiste à garder l'équilibre entre les naissances et les disparitions des neutrons. Cet équilibre est maîtrisé grâce au calcul du facteur de multiplication des neutrons, k_{eff} , lequel doit être maintenu proche de 1 en fonctionnement normal. Le calcul de ce facteur est conditionné entre autres aux sections efficaces des réactions nucléaires des isotopes présents dans le coeur du réacteur et issues des bases de données évaluées. L'évaluation de ces sections efficaces consiste à prédire leur comportement par des modèles théoriques implémentés dans des codes d'évaluation, lesquels sont calibrés sur les mesures expérimentales disponibles. Les modèles théoriques diffèrent suivant l'énergie du projectile et le type d'interaction du neutron avec la matière. En effet, sur le domaine d'énergie intéressant la physique des réacteurs (0-20 MeV), on observe généralement dans la forme de la section efficace des pics de résonances dont le nombre et l'espacement moyen varient d'un noyau à l'autre mais également en fonction de l'énergie. Ainsi, on distingue trois grands domaines énergétiques arbitrairement séparés : le domaine des résonances résolues en énergie (RRR), le domaine des résonances non résolues (URR) et le domaine du continuum neutronique.

Dans le RRR, les résonances sont bien identifiables (leur largeur à mi-hauteur est bien inférieure à leur espacement moyen). Les modèles théoriques appliqués pour le calcul des sections efficaces dérivent essentiellement de la théorie de la matrice R [1]. Cette dernière permet de reproduire les sections efficaces sur base de paramètres issus de l'observation des résonances (leurs largeurs à mi-hauteur, leurs énergies, etc). Les résonances observées correspondent directement aux états du système composé formé par le projectile et la cible. Les paramètres de résonance correspondent ainsi aux paramètres de structure nucléaire de ce système composé. Par projection, les largeurs à mi-hauteur sont traduites sous formes d'amplitudes réduites et les énergies des résonances matérialisent les énergies d'excitation des états du système composé. Il est donc possible d'extraire directement ces informations de structure nucléaire du système composé des résonances observées à partir des données de sections efficaces mesurées. Cette correspondance fait partie intégrante de ce travail de thèse. Dans

l'URR, les résonances sont difficilement identifiables parce qu'elles se recouvrent partiellement (pseudo-résonance). Leur largeur à mi-hauteur est supérieure à leur espacement moyen. Au-delà, dans le continuum neutronique, la section efficace devient monotone. Les résonances disparaissent progressivement remplacées par des fluctuations qui se réduisent progressivement à l'ouverture de réactions à seuil, et ce en sus de l'élargissement des résonances. Le comportement des sections efficaces au delà du RRR répond à la physique statistique. Les modèles qui y sont développés pour le calcul des sections efficaces sont : le modèle matrice R moyenne couplé à la théorie de Hauser-Feshbach [2] pour l'URR et le modèle optique aussi couplé à la théorie de Hauser-Feshbach pour le continuum. La Fig. 0.0.1 montre les sections efficaces totales correspondant à plusieurs isotopes en fonction de la valeur du nombre de masse (A).

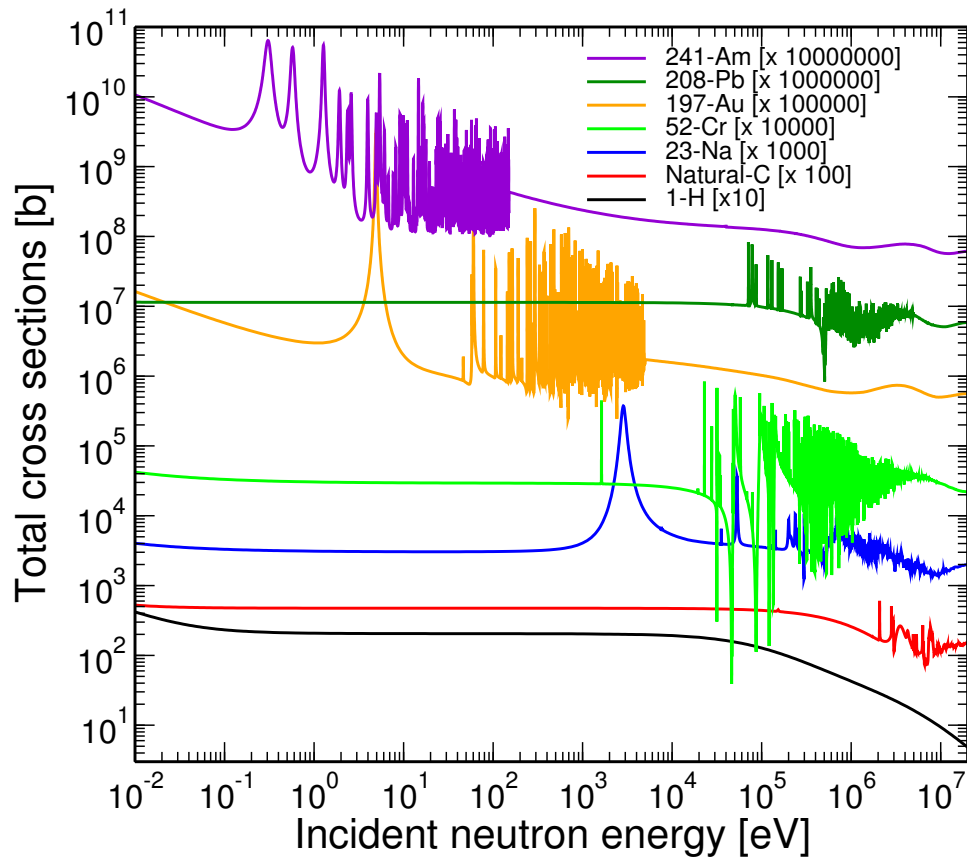


FIGURE 0.0.1 – Sections efficaces totales de plusieurs noyaux de nombre de masse A croissant (de bas en haut). Figure extraite de l'HDR d'O. Bouland [3].

La lecture de la figure dans le sens vertical permet la comparaison entre noyaux et montre un nombre de résonances observées croissant avec A . Sur le bas de l'échelle des masses se trouve l'hydrogène qui ne présente aucune résonance. Toutefois, l'isotope ^{208}Pb constitue un cas particulier par rapport aux autres

noyaux de taille comparable. En effet, bien que classé dans le lot des noyaux lourds, il présente une densité de niveaux équivalente à celle des noyaux légers et sa première résonance est observée tardivement sur le spectre en énergie à cause du nombre doublement magique de ses nucléons qui lui confère une très grande stabilité. La lecture dans le sens horizontal met en lumière le caractère croissant de la densité de niveau en fonction de l'énergie. Les noyaux de nombre de masse faible présentent un domaine RRR très vaste.

Un travail d'évaluation des sections efficaces neutroniques est justifié par un besoin argumenté d'amélioration de leur précision. Ce besoin est généralement exprimé par l'industrie nucléaire Française, les projets applicatifs du CEA (Commissariat à l'Energie Atomique et aux Energies Alternatives) ou par la communauté européenne au travers du projet JEFF (Joint Evaluated Fission and Fusion File) auquel le CEA contribue fortement. Pour répondre à ce besoin, le physicien nucléaire spécialisé dans l'évaluation des données nucléaires (dans ce travail, sous l'expression de sections efficaces) doit apprécier les possibilités d'amélioration à partir des bases de données expérimentales et des modèles nucléaires disponibles. Ces améliorations s'articulent souvent autour de nouvelles campagnes de mesures auprès d'accélérateurs, en réacteurs maquettes ou de puissance du parc nucléaire, en association avec l'utilisation de modèles nucléaires plus raffinés.

Dans les années 70 et 80, le niveau de méconnaissance élevé relatif aux données nucléaires ne transparaissait pas directement dans les calculs de grandeurs d'intérêt pour la physique des réacteurs. En effet, le grand nombre d'approximations utilisées pour résoudre l'équation de Boltzmann du transport des neutrons dans un cœur de réacteur nucléaire (e.g. ; discrétisation énergétique, distribution énergétique secondaire lors d'une collision élastique d'un neutron avec un noyau ou encore l'autoprotection du flux neutronique comme illustrée dans la ref.[4]) masquait le poids des incertitudes sur les données nucléaires d'entrées. Il y avait peu de possibilités de recours à des méthodes plus précises, dites « de référence » (calculs déterministes multigroupes hyperfins, calculs stochastiques Monte Carlo) du fait des temps de calcul prohibitifs. Les grandeurs neutroniques caractéristiques des réacteurs (e.g. ; le coefficient de multiplication effectif des neutrons k_{eff}) étaient néanmoins reproduites de façon satisfaisante, essentiellement du fait de compensations d'erreurs. Au cours des deux dernières décennies, les progrès en termes de puissance de calcul ont permis de s'affranchir de bon nombre d'approximations, de sorte que les biais sur les résultats des calculs de réacteur ont diminué plus rapidement que les incertitudes relatives aux données nucléaires. Aujourd'hui, ces dernières gouvernent donc la précision finale sur les grandeurs neutroniques obtenues au moyen de simulations de référence.

Borne inférieure du groupe [eV]	Incertitudes [%] fournies par COMAC V2.0 sur les sections efficaces neutroniques						
Isotopes cibles	Pu-239		U-236		Fe-56		
Réactions	$\sigma(n, \gamma)$	$\sigma(n, f)$	$\sigma(n, \gamma)$	$\sigma(n, f)$	$\sigma(n, n)$	$\sigma(n, n')$	$\sigma(n, \gamma)$
1.000000E-05	4	1	2	20	5		3
1.000000E-01	4	2	2	20	5		3
5.400000E-01	4	1	4	50	5		3
4.000000E+00	7	3	4	50	5		3
2.260329E+01	7	3	4	50	5		3
4.539993E+02	5	3	4	50	7		9
2.034684E+03	3	2	3	35	6		15
9.118820E+03	3	2	5	45	6		15
2.478752E+04	4	2	5	42	6		15
6.737947E+04	3	2	4	32	6		13
1.831564E+05	4	2	7	31	4		14
4.978707E+05	9	2	8	30	5	6	13
1.353353E+06	13	1	20	30	6	4	14
2.231302E+06	19	2	35	19	8	4	15
6.065307E+06	2	2	48	12	8	2	19

TABLE 0.0.1 – Incertitudes estimées en 2018 extraites de la bibliothèque de Cadarache de matrices de variance-covariance COMAC V2.0 sur les sections efficaces neutroniques de capture (n, γ), de fission (n,f), de diffusion élastique (n,n) ou inélastique (n,n') pour les noyaux de Pu-239, U-236 et Fe-56 dans le domaine énergétique de la physique des réacteurs [0-20MeV] lesquelles sont présentées sur une structure en 15 groupes d'énergie.

Le tableau 0.0.1 reporte l'incertitude estimée et tabulée dans la bibliothèque COMAC V2.0 [5] (COvariance MATrices of Cadarache) sur quelques sections efficaces d'importance de noyaux intéressant la physique des réacteurs. Nous trouvons ainsi les données relatives à un actinide principal (Pu-239) présent dans les combustibles MOX neufs à hauteur de 56% (molaire) du vecteur Pu, un actinide secondaire (U-236) important pour le cycle du combustible et produit par capture neutronique de l' U-235 et un noyau de masse intermédiaire (Fe-56) impliqué notamment dans les aciers (cuve du réacteur) ou constituant de la gaine en Zircaloy des crayons combustibles. Le constat est le suivant : en ce qui concerne un noyau lourd majeur comme le Pu-239, la précision sur sa section efficace de fission, $\sigma(n, f)$, recouvre les limites technologiques expérimentales ($\sim 3\%$) tandis que celle sur sa capture, $\sigma(n, \gamma)$, peut encore être améliorée en concevant et réalisant de nouvelles expériences. Nous soulignerons que les mesures de section efficace moyenne de capture pour un isotope fissionnant dans le domaine des énergies supérieures au domaine des résonances résolues ($E > 2,5$ keV pour cet isotope) présente un défi expérimental démontré généralement par le nombre limité de jeux de données relâchées par la communauté scientifique. Ce constat se vérifie aussi pour un noyau secondaire comme l'U-236 dont la précision sur la capture dans le domaine des résonances ($E < 70$ keV) est comparable ($\sim 5\%$) à celle du

Pu-239. L'incertitude très élevée ($> 20\%$) sur la section efficace de fission sur tout le spectre neutronique [0-20MeV] pour l'U-236 provient clairement d'une base expérimentale incomplète. Le tableau 1 présente aussi l'état de la connaissance sur les sections efficaces neutroniques du Fe-56 qui a fait l'objet d'une attention particulière (ref. [6]) puisque l'estimation de ses incertitudes repose à la fois sur un processus d'assimilation de données expérimentales différentielles (microscopiques) et intégrales (macroscopiques) contrairement aux incertitudes des Pu-239 et U-236 qui ne reposent que sur une base expérimentale différentielle. On réalise que même dans l'approche rigoureuse menée pour le Fe-56, le niveau d'incertitude ne descend pas sous la barre des 3-5%. Au final, ces considérations suggèrent que, pour porter la précision des sections efficaces nucléaires à la hauteur du pourcent (précision estimée sur les sections efficaces des noyaux de référence pour les mesures et dénommées de « standards » (ref. COMAC V2.0 [5]) Pu-239 : $\sigma(n, f)$; U-238 : $\sigma(n, f)$, $\sigma(n, \gamma)$; U-235 : $\sigma(n, f)$; Au-197 : $\sigma(n, \gamma)$; B-10 : $\sigma(n, \alpha_0)$, $\sigma(n, \alpha_1)$; Li-6 : $\sigma(n, t)$, il ne sera pas suffisant de compter uniquement sur les progrès en terme de techniques expérimentales. Un changement de philosophie pour l'évaluation des données nucléaires est recherché et dont la partie « théorique » est l'objet de ce travail de thèse. Au-delà du développement de nouvelles techniques expérimentales, ce changement d'approche recouvre :

- A) Une meilleure modélisation en intégrant davantage de modèles théoriques microscopiques. Ceci limite le recours à la phénoménologie et permet une réduction du nombre de paramètres ajustables ;
- B) Une évaluation et une propagation complète et systématique des incertitudes et corrélations d'erreurs expérimentales dans les calculs ;
- C) Un changement de référentiel dans le travail d'évaluation, qui consiste à passer du référentiel « historique » des neutrons incidents à celui du système composé excité de masse A^* , formé du neutron (1 nucléon) et du noyau cible ($A-1$ nucléons), dont le défi sera expliqué ci-après.

Une première étape, concourant à satisfaire le point A, a été atteinte en 2015 au travers de la thèse de P. Tamagno [7] en raccordant le calcul de la section efficace de fission à un calcul macro-microscopique de l'énergie de déformation du noyau. Le point B est quant à lui maintenant parfaitement digéré avec notamment au cours de la dernière décade, le développement dans l'ajustement des sections efficaces d'une procédure de marginalisation des incertitudes expérimentales systématiques, c'est à dire pour le traitement effectif des incertitudes sur les paramètres propres à chaque expérience (normalisation, bruit de fond, température, etc.) et ce, sur la base d'un échantillonnage Monte Carlo de leur distribution a priori [8].

Le point C motivant ce travail de thèse, permet de franchir une nouvelle étape dans l'évaluation des données nucléaires en visant une harmonisation des modèles

et paramètres utilisés dans la modélisation des observables. En considérant comme référentiel de travail le système composé, il est possible d'étendre l'assise des données expérimentales, utilisées directement comme base de l'évaluation, à de nouveau type de données. Historiquement justifié pour la physique des réacteurs, le cadre restreint du référentiel « neutron plus cible » est devenu trop contraignant [3] pour une amélioration significative de la connaissance sur les données nucléaires. En attaquant le point C, cette thèse se propose de rapprocher les activités d'évaluation dédiées à la physique neutronique aux activités correspondantes menées pour l'astrophysique ou pour la spectroscopie nucléaire, avec partage des bases expérimentales et des bases théoriques de paramètres nucléaires fondamentaux. Avant de décrire plus amplement la méthode et pour mieux comprendre d'où nous venons, il convient de faire un saut rapide non exhaustif dans le passé (ces 40 dernières années) de l'évaluation des données nucléaires pour la physique des réacteurs. Depuis longtemps, de nombreuses installations expérimentales pour l'investigation des sections efficaces microscopiques sont disponibles et nous citerons dans notre domaine les installations existantes ou ayant existé proposant comme ORELA de ORNL [9], GELINA de Geel [10], GLELA de RPI [11] ou encore les accélérateurs linéaires d'électrons de 45 MeV et 100 MeV respectivement de Harwell et du Lawrence Livermore Laboratory des spectres blancs en neutrons ou comme pour les accélérateurs de particules chargées de type Van de Graaff de FZK à Karlsruhe et de Geel des neutrons « monoénergétiques » plus spécialisés à l'investigation du domaine des résonances non résolues en énergie. Couplé à ces installations différentielles, un développement d'outils d'analyse dédiés à l'ajustement par moindres carrés généralisés des paramètres de résonance des sections efficaces neutroniques reproduisant les mesures comme les codes de calcul de matrice R en approximation multivoies MULTI par G. F. Auchampaugh à Los Alamos, SAMMY par N. M. Larson à ORNL ou encore REFIT par M. Moxon à Harwell. Presque la quasi-totalité des codes d'analyse contribuant à l'évaluation des données nucléaires pour la physique des réacteurs a été conçue dans l'esprit « spectroscopie neutronique », c'est à dire pour le traitement de particules neutres en voies d'entrée. Plus récemment, le besoin de reproduire les sections efficaces de noyaux légers sous forme paramétrique et non plus uniquement sous forme de sections efficaces ponctuelles en énergie, a été exprimé. Ainsi, un survol de l'historique du code SAMMY illustre bien les progrès faits en la matière. Suite à un travail d'évaluation des sections efficaces neutroniques [12] de l'O-16, la question de l'introduction dans la procédure d'ajustement des paramètres de la voie (n, α) , reposant sur des mesures différentielles $^{13}\text{C}(\alpha, n)^{16}\text{O}$ avec particules chargées en voie d'entrée est devenue critique. La solution choisie à l'époque fut de renverser temporellement les données expérimentales $^{13}\text{C}(\alpha, n)^{16}\text{O}$ de façon à ajouter dans la base de mesures neutroniques les pseudo-mesures $^{16}\text{O}(n, \alpha)^{13}\text{C}$. Ce qui demandât alors un effort réduit de modification des équations de la section efficace de réaction dans le code SAMMY pour traiter les particules chargées au moins en voie de sortie. Au-delà de ce changement limité, la justification pour traiter seulement

des données expérimentales renversées temporellement résidait dans la difficulté à ajuster des données simultanément dans le référentiel du laboratoire du neutron incident et des données dans le référentiel du laboratoire de l' α incident. On réalise promptement les sources potentielles d'erreurs d'implémentation suite au changement permanent de référentiel pour un ajustement de mesures variées. Par la suite, le traitement des particules chargées en voie d'entrée a été opérationnel et donc le calcul de la section efficace $^{13}\text{C}(\alpha, n)^{16}\text{O}$ mais toujours pas l'ajustement simultané d'un jeu unique de paramètres de résonance reproduisant à la fois les sections efficaces mesurées en spectroscopie neutron avec $^{16}\text{O}(n, \text{tot})$, $^{16}\text{O}(n, n)$, $^{16}\text{O}(n, \gamma)$, $^{16}\text{O}(n, \alpha)^{13}\text{C}$, etc. et en spectroscopie α avec $^{13}\text{C}(\alpha, n)^{16}\text{O}$. Cet objectif est maintenant réalisé suite au développement du module TORA (TOols for Reactions Analysis) du code CONRAD (COde for Nuclear Reaction, Analysis and Data Assimilation). Nous signalons néanmoins que parmi notre communauté scientifique qui comprend maintenant de nombreux codes d'évaluation dédiés comme AMUR, AZURE2, CONRAD, EDA, FRESCO, GECCOS, et SAMMY, une migration générale des codes vers un référentiel commun à toutes mesures et un jeu unique de paramètres de résonance est maintenant effective. Nous insisterons aussi sur le fait qu'un code au moins fut précurseur en la matière : le code EDA (Energy Dependent Analysis) développé par G.M. Hale [13] au Laboratoire National de Los Alamos mais la littérature restreinte traitant de la physique du code depuis son origine avait permis seulement de le pressentir.

Plus dans le détail, l'approche unifiée comme implémentée dans le module TORA, consiste à considérer l'interaction neutron incident - noyau cible comme une voie particulière de formation du système composé A^* . Un même système composé peut être obtenu par des réactions de capture neutronique $[n + (A - 1) \rightarrow A^*]$ mais aussi par des réactions réciproques sur le modèle $[A^* \leftarrow \alpha + (A - 4)]$, ou en ce qui concerne les noyaux lourds par des réactions dites de substitution [14] [projectile+ cible de substitution $\rightarrow A^* + \text{éjectile}$] ou encore par d'autres voies alternatives telles que $[\text{photon} + A \rightarrow A^*]$ (non implémenté dans cette thèse). Ces dernières renvoient à des mesures différentielles de photo-excitation nucléaires ainsi qu'à l'analyse des distributions angulaires des fragments de fission associées et peuvent être une nouvelle source de données expérimentales. Suite à la dynamique générale de changement de cadre pour l'évaluation des sections efficaces neutroniques, une évolution du code CONRAD a été réalisée par P. Tamagno en parallèle de ce travail de thèse et validée [15] au travers d'un exercice international traitant du système $\text{Be}^* - 7$. Pour une compréhension plus fine du changement de paradigme initié, nous mettons en lumière que les paramètres choisis du modèle ne sont plus les largeurs à mi-hauteur, Γ_c , des voies c de formation ou de désexcitation du système composé mais les amplitudes réduites associées, γ_c , indépendantes du référentiel en énergie des mesures et que, les énergies des résonances sont reportées en terme d'énergie d'excitation du système composé avec pour origine de l'échelle le niveau fondamental en équilibre du système composé. Les données nucléaires

issues de l'ajustement des sections efficaces mesurées sont maintenant parfaitement compatibles à des données de structure nucléaire et directement comparables aux résultats issus de l'astrophysique [16].

Le plan suivi par ce manuscrit est le suivant :

- En préambule (Chapitre I), un rappel des différents types de réactions nucléaires en jeu dans le domaine énergétique des résonances au-dessus du seuil d'émission neutronique ainsi que le cadre théorique (matrice R et approximation Reich-Moore) appliqué à la modélisation des sections efficaces,
- La description (Chapitre II) exhaustive du référentiel unifié sous l'expression du centre de masse (CM) du système composé et son énergie d'excitation ; ainsi que la justification du choix du système composé $^{17}\text{O}^*$ pour la démonstration de la méthode,
- L'environnement contextuel de la thèse (chapitre III) avec les codes concurrents au code CONRAD et l'information expérimentale microscopique relative à l' $^{17}\text{O}^*$ permettant le support de la démonstration,
- L'implémentation du module TORA (Chapitre IV), pierre angulaire de ce travail de thèse, conçu dans le système du CM avec une description conjointe des résonances en terme d'énergie de désexcitation du système composé. La validation numérique rigoureuse établie sur les systèmes $^{17}\text{O}^*$ et $^7\text{Be}^*$ de l'outil TORA est disséminée parmi la description des sections efficaces mesurées décrites au chapitre précédent,
- Les premiers apports du code en terme qualitatif de sources d'erreurs dans la procédure usuelle d'ajustement de sections efficaces.

Nous concluons naturellement par les enseignements issus de ce travail et les perspectives que cette méthode unifiée nous donne en matière de réduction des incertitudes sur les données nucléaires.

Chapitre I

Théorie des réactions nucléaires

I.1 Introduction

La théorie servant de base à la production des sections efficaces résonnantes dans la région des résonances résolues (RRR) est la *théorie de la matrice R* [1]. Dans cette théorie, les sections efficaces sont issues des paramètres correspondant aux propriétés des états du noyau formé, *le système composé* (SC), et des propriétés intrinsèques des particules en interaction. Ces propriétés sont entre autres les énergies propres et les fonctions propres des états du noyau composé, les spins intrinsèques de la cible et du projectile, etc.

L'objectif de ce chapitre est de rappeler les différents formalismes de l'approximation de la théorie de la matrice R. Nous nous efforcerons d'expliquer le cheminement emprunté par un processus de calcul théorique de sections efficaces au sein de cette théorie en mettant l'accent sur la manière dont les différents composants des modèles sont obtenus à partir d'un formalisme matrice R général sans approximation. Pour cela, nous suivrons la démarche souvent utilisée par les auteurs en partant d'un cas simple [1] d'une particule neutre sans spin diffusé par un noyau sans spin puis nous présenterons le principe dans un cadre plus général. Nous présenterons une des approximations classiques effectuées à partir du formalisme général et qui aboutit à un formalisme beaucoup plus léger approprié aux codes d'évaluation. Nous reviendrons sur les aspects du modèle optique [17, 18] qui permettent d'expliquer les phénomènes présents aux basses énergies mais qui ne relèvent pas du cadre de la matrice R.

I.2 Les différents types d'interaction en physique nucléaire

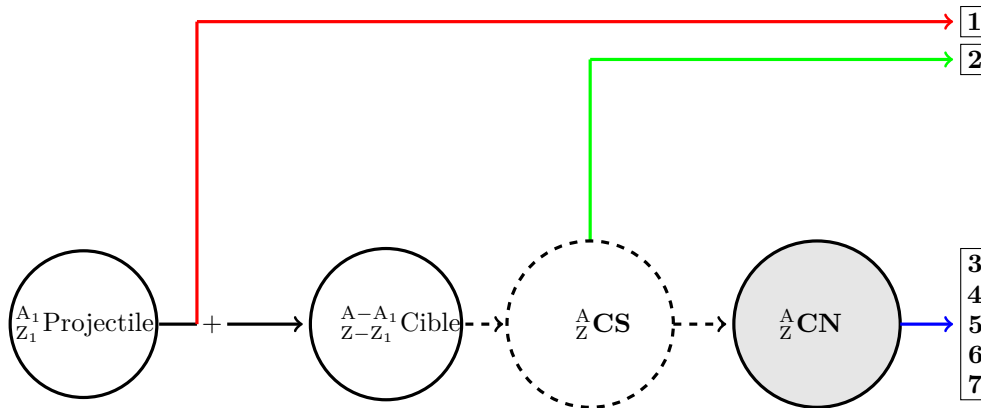


FIGURE I.2.1 – Le schéma d'interactions nucléaires. L'onde associée à la particule incidente est représentée par les flèches en noir (à distinguer avec les flèches noires en pointillé qui représentent le passage d'une étape à une autre), la diffusion directe par le potentiel est représentée par la flèche en rouge, la désexcitation du système composé (CS - *compound system* en anglais) est représentée par la flèche en vert et la désexcitation du noyau composé (CN - *compound nucleus* en anglais) par la flèche en bleu.

Plusieurs types d'interaction nucléaire peuvent être observés suivant l'énergie du projectile incident [19]. Les phases communes à toute interaction sont les phases de réflexion et d'absorption de l'onde incidente par la cible dans la voie d'entrée. La cible est considérée comme un puits de potentiel complexe dont la partie réelle diffuse et la partie imaginaire absorbe. Ainsi, une partie de l'onde incidente est diffusée à la surface : on parlera de *diffusion élastique potentielle* ou *shape-elastic*. Une autre partie est absorbée par la cible : on parlera d'*absorption*. La seconde phase de l'interaction repose sur la partie de l'onde absorbée. L'énergie de la particule incidente peut être suffisamment grande pour qu'elle ait le temps de se dissiper sur tous les nucléons de la cible. Seules les interactions dites *directes* ou *semi-directes* sont alors possibles. Dans le cas contraire, la particule incidente passe un temps suffisamment long dans la cible. Le système formé par le projectile et la cible "*oublie*" la manière dont il a été formé [20]. Toute l'énergie du projectile est répartie entre tous les nucléons de la cible. La particule incidente et la cible ne formant qu'une seule entité, on parle alors de *noyau composé*. Le noyau composé se trouve toujours dans un état excité. Il existe plusieurs possibilités de désexcitation de ce noyau par : diffusion élastique, diffusion inélastique, émission d'une particule de nature différente de celle du projectile, émission radiative ou fission. L'émission simultanée de plusieurs particules (de natures différentes ou non, sauf l'émission de neutrons lors de la fission) n'est pas prise en charge par le formalisme de la

matrice R qui traite uniquement les interactions à deux corps. Sur la Figure I.2.1, les chiffres 1 à 7 sont des étiquettes des différents modes de désexcitation. On distingue :

- *Les phénomènes directs ou semi-directs*
 1. La diffusion élastique potentielle ;
 2. Les autres réactions directes et semi-directes (la capture, les diffusions inélastiques, etc.).
- *Les phénomènes dits du noyau composé*
 3. La diffusion élastique composée ;
 4. La désexcitation radiative ;
 5. L'émission de particule (si énergétiquement possible) ;
 6. La fission (s'il y a lieu) ;
 7. Les diffusions inélastiques.

I.2.1 Les réactions directes

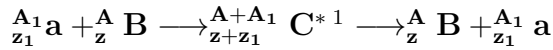
Le domaine des résonances résolues (RRR) est dominé par les réactions dites du noyau composé (NC). Toutefois, on y rencontre aussi des réactions qui découlent des phénomènes directs. La plus dominante, toujours présente, de ces réactions pour les noyaux légers est la diffusion élastique directe ou *shape-elastic*. Deux autres types de réactions, la capture et la diffusion inélastique directe, sont également présentes. Elles se manifestent à basse énergie par le recouvrement de la queue de la résonance géante qui survient à plus haute énergie. La diffusion directe est assimilée dans *la matrice de collision* suivant la relation (I.5.4) qui sera présentée au paragraphe I.5.1. La capture directe et la diffusion inélastique directe peuvent être calculées par modèle optique [18]. Ces contributions directes sur la section efficace totale dans le domaine des résonances résolues peut être toutefois très minimes. Il est possible de comptabiliser la contribution des réactions directes qui surviennent à plus haute énergie en modélisant correctement l'influence des résonances externes sur le domaine des résonances résolues. D'une certaine façon, la contribution des réactions semi-directes peut être simulée aussi par les résonances externes du noyau composé.

I.2.2 Les réactions nucléaires du noyau composé

I.2.2.1 La diffusion

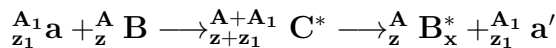
Au cours d'une réaction de diffusion, une particule de même type que le projectile est recueillie dans la voie de sortie. On distingue deux types de diffusion : la diffusion élastique et la diffusion inélastique.

La diffusion élastique Lors de la diffusion élastique, le projectile est absorbé par la cible et a le temps de former un noyau composé. Une particule de même nature et de même énergie est réémise par le noyau composé. Le processus peut-être résumé ainsi



Où ${}_{z_1}^{A_1}a$ et ${}_z^A B$ sont respectivement le projectile (ou éjectile) et la cible (ou noyau résiduel). La charge et le nombre de masse de la cible (ou noyau résiduel) sont respectivement z et A . Pour le projectile (ou éjectile), ils sont respectivement z_1 et A_1 . Le noyau ${}_{z+z_1}^{A+A_1} C^*$ représente le noyau composé éventuellement excité avec $z + z_1$ et $A + A_1$ comme charge et nombre de masse.

La diffusion inélastique Le processus de diffusion inélastique est similaire à la diffusion élastique. La différence réside dans le fait que la particule émise par le noyau composé possède une énergie différente de celle de la particule incidente dans le centre de masse. Une partie de l'énergie du projectile a donc été transmise à la cible qui reste dans un état excité du NC. On parlera de diffusion inélastique de niveau 1 si l'état d'équilibre du noyau résiduel après la désintégration du noyau composé correspond à son premier état excité. On parlera de diffusion inélastique de niveau 2 si l'état d'équilibre de la cible est dans son second état excité, etc. Le processus peut-être résumé ainsi



Où ${}_{z_1}^{A_1}a$ et ${}_z^A B$ sont respectivement le projectile et la cible. Les particules ${}_{z_1}^{A_1}a'$ et ${}_z^A B_x^*$ sont l'éjectile et le noyau résiduel dans son état excité x. La charge et le nombre de masse de la cible (ou noyau résiduel) sont respectivement z et A . Pour le projectile (ou éjectile), ils sont respectivement z_1 et A_1 . Le noyau ${}_{z+z_1}^{A+A_1} C^*$ représente le noyau composé avec $z + z_1$ et $A + A_1$ comme charge et nombre de masse.

I.2.2.2 L'absorption

On parle d'absorption lorsque lors de la collision entre la particule incidente et la cible, les particules obtenues dans la voie de sortie sont de nature différente de celle des particules de la voie d'entrée. Les réactions dénombrées dans ce cas sont : l'émission de particules, la fission et la capture.

Emission de particules Au cours de l'interaction entre le projectile et la cible, le projectile est "piégé" dans le noyau composé. Dans la voie de sortie, une

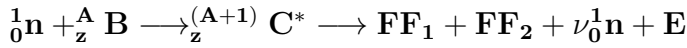
1. Le signe * signifie dans toute la section I.2.2 un système composé dans son état excité.

particule différente du projectile avec un noyau résiduel différent de la cible sont recueillis. Le noyau résiduel peut se trouver dans un état excité (x) ou dans son état fondamental (0). Le processus peut être résumé ainsi

1. $\frac{A_1}{z_1}a + \frac{A}{z}B \longrightarrow \frac{A+A_1}{z+z_1}C^* \longrightarrow \frac{A+A_1-A_2}{z+z_1-z_2}D_0 + \frac{A_2}{z_2}d$ (le noyau résiduel se trouve dans l'état fondamental).
2. $\frac{A_1}{z_1}a + \frac{A}{z}B \longrightarrow \frac{A+A_1}{z+z_1}C^* \longrightarrow \frac{A+A_1-A_2}{z+z_1-z_2}D_x^* + \frac{A_2}{z_2}d'$ (le noyau résiduel se trouve dans l'état excité).

Le projectile et la cible sont représentés par $\frac{A_1}{z_1}a$ et $\frac{A}{z}B$. La charge et le nombre de masse de la cible sont respectivement z et A . Ils sont respectivement z_1 et A_1 pour le projectile. Le noyau composé est $\frac{A+A_1}{z+z_1}C^*$ avec $z+z_1$ et $A+A_1$ comme charge et nombre de masse. Le noyau résiduel $\frac{A+A_1-A_2}{z+z_1-z_2}D$ se trouve dans l'état fondamental pour le premier cas et dans un état excité pour le second avec, respectivement, $\frac{A_2}{z_2}d$ et $\frac{A_2}{z_2}d'$ comme éjectile.

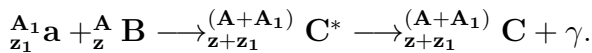
La fission On parle de fission quand, au cours de l'interaction entre la particule incidente et la cible, le noyau composé se scinde essentiellement en deux pour donner deux noyaux plus légers accompagnés d'une émission de deux ou trois neutrons. Ces deux noyaux sont appelés fragments de fission. On relèvera en particulier deux types de fission suivant la particule incidente : la fission induite par neutrons et la fission induite par photons (photofission). La fission est une réaction exothermique. Environ 200 MeV sont dégagés par la réaction. Le schéma ci-dessous résume le processus de fission induite par neutron



Sur le schéma, on retrouve respectivement le neutron ${}_0^1n$, la cible $\frac{A}{z}B$, le noyau composé $\frac{(A+1)}{z}C^*$, les deux fragments de fission FF_1 et FF_2 , la multiplicité des neutrons émis ν et l'énergie dégagée E .

Le processus de fission ne fait pas partie des réactions explorées dans cette thèse. Pour une description exhaustive du sujet, nous invitons le lecteur à se reporter à la thèse de P. Tamagno [21].

La capture Lorsque la particule incidente est absorbée par la cible, il arrive que le noyau composé, qui se trouve dans un état excité, se désexcite en émettant une cascade de rayons gamma. On parle de réaction de capture radiative. Ce processus est résumé ainsi



Sur le schéma $\mathbf{A}_1 \mathbf{a}$, $\mathbf{A} \mathbf{B}$, $\mathbf{C}^*$, $\mathbf{C}$ et γ représentent respectivement le projectile, la cible, le noyau composé, le noyau résiduel et les rayons gammas (sans charge, ni masse).

I.3 La subdivision de l'espace des configurations

Dans la théorie de la matrice R [1], l'espace est subdivisé en deux régions sur la base de la portée du potentiel nucléaire. L'espace dans lequel la particule incidente peut "sentir" l'effet du potentiel nucléaire de la part du noyau de la cible est appelé *espace* ou *région interne*. Tout point de l'espace en dehors de cet espace se situe dans l'*espace* ou *région externe*. Les deux régions sont limitées par une frontière virtuelle appelée *surface des voies* ou *surface de séparation*. Le rayon associé à cette surface de séparation est appelé le *rayon de voie* a_c . Pour garantir la continuité de la fonction d'onde entre les deux régions, on s'assure que les valeurs de la fonction d'onde dans la région interne (Ψ^{int}) et dans la région externe (Ψ^{ext}) ainsi que celles de leurs dérivées respectives ($\frac{d}{dr}\Psi^{\text{int}}$ et $\frac{d}{dr}\Psi^{\text{ext}}$) soient les mêmes à la surface des voies (en $r = a_c$)

$$\begin{aligned}\Psi^{\text{ext}}(r = a_c) &= \Psi^{\text{int}}(r = a_c) \\ \frac{d}{dr}\Psi^{\text{ext}}|_{r=a_c} &= \frac{d}{dr}\Psi^{\text{int}}|_{r=a_c}\end{aligned}\tag{I.3.1}$$

où r est la distance séparant les deux particules (le projectile et la cible) en interaction. Le rayon de voie a_c à l'échelle nucléaire est souvent exprimé en Fermi ou femtomètres ($1\text{fm} = 10^{-15}\text{m}$). C'est la portée du potentiel nucléaire $V_{\text{nucl.}}(r)$ qui détermine la surface de séparation entre la région interne et la région externe. La théorie de la matrice R impose que le potentiel nucléaire soit non nul dans la région interne ($V_{\text{nucl.}}(r) \neq 0$ pour $r < a_c$) et soit nul dans la région externe ($V_{\text{nucl.}}(r) = 0$ pour $r > a_c$). La Figure I.3.1 constitue une illustration unidimensionnelle de la subdivision de l'espace des configurations.

I.3.1 L'espace interne

L'espace interne est à la fois le siège du potentiel nucléaire (interaction forte), du potentiel Coulombien.

$$V(r) = V_{\text{nucl.}}(r) + V_{\text{coul.}}(r)\tag{I.3.2}$$

Dans le formalisme de la matrice R, qui est appliqué dans la région des résonances résolues en énergie (RRR), le potentiel interne est inconnu. Cependant, ce formalisme partage le point de vue du modèle optique qui considère que l'interaction projectile-noyau cible comme une diffusion-absorption de la lumière par une sphère de verre [22]. En effet le phénomène de diffusion directe observé aussi bien à basse énergie qu'à haute énergie, est expliqué en considérant un potentiel nucléaire à la fois diffusant et absorbant.

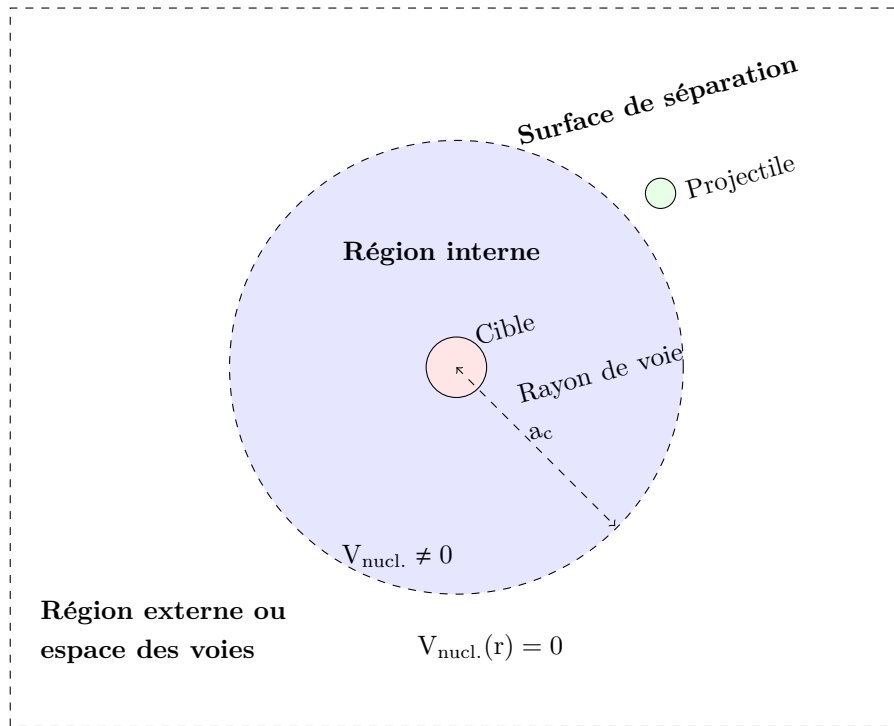


FIGURE I.3.1 – La subdivision de l'espace des configurations (vue unidimensionnelle).

Au début des années 1950, l'approche du modèle optique s'affrontait avec celle de H. Feshbach et V. F. Weisskopf [23] qui reposait uniquement sur les conditions aux limites et qui ne semble pas avoir eu beaucoup de succès. Le modèle optique était lui soutenu par R. E. Le Levier et D. S. Saxon [22] qui considéraient qu'une partie de l'onde incidente est diffusée et l'autre absorbée par un potentiel complexe carré. En 1954, R. D. Woods et D. S. Saxon [24] ont proposé un modèle qui remplace le potentiel complexe carré par un potentiel complexe à bord diffus. La diffusion du projectile par un potentiel complexe n'est pas la seule à avoir été proposée en théorie de la matrice R. Avant Le Levier-Saxon et Woods-Saxon, Bethe avait proposé en 1935 [25] un modèle qui s'appuie sur un potentiel réel carré. Les trois différents modèles se présentent donc ainsi

- Le potentiel réel carré de Bethe [25]

$$V_{\text{nucl.}}(r) = \begin{cases} -V_0 & \text{pour } r < a_c \\ 0 & \text{pour } r > a_c \end{cases} \quad (\text{I.3.3})$$

- Le potentiel complexe carré de R. E. Le Levier et D. S. Saxon [22]

$$V_{\text{nucl.}}(r) = \begin{cases} -V_0 - iW_0 & \text{pour } r < a_c \\ 0 & \text{pour } r > a_c \end{cases} \quad (\text{I.3.4})$$

- Le potentiel complexe à bords diffus, dit *potentiel de Woods-Saxon*, de R. D. Woods et D. S. Saxon [24]

$$V_{\text{nucl.}}(r) = \begin{cases} -\frac{V_0+iW_0}{1+e^{(r-R)/\delta}} & \text{pour } r < a_c \\ 0 & \text{pour } r > a_c \end{cases} \quad (\text{I.3.5})$$

La forme du potentiel de *Woods-Saxon* a rencontré beaucoup de succès. L'application du potentiel complexe carré et du potentiel complexe de *Woods-Saxon* à la théorie des résonances par E. Vogt [26] a démontré que la structure nucléaire est mieux décrite par un potentiel à bord diffus. Les parties réelle et imaginaire de ce potentiel sont

$$V_{\text{nucl.}}(r) = \frac{-V_0}{1 + e^{(r-R)/\delta}} \quad (\text{I.3.6})$$

et

$$W_{\text{nucl.}}(r) = \frac{-W_0}{1 + e^{(r-R)/\delta}} \quad (\text{I.3.7})$$

On définit le facteur f dit "*facteur de forme de Wood-Saxon*"

$$f = \frac{1}{1 + e^{(r-R)/\delta}} \quad (\text{I.3.8})$$

La partie réelle du potentiel est responsable de la diffusion et celle imaginaire est responsable de l'absorption. Les paramètres du potentiel sont la profondeur du puits de potentiel V_0 ou W_0 suivant que la partie du potentiel considérée est réelle ou imaginaire, la distance r entre le projectile et la cible, le rayon nucléaire R et la diffusivité δ . Le rayon nucléaire est défini par

$$R = r_0 A^{\frac{1}{3}} \quad (\text{I.3.9})$$

Où le paramètre r_0 est appelé rayon nucléaire réduit et A est le nombre de masse du noyau cible. La partie imaginaire W_0 du puits de potentiel est une fraction de la partie réelle V_0 et est écrite

$$W_0 = \xi V_0 \quad (\text{I.3.10})$$

La valeur de ξ augmente avec l'énergie [19]. Un calcul rapide sur base, par exemple, des paramètres fournis dans la référence [27] ($V_0 = 42$ MeV, $R = 1.25A^{\frac{1}{3}} \times 10^{-13}$ cm, $\delta = 0.58 \times 10^{-13}$ cm) permet de visualiser la forme du potentiel réel $V(r)$ en fonction de la distance r . La figure I.3.2 montre la forme de ce potentiel pour un noyau de nombre de masse $A=16$.

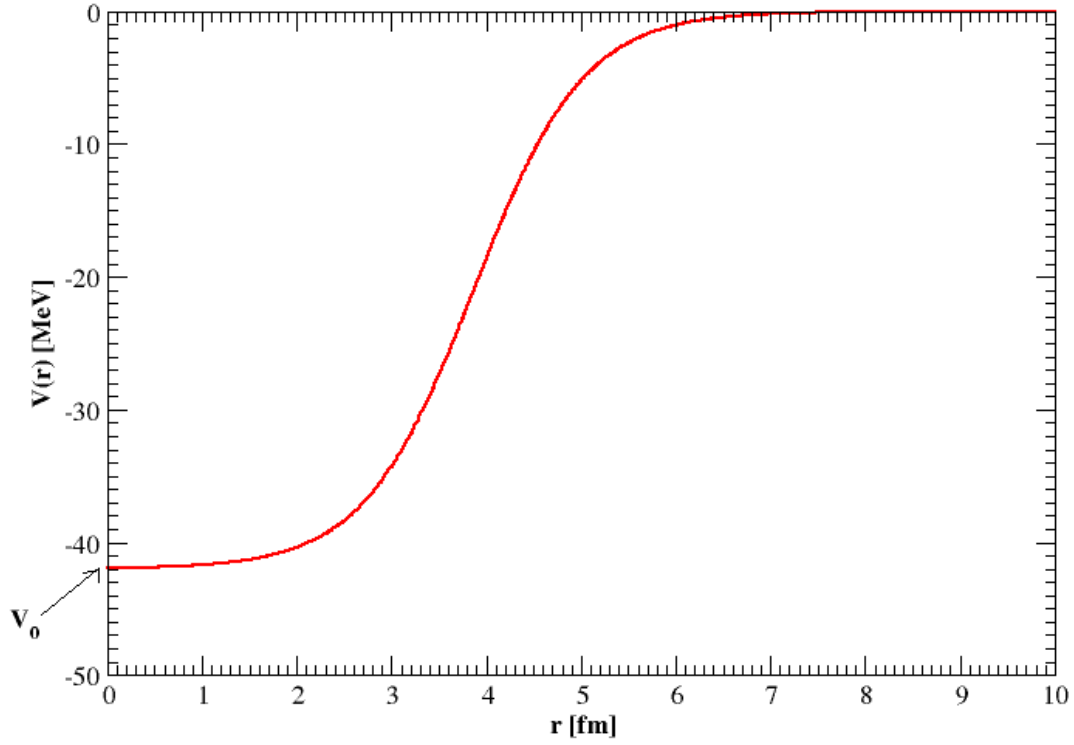


FIGURE I.3.2 – Potentiel réel V en fonction de la distance r .

Le rayon du puits de potentiel V n'est pas infini. Au delà d'une certaine valeur, ici $r \approx 7$ fm, le potentiel s'annule. Le rayon de voie schématisé sur la Figure I.3.3 découle du rayon nucléaire réduit et de la diffusibilité. Le manuel ENDF [28] propose dans le cas du neutron incident

$$a_c = \left(1.23A^{\frac{1}{3}} + 0.8\right) \text{ fm} \quad (\text{I.3.11})$$

Dans la relation (I.3.11), le rayon réduit s'élève à $r_0 = 1.23$ fm et la diffusibilité $\delta = 0.8$ fm. Avec ces paramètres, on peut comparer le rayon nucléaire (R) au rayon de voie a_c et pour une cible légère de nombre de masse 16 bombardée par des neutrons, $R = 3.0994$ fm et $a_c = 3.8994$ fm. La comparaison est illustrée par la Figure I.3.3. La convention ENDF n'est pas adaptée aux particules chargées incidentes. La référence [29] suggère pour les particules alpha

$$a_c = \left(1.4A^{\frac{1}{3}} + 1.2\right) \text{ fm} \quad (\text{I.3.12})$$

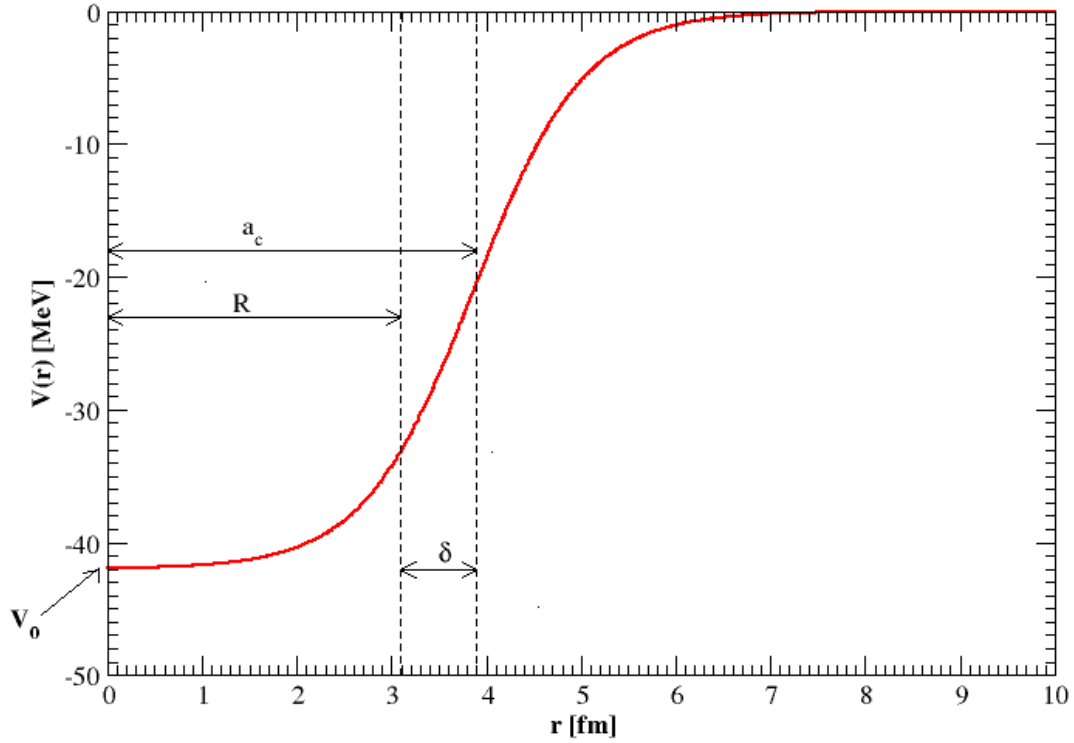


FIGURE I.3.3 – Comparaison entre le rayon nucléaire R et le rayon de voie a_c tel que suggéré par la convention ENDF pour une interaction entre un noyau de nombre de masse $A=16$ et un neutron.

Aujourd'hui, les calculs de modèle optique sont réalisés sur la base de potentiels dont la forme s'appuie sur celle du potentiel de *Woods-Saxon*. Par exemple, le potentiel phénoménologique du modèle optique sphérique se présente ainsi

$$\begin{aligned}
 V(r, E) = & -V_V(E)f(r, R_V, a_V) - iW_V(E)f(r, R_V, a_V) + i4a_D W_D(E) \frac{d}{dr} f(r, R_D, a_D) \\
 & + \left(\frac{\hbar}{m_\pi c} \right)^2 \left[V_{SO}(E) \frac{1}{r} \frac{d}{dr} f(r, R_{SO}, a_{SO}) \cdot \vec{\ell} \cdot \vec{\sigma} + iW_{SO}(E) \frac{1}{r} \frac{d}{dr} f(r, R_{SO}, a_{SO}) \cdot \vec{\ell} \cdot \vec{\sigma} \right] \\
 & + V_C(r)
 \end{aligned} \tag{I.3.13}$$

$V_V(E)$, $W_V(E)$, $W_D(E)$, $V_{SO}(E)$, $W_{SO}(E)$ sont respectivement les parties énergie-dépendantes de la composante réelle volumique, la composante imaginaire volumique, la composante imaginaire surfacique, la composante réelle du couplage spin-orbite ainsi que sa composante imaginaire. $V_C(r)$ correspond à la composante radiale coulombienne du potentiel $V(r, E)$. $R_{i \in \{V, D, SO\}}$, $a_{i \in \{V, D, SO\}}$ et f sont respectivement les rayons nucléaires, les diffusibilités et le facteur de forme de Woods-Saxon de l'équation (I.3.8). Le potentiel (I.3.13) est utilisé par le code de référence TALYS [18] avec les paramétrisations de Koning et Delaroche [17] pour les neutrons et les protons.

Les paramétrisations pour les systèmes plus complexes (deuton, triton, etc.) dérivent de ces derniers.

Le potentiel interne n'étant pas déterminé dans la théorie de la matrice R, la fonction d'onde dans la région interne est évaluée à la surface de séparation en s'appuyant sur le fait que la fonction d'onde et sa dérivée sont continues à cette surface. Notre étude se limite essentiellement au formalisme de la matrice R, pour la région des résonances résolues en énergie. Nous n'irons donc pas plus loin dans la description du potentiel de l'interaction nucléaire dans la région interne et le lecteur est invité à consulter le manuel d'utilisation du code TALYS [18] ou la référence [17] pour avoir de plus amples détails.

I.3.2 Espace externe ou espace des voies

La notion de voies est appliquée au sous-espace correspondant à la région externe. Cela transparaît sans ambiguïté dans la référence [30]. La voie est de prime abord associée au couple formé par le projectile et la cible. Notons ce couple α . Chaque particule du couple α possède un spin et une parité intrinsèque. Notons $\vec{i}$ le spin associé au projectile, π_i la parité associée au projectile, $\vec{I}$ le spin de la cible et π_I la parité associée à la cible. Le spin de voie noté $\vec{s}$ résulte de la composition des deux spins des particules du couple. On a

$$\vec{s} = \vec{i} + \vec{I} \quad (\text{I.3.14})$$

Le spin total $\vec{J}$ de la voie c et sa parité π sont obtenus à partir de la composition du nombre quantique orbital $\vec{\ell}$ et du spin de voie $\vec{s}$. Cela se traduit par

$$\vec{J} = \vec{\ell} + \vec{s} \quad (\text{I.3.15})$$

$$\pi = (-1)^\ell \pi_i \pi_I \quad (\text{I.3.16})$$

On parle alors de voies formées par couplage $\vec{\ell} - \vec{s}$. Une voie incidente est étiquetée par une lettre c telle que

$$c = \{\alpha, J, \pi, \ell, s\} \quad (\text{I.3.17})$$

Et une voie de sortie par une lettre c' telle que

$$c' = \{\alpha', J', \pi', \ell', s'\} \quad (\text{I.3.18})$$

Une réaction est possible s'il existe une voie c et une voie c' telle que

$$J, \pi \equiv J', \pi' \quad (\text{I.3.19})$$

Dans la région externe, le potentiel de l'interaction nucléaire $V(r)$ est au mieux le potentiel coulombien

$$V(r) = V_{\text{coul.}}(r) \quad (\text{I.3.20})$$

Pour les particules neutres, ce potentiel se réduit à

$$V(r) = 0 \quad (\text{I.3.21})$$

La fonction d'onde est obtenue facilement en résolvant l'équation de Schrödinger indépendante du temps

$$H\Psi^{\text{ext}}(r) = E\Psi^{\text{ext}}(r) \quad (\text{I.3.22})$$

I.4 Interaction d'un projectile avec une cible

Le formalisme de la matrice R traite les interactions à deux corps dans lesquelles interviennent deux particules, d'un côté le projectile (particules légères en cinématique directe) et de l'autre la cible [les noyaux (légers ou lourds)]. Le but de ce paragraphe est de décrire la manière dont la section efficace d'une interaction nucléaire est obtenue, sous le formalisme de la matrice R . La fonction d'onde dans le milieu externe est obtenue par la résolution de l'équation de Schrödinger radiale. Pour obtenir l'information dans la région interne, nous nous appuyons sur les conditions aux limites et sur le fait que la fonction d'onde et sa dérivée logarithmique sont continues à la surface de séparation ou surface des voies. Nous nous référerons principalement aux documents de A. M. Lane et R. G. Thomas [1], E. Vogt [26], J. E. Lynn [31] et [32]. Dans un premier temps, nous présentons le cas simple de la diffusion d'une particule sans spin et de charge nulle avec une cible sans spin. Cette simplification donne l'avantage d'éliminer la complexité liée à la gestion d'un grand nombre de voies. De plus, avec cette simplification, seul le potentiel centrifuge intervient dans le milieu externe. Nous généraliserons ensuite le formalisme aux particules de spin quelconque et chargées.

I.4.1 Le cas simple de la diffusion d'un projectile neutre sans spin par une cible sans spin

I.4.1.1 Equation de Schrödinger pour un problème à deux corps

Cette partie vise à démontrer comment l'équation de Schrödinger radiale est établie en décrivant l'interaction de deux particules m_1 et m_2 ; et aussi à définir la relation entre l'énergie cinétique du laboratoire et celle du CM. L'équation radiale est obtenue en dépouillant l'équation de Schrödinger dans le système des coordonnées relatives de sa composante angulaire par la méthode de séparation des variables. Comme rappelé ci-dessus, la formulation de la théorie de la matrice R est effectuée par la résolution de l'équation de Schrödinger radiale dans le milieu externe de l'espace des configurations et par la projection de la solution de cette équation dans le milieu interne à la surface de séparation. La suite de ce paragraphe est le fruit d'une réécriture du texte de la référence [32].

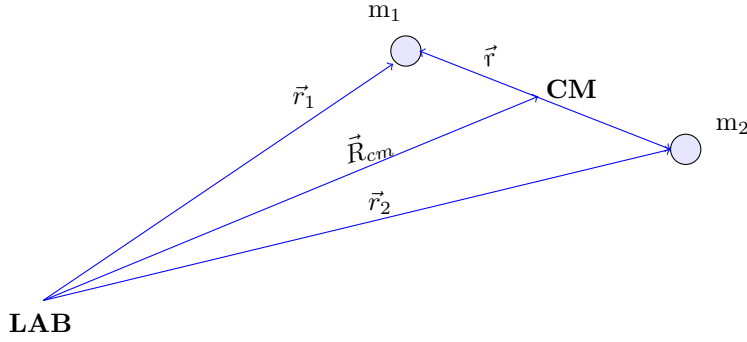


FIGURE I.4.1 – Le centre de masse et le système de coordonnées relatives des variables.

Le centre de masse et le système de coordonnées relatives des variables

Le vecteur position entre deux particules m_1 et m_2 dans le système des coordonnées relatives est

$$\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2 \quad (\text{I.4.1})$$

Le vecteur position du CM par rapport à l'origine du système du laboratoire est

$$\vec{R}_{cm} = \frac{m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2}{m_1 + m_2} \quad (\text{I.4.2})$$

En prenant $M = m_1 + m_2$

$$\vec{R}_{cm} = \frac{m_1}{M} \vec{r}_1 + \frac{m_2}{M} \vec{r}_2 \quad (\text{I.4.3})$$

Equation de Schrödinger pour un problème à deux corps dans un potentiel dépendant de la distance entre les deux particules L'équation de Schrödinger pour les deux particules interagissant dans le système du laboratoire avec un potentiel de forme $V(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$ est

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_1} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2} \nabla_2^2 + V(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) \right\} \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (\text{I.4.4})$$

La pratique usuelle quand on traite un problème à deux corps est de résoudre cette équation dans le CM et dans le système aux coordonnées relatives. L'enjeu est dans la connexion de ∇_1^2 et ∇_2^2 . On a besoin d'obtenir les dérivées premières et secondes reliant les variables dans le système du laboratoire à celles dans le CM et les variables relatives. A partir des définitions données ci-dessus, on peut avoir $\frac{\partial \vec{R}_{cm}}{\partial \vec{r}_1} = \frac{m_1}{M}$, $\frac{\partial \vec{R}_{cm}}{\partial \vec{r}_2} = \frac{m_2}{M}$, $\frac{\partial \vec{r}}{\partial \vec{r}_1} = 1$ et $\frac{\partial \vec{r}}{\partial \vec{r}_2} = -1$.

1.

$$\frac{\partial}{\partial \vec{r}_1} = \frac{\partial \vec{R}_{cm}}{\partial \vec{r}_1} \frac{\partial}{\partial \vec{R}_{cm}} + \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \implies \frac{\partial}{\partial \vec{r}_1} = \frac{m_1}{M} \frac{\partial}{\partial \vec{R}_{cm}} + \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \quad (\text{I.4.5})$$

$$\frac{\partial}{\partial \vec{r}_2} = \frac{\partial \vec{R}_{cm}}{\partial \vec{r}_2} \frac{\partial}{\partial \vec{R}_{cm}} - \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \implies \frac{\partial}{\partial \vec{r}_2} = \frac{m_2}{M} \frac{\partial}{\partial \vec{R}_{cm}} - \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \quad (\text{I.4.6})$$

2.

$$\frac{\partial^2}{\partial \vec{r}_1^2} = \left(\frac{m_1}{M}\right)^2 \frac{\partial^2}{\partial \vec{R}_{cm}^2} + \frac{\partial^2}{\partial \vec{r}^2} + \frac{m_1}{M} \left[\frac{\partial}{\partial \vec{R}_{cm}} \frac{\partial}{\partial \vec{r}} + \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \frac{\partial}{\partial \vec{R}_{cm}} \right] \quad (\text{I.4.7})$$

$$\frac{\partial^2}{\partial \vec{r}_2^2} = \left(\frac{m_2}{M}\right)^2 \frac{\partial^2}{\partial \vec{R}_{cm}^2} + \frac{\partial^2}{\partial \vec{r}^2} - \frac{m_2}{M} \left[\frac{\partial}{\partial \vec{R}_{cm}} \frac{\partial}{\partial \vec{r}} + \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \frac{\partial}{\partial \vec{R}_{cm}} \right] \quad (\text{I.4.8})$$

Tout ce dont nous avons besoin est une expression comme $\frac{1}{m_1} \frac{\partial^2}{\partial \vec{r}_1^2} + \frac{1}{m_2} \frac{\partial^2}{\partial \vec{r}_2^2}$ qui peut être déterminée en combinant les expressions précédentes. Le résultat est

$$\frac{1}{m_1} \frac{\partial^2}{\partial \vec{r}_1^2} + \frac{1}{m_2} \frac{\partial^2}{\partial \vec{r}_2^2} = \frac{1}{M} \frac{\partial^2}{\partial \vec{R}_{cm}^2} + \frac{1}{\mu} \frac{\partial^2}{\partial \vec{r}^2} \quad (\text{I.4.9})$$

Le premier terme à droite est associé au système du CM tandis que le second est relié au système de coordonnées relatives à deux corps. La masse réduite du système est définie de manière suivante

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad (\text{I.4.10})$$

Par conséquent, l'équation de Schrödinger dans les systèmes du CM et de coordonnées relatives deviennent

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{M} \nabla_R^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_r^2 + V(|\vec{r}|) \right\} \Psi(\vec{R}_{cm}, \vec{r}) = E \Psi(\vec{R}_{cm}, \vec{r}) \quad (\text{I.4.11})$$

Puisque les deux systèmes (CM et coordonnées relatives) sont indépendants, on peut chercher une solution pour la fonction d'onde telle que

$$\Psi(\vec{R}_{cm}, \vec{r}) = \Psi_a(\vec{R}_{cm}) \Psi_b(\vec{r}) \quad (\text{I.4.12})$$

où $\Psi_a(\vec{R}_{cm})$ et $\Psi_b(\vec{r})$ sont associées au système du CM et des coordonnées relatives respectivement.

En substituant dans l'équation de Schrödinger, nous avons

$$\begin{aligned} -\Psi_b(\vec{r}) \frac{\hbar^2}{M} \nabla_R^2 \Psi_a(\vec{R}_{cm}) &= \Psi_a(\vec{R}_{cm}) \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_r^2 \Psi_b(\vec{r}) + V(|\vec{r}|) \Psi_a(\vec{R}_{cm}) \Psi_b(\vec{r}) \\ &= E \Psi_a(\vec{R}_{cm}) \Psi_b(\vec{r}) \end{aligned} \quad (\text{I.4.13})$$

En multipliant cette équation par $\frac{1}{\Psi_a(\vec{R}_{cm})\Psi_b(\vec{r})}$, l'équation devient

$$-\frac{1}{\Psi_a(\vec{R}_{cm})}\frac{\hbar^2}{M}\nabla_R^2\Psi_a(\vec{R}_{cm})+\frac{1}{\Psi_b(\vec{r})}\left\{-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_r^2\Psi_b(\vec{r})+V(|\vec{r}|)\Psi_b(\vec{r})\right\}=E \quad (\text{I.4.14})$$

L'équation précédente permet de définir

$$-\frac{1}{\Psi_a(\vec{R}_{cm})}\frac{\hbar^2}{M}\nabla_R^2\Psi_a(\vec{R}_{cm})=E_{cm} \quad (\text{I.4.15})$$

et

$$\frac{1}{\Psi_b(\vec{r})}\left\{-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_r^2\Psi_b(\vec{r})+V(|\vec{r}|)\Psi_b(\vec{r})\right\}=E_{rel} \quad (\text{I.4.16})$$

Avec $E = E_{rel} + E_{cm}$. E_{cm} est l'énergie associée au mouvement du CM des deux particules tandis que E_{rel} est l'énergie totale disponible dans le CM. Comme indiqué auparavant, E est l'énergie totale dans le système du laboratoire. L'équation pour le CM décrit une particule se déplaçant librement avec une masse totale M . Elle n'est pas très utile pour une application pratique. Cependant, l'équation décrivant le mouvement relatif est d'un grand intérêt et constitue le point de départ des développements de la théorie de la matrice R . Pour des raisons de simplicité, faisons la substitution $E_{rel} \equiv E$ en gardant à l'esprit qu'elle n'est pas l'énergie totale dans le système du laboratoire. Laissons aussi de côté les indices r et b et écrivons $\mu = m$ de telle manière que l'équation devient

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(\vec{r})+V(|\vec{r}|)\Psi(\vec{r})\right\}=E\Psi(\vec{r}) \quad (\text{I.4.17})$$

A la façon dont cette équation est présentée, on oublie fréquemment ce qu'elle représente et conséquemment, cela conduit à des résultats et interprétations erronés.

La solution de cette équation repose sur la forme explicite du Laplacien ∇^2 . Puisque nous avons supposé que le potentiel est strictement dépendant de la distance, ce qui donne $V(r) = V(r, \theta, \vartheta)$ où nous avons $|\vec{r}| = r$, il est approprié d'écrire ∇^2 en coordonnées sphériques suivant

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Psi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\vartheta^2} \quad (\text{I.4.18})$$

En rappelant que θ est l'angle polaire dans le CM. L'équation de Schrödinger dans le CM peut être écrite ainsi

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\Psi}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Psi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2\Psi}{\partial\vartheta^2} + \frac{2m}{\hbar^2}[E - V(|\vec{r}|)]\Psi = 0 \quad (\text{I.4.19})$$

Pour des fins d'études de la théorie de la matrice R , nous sommes intéressés par la solution radiale de cette équation. La solution radiale est obtenue en utilisant la méthode de séparation de variables suivant

$$\Psi(r, \theta, \vartheta) = R(r)Y(\theta, \vartheta) \quad (\text{I.4.20})$$

Après quelques manipulations algébriques, on obtient les équations suivantes

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \left\{ \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(r)] - \frac{C}{r^2} \right\} R = 0 \quad (\text{I.4.21})$$

L'équation correspondant à la portion angulaire est

$$\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2\theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \vartheta^2} + CY = 0 \quad (\text{I.4.22})$$

Les deux équations sont connectées à travers la constante C . La procédure usuelle est de trouver la constante C en résolvant l'équation en Y . Les équations en Y sont celles qui correspondent aux problèmes aux valeurs propres à partir desquels la constante C a la solution $C = \ell(\ell + 1)$ avec $\ell = 0, 1, 2, 3, \dots$.

Remarque : Ce n'est pas le but ici de résoudre l'équation en Y pour déterminer C . Toutefois, on peut appliquer une procédure similaire à celle d'aujourd'hui basée sur la méthode de séparation des variables pour la résoudre. L'équation pour la partie radiale devient

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \left\{ \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(r)] - \frac{\ell(\ell + 1)}{r^2} \right\} R = 0 \quad (\text{I.4.23})$$

Quelques observations :

1. Les indices ℓ à la solution radiale signifient $R = R_\ell$.
2. Il est très important de voir qu'en mécanique classique, le potentiel centrifuge s'ajoute au potentiel central des particules quand on résout un problème similaire au nôtre. Le potentiel centrifuge classique est donné par

$$V_c(r) = \frac{L^2}{2mr^2} \quad (\text{I.4.24})$$

$L^2 = \hbar^2 \ell(\ell + 1)$ avec $\ell = 0, 1, 2, 3, \dots$. Ceci constitue un point important puisqu'il indique que uniquement certaines valeurs du moment angulaire sont permises.

Une touche finale avant d'entamer notre étude matrice R est de définir une fonction

$$\phi_\ell(r) = rR_\ell \quad (\text{I.4.25})$$

On peut monter aisément que

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R_\ell}{\partial r} \right) = \frac{1}{r} \frac{\partial^2 \phi_\ell}{\partial r^2} \quad (\text{I.4.26})$$

L'équation en $\phi_\ell(r)$ est

$$\left\{ \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E - V(r) - \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2} \right] \right\} \phi_\ell(r) = 0 \quad (\text{I.4.27})$$

Relation entre l'énergie cinétique du laboratoire et celle du CM Des précédents développements, il est facile de voir que l'énergie totale dans le système du laboratoire est

$$E_{\text{Lab}} = \frac{1}{2} (m_1 + m_2) \dot{R}_{\text{cm}}^2 + \frac{1}{2} \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \dot{r}^2 \quad (\text{I.4.28})$$

Si m_2 est au repos dans le système du laboratoire, on a $\dot{r}_2 = 0$. Alors

$$\dot{R}_{\text{cm}} = \frac{m_1 \dot{r}_1}{m_1 + m_2} \quad (\text{I.4.29})$$

et $\vec{r} = \vec{r}_1$.

Par conséquent

$$E_{\text{Lab}} = \frac{1}{2} (m_1 + m_2) \left(\frac{m_1 \dot{r}_1}{m_1 + m_2} \right)^2 + \frac{1}{2} \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \dot{r}^2 \quad (\text{I.4.30})$$

Cette relation conduit, comme espéré, à

$$E_{\text{Lab}} = \frac{1}{2} m_1 \dot{r}_1^2 \quad (\text{I.4.31})$$

C'est l'énergie cinétique totale dans le système du laboratoire. Il est intéressant de noter que puisque m_2 est au repos, l'énergie dans le système du CM est

$$E_{\text{cm}} = \frac{1}{2} \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \dot{r}_1^2 \quad (\text{I.4.32})$$

On peut déterminer que

$$E_{\text{cm}} = \frac{m_2}{m_1 + m_2} E_{\text{Lab}} \quad (\text{I.4.33})$$

Si m_1 est identifié comme un neutron de masse m et m_2 une cible de masse M (M n'est plus la variable correspondant à la somme des masses), on a

$$\boxed{E_{\text{cm}} = \frac{M}{m + M} E_{\text{Lab}}} \quad (\text{I.4.34})$$

ou

$$E_{\text{cm}} = \frac{A}{A + 1} E_{\text{Lab}} \text{ avec } A = \frac{M}{m} \quad (\text{I.4.35})$$

I.4.1.2 Section efficace de diffusion d'un projectile neutre sans spin par une cible sans spin

Dans la région externe de la théorie de la matrice R (Fig. I.3.1), la fonction $\phi_\ell^{\text{ext}}(r)$ est solution de l'équation de Schrödinger *radiale* indépendante du temps donnée par la relation I.4.27. Nous rappelons que dans cette région, le potentiel nucléaire $V(r)$ est nul pour les particules neutres. On peut donc écrire

$$\frac{d^2\phi_\ell^{\text{ext}}(r)}{dr^2} + \left[\frac{2\mu E}{\hbar^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] \phi_\ell^{\text{ext}}(r) = 0 \quad (\text{I.4.36})$$

ℓ est le nombre quantique orbital, E l'énergie du projectile dans le centre de masse, r la distance radiale par rapport au centre de la cible et μ la masse réduite donnée par l'expression

$$\mu = \frac{mM}{m+M} \quad (\text{I.4.37})$$

où M et m sont respectivement la masse de la cible et la masse du projectile.

Pour les ondes s ($\ell = 0$), l'équation (I.4.36) se réduit à

$$\frac{d^2\phi^{\text{ext}}(r)}{dr^2} + k^2\phi^{\text{ext}}(r) = 0 \quad (\text{I.4.38})$$

où $k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2\mu E}$ est le nombre d'onde. La solution de l'équation (I.4.38) se présente sous la forme

$$\phi^{\text{ext}}(\vec{r}) \approx e^{-i(kr)} - e^{i(kr+2\varphi)} = I(r) - UO(r) \quad (\text{I.4.39})$$

$I(r) \sim \exp(-ikr)$ correspond à l'onde incidente, $O(r) \sim \exp(ikr)$ à l'onde sortante. La fonction U représente la variation de l'amplitude de l'onde sortante. Sous forme matricielle, elle constitue la matrice de collisions. On obtient pour ce cas simple

$$U = \exp(2i\varphi) \quad (\text{I.4.40})$$

Le facteur φ est appelé *facteur de phase de diffusion sur sphère dure*.

Dans la région interne, la fonction $\phi(r)_\ell^{\text{int}}$ est solution de l'équation radiale

$$\frac{d^2\phi_\ell^{\text{int}}(r)}{dr^2} + \left[\frac{2\mu E}{\hbar^2} - \frac{2\mu}{\hbar^2}V^{\text{int}}(r) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] \phi_\ell^{\text{int}}(r) = 0 \quad (\text{I.4.41})$$

L'équation (I.4.41) n'est pas facile à résoudre étant donné que le potentiel interne V^{int} n'est pas connu. Nous recherchons la matrice de collisions en s'appuyant sur la continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée logarithmique à la surface de séparation traduite par les relations (I.3.1). La fonction $\phi^{\text{int}}(r)$ peut s'écrire comme une combinaison linéaire des fonctions propres $X_\lambda(r)$ des états λ qui contribuent à

$\phi^{\text{int}}(r)$ avec la condition aux limites B_c choisie telle que la dérivée logarithmique de la fonction propre $X_\lambda(r)$ en $r = a_c$ soit réelle et constante

$$\frac{dX_\lambda(r)}{X_\lambda(r)dr} \Big|_{r=a_c} = \frac{1}{a_c} B_c \quad (\text{I.4.42})$$

B_c est arbitraire. Revenons à l'expression de la fonction $\phi^{\text{int}}(r)$. On a

$$\phi^{\text{int}}(r) = \sum_{\lambda} A_{\lambda} X_{\lambda}(r) \quad (\text{I.4.43})$$

Schématiquement, ces fonctions X_{λ} sont aussi solutions de l'équation de Schrödinger

$$\frac{d^2 X_{\lambda}(r)}{dr^2} + \left[\frac{2\mu E_{\lambda}}{\hbar^2} - \frac{2\mu V^{\text{int}}(r)}{\hbar^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] X_{\lambda}(r) = 0 \quad (\text{I.4.44})$$

La condition de normalisation sur l'espace des voies c des fonctions $X_{\lambda}(r)$ s'écrit

$$\int_0^{a_c} X_{\lambda}(r) X_{\lambda'}(r) dr = \delta_{\lambda\lambda'} \quad (\text{I.4.45})$$

De manière plus expressive, la relation (I.4.43) peut être réécrite de la manière suivante

$$\phi^{\text{int}}(r) = A_1 X_1(r) + A_2 X_2(r) + \dots + A_{\lambda} X_{\lambda}(r) + A_{\lambda+1} X_{\lambda+1}(r) + \dots \quad (\text{I.4.46})$$

En multipliant la relation (I.4.46) par $X_{\lambda}(r)$, la relation devient

$$\phi^{\text{int}}(r) X_{\lambda}(r) = A_1 X_1(r) X_{\lambda}(r) + \dots + A_{\lambda} X_{\lambda}(r) X_{\lambda}(r) + A_{\lambda+1} X_{\lambda+1}(r) X_{\lambda}(r) + \dots \quad (\text{I.4.47})$$

En vertu de la condition de normalisation (I.4.45), une intégration entre 0 et a_c de la relation (I.4.47) permet d'obtenir les coefficients A_{λ} nécessaires pour exprimer la fonction d'onde $\phi^{\text{int}}(r)$ sous forme d'une somme des fonctions propres $X_{\lambda}(r)$

$$A_{\lambda} = \int_0^{a_c} \phi^{\text{int}}(r) X_{\lambda}(r) dr \quad (\text{I.4.48})$$

Une opération de soustraction entre la relation (I.4.41) multipliée par $X_{\lambda}(r)$ et la relation (I.4.44) multipliée par $\phi^{\text{int}}(r)$ donne

$$\frac{d^2 \phi^{\text{int}}(r)}{dr^2} X_{\lambda}(r) + \frac{2\mu}{\hbar} (E - E_{\lambda}) \phi^{\text{int}}(r) X_{\lambda}(r) - \frac{d^2 X_{\lambda}(r)}{dr^2} \phi^{\text{int}}(r) = 0 \quad (\text{I.4.49})$$

L'intégration entre 0 et a_c de l'expression (I.4.49) donne

$$\int_0^{a_c} \frac{d^2 \phi^{\text{int}}(r)}{dr^2} X_{\lambda}(r) dr + \int_0^{a_c} \frac{2\mu}{\hbar} (E - E_{\lambda}) \phi^{\text{int}}(r) X_{\lambda}(r) dr - \int_0^{a_c} \frac{d^2 X_{\lambda}(r)}{dr^2} \phi^{\text{int}}(r) dr = 0 \quad (\text{I.4.50})$$

Le deuxième terme de l'expression (I.4.50) contient la relation (I.4.48). En appliquant la méthode d'intégration par partie aux deux autres, on a

$$A_\lambda = \frac{\hbar^2}{2\mu(E - E_\lambda)} \left[X_\lambda(r) \frac{d\phi^{\text{int}}(r)}{dr} - \phi^{\text{int}}(r) \frac{dX_\lambda(r)}{dr} \right]_0^{a_c} \quad (\text{I.4.51})$$

En remplaçant dans l'équation (I.4.51) le terme $\frac{dX_\lambda(r)}{dr}$ par son équivalent provenant de (I.4.42) et en introduisant l'expression obtenue dans (I.4.43), la fonction $\phi^{\text{int}}(r)$ s'évalue en $r = a_c$ par

$$\phi^{\text{int}}(a_c) = \frac{\hbar^2}{2\mu(E - E_\lambda)} \sum_\lambda \left[X_\lambda(r) \frac{d\phi^{\text{int}}(r)}{dr} - \phi^{\text{int}}(r) \frac{B_c}{a_c} X_\lambda(r) \right]_{r=a_c} X_\lambda(a_c) \quad (\text{I.4.52})$$

Après un réarrangement, on obtient

$$\phi^{\text{int}}(a_c) = \frac{\hbar^2}{2\mu a_c} \sum_\lambda \left[\frac{X_\lambda(a_c) X_\lambda(a_c)}{E - E_\lambda} \right] \left[a_c \frac{d\phi^{\text{int}}(a_c)}{dr} - \phi^{\text{int}}(a_c) B_c \right] \quad (\text{I.4.53})$$

Ainsi, on définit une fonction R telle que

$$R = \frac{\hbar^2}{2\mu a_c} \sum_\lambda \left[\frac{\gamma_\lambda^2}{E - E_\lambda} \right] \quad (\text{I.4.54})$$

où

$$\gamma_\lambda = \frac{\hbar}{\sqrt{2\mu a_c}} X_\lambda(a_c) \quad (\text{I.4.55})$$

Le paramètre γ_λ est appelé *amplitude réduite*. En tenant compte du fait que $\phi^{\text{ext}}|_{r=a_c} = \phi^{\text{int}}_{r=a_c}$ et en considérant les relations (I.4.39) et (I.4.53) (dans laquelle on introduit (I.4.54)), on obtient

$$I - UO = \left[a_c \frac{d}{dr} (I - UO) - (I - UO) B_c \right] R \quad (\text{I.4.56})$$

ou

$$I - UO = a_c R \frac{dI}{dr} - a_c U R \frac{dO}{dr} - I B_c R + U O B_c R \quad (\text{I.4.57})$$

Un simple réarrangement de l'équation (I.4.57) permet de dégager l'expression de la matrice de collision U

$$U = \frac{a_c R \frac{dI}{dr} - I - I B_c R}{a_c R \frac{dO}{dr} - O B_c R - O} \quad (\text{I.4.58})$$

ou

$$U = \left(\frac{I}{O} \right) \frac{1 - \left[\frac{a_c}{I} \frac{dI}{dr} - B_c \right] R}{1 - \left[\frac{a_c}{O} \frac{dO}{dr} - B_c \right] R} \quad (\text{I.4.59})$$

Cette relation (I.4.59) peut être réécrite ainsi

$$U = \left(\frac{I}{O} \right) \left[1 - \left(\frac{a_c}{O} \frac{dO}{dr} - B_c \right) R \right]^{-1} \left[1 - \left(\frac{a_c}{I} \frac{dI}{dr} - B_c \right) R \right] \quad (\text{I.4.60})$$

En tenant compte du fait que les ondes incidentes I et sortantes O sont complexes conjuguées [$I = |I|e^{-i\varphi}$ et $O = I^* = |I|e^{i\varphi}$, où $\varphi = \rho = kr$ pour une onde s ($\ell = 0$)], on pose

$$L = \frac{a_c}{O} \frac{dO}{dr} - B_c \quad (\text{I.4.61})$$

et

$$L^* = \frac{a_c}{I} \frac{dI}{dr} - B_c \quad (\text{I.4.62})$$

Les ondes incidentes et sortantes peuvent être écrites sous la forme des fonctions régulières et irrégulières de Coulomb [31] restreintes ici au cas où les particules sont neutres

$$I(r) = G(r) - iF(r) \quad (\text{I.4.63})$$

$$O(r) = G(r) + iF(r) \quad (\text{I.4.64})$$

En tenant compte de (I.4.64), la relation (I.4.61) devient

$$L = \left\{ \frac{a_c}{G(r) + iF(r)} \frac{d[G(r) + iF(r)]}{dr} \right\}_{r=a_c} - B_c \quad (\text{I.4.65})$$

Posons

$$\mathcal{L} = \left\{ \frac{a_c}{G(r) + iF(r)} \frac{d[G(r) + iF(r)]}{dr} \right\}_{r=a_c} \quad (\text{I.4.66})$$

On définit le facteur de *pénétrabilité de la barrière potentielle* P et le facteur de décalage énergétique (ou shift) S , respectivement partie imaginaire et réelle de $\mathcal{L}$

$$\mathcal{L} = S + iP \quad (\text{I.4.67})$$

De l'expression (I.4.67), la relation (I.4.61) devient

$$L = S + iP - B_c \quad (\text{I.4.68})$$

Les expressions des facteurs de pénétrabilité et des facteurs de shift peuvent être définies pour chaque moment angulaire orbital ℓ . Pour cela, réécrivons l'expression (I.4.64) sous la forme [33]

$$G_\ell(\rho) + iF_\ell(\rho) = (-1)^\ell \rho^{\ell+1} \left(\frac{d}{\rho d\rho} \right)^\ell \frac{e^{i\rho}}{\rho} \quad (\text{I.4.69})$$

où $\rho = kr$. De la relation (I.4.69), l'expression (I.4.64) pour chacun des quatre premiers nombres quantiques orbitaux ℓ est donnée par

$$G_0(\rho) + iF_0(\rho) = e^{i\rho} \quad (\text{I.4.70})$$

$$G_1(\rho) + iF_1(\rho) = \left(\frac{1}{\rho} - i \right) e^{i\rho} \quad (I.4.71)$$

$$G_2(\rho) + iF_2(\rho) = \left(\frac{3}{\rho^2} - \frac{3i}{\rho} - 1 \right) e^{i\rho} \quad (I.4.72)$$

$$G_3(\rho) + iF_3(\rho) = \left(\frac{15}{\rho^3} - \frac{15i}{\rho^2} - \frac{6}{\rho} + i \right) e^{i\rho} \quad (I.4.73)$$

En dérivant par rapport à ρ les expressions (I.4.70) à (I.4.73) et en tenant compte des relations (I.4.66) et (I.4.67), on extrait les expressions de P et S

$$P_0 = \rho \quad (I.4.74)$$

$$P_1 = \frac{\rho^3}{1 + \rho^2} \quad (I.4.75)$$

$$P_2 = \frac{\rho^5}{9 + 3\rho^2 + \rho^4} \quad (I.4.76)$$

$$P_3 = \frac{\rho^7}{225 + 45\rho^2 + 6\rho^4 + \rho^6} \quad (I.4.77)$$

Et

$$S_0 = 0 \quad (I.4.78)$$

$$S_1 = -\frac{1}{1 + \rho^2} \quad (I.4.79)$$

$$S_2 = -\frac{18 + 3\rho^3}{9 + 3\rho^2 + \rho^4} \quad (I.4.80)$$

$$S_3 = -\frac{675 + 90\rho^2 + 6\rho^4}{225 + 45\rho^2 + 6\rho^4 + \rho^6} \quad (I.4.81)$$

L'expression générale de la matrice des collisions s'écrit

$$U = e^{-i\varphi} [1 - LR]^{-1} [1 - L^*R] e^{-i\varphi} \quad (I.4.82)$$

Le facteur de phase de diffusion sur sphère dure est également déduit des fonctions régulières et irrégulières de Coulomb par la relation

$$\varphi(r) = \arctan \left(\frac{F(r)}{G(r)} \right) \quad (I.4.83)$$

Comme pour le facteur de pénétrabilité P et le facteur shift S, des relations explicites peuvent être extraites

$$\varphi_0 = \rho \quad (I.4.84)$$

$$\varphi_1 = \rho - \arctan(\rho) \quad (I.4.85)$$

$$\varphi_2 = \rho - \arctan\left(\frac{3\rho}{3 - \rho^2}\right) \quad (\text{I.4.86})$$

$$\varphi_3 = \rho - \arctan\left(\frac{\rho(15 - \rho)^2}{15 - 6\rho^2}\right) \quad (\text{I.4.87})$$

A présent, établissons l'expression de la section efficace à partir de la matrice des collisions U. L'expression de la fonction d'onde du système avant et après la collision peut être trouvée dans la référence [34]. Avant la collision, la fonction Ψ peut être approximée par

$$\Psi \approx e^{ikz} \quad (\text{I.4.88})$$

Et après la collision, la fonction Ψ devient

$$\Psi \approx f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (\text{I.4.89})$$

De façon que la fonction totale décrivant le système soit écrite

$$\Psi \approx e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (\text{I.4.90})$$

où l'amplitude de l'onde diffusée est [35]

$$f(\theta) = \frac{i\sqrt{\pi}}{k} \sum_{\ell=0}^{\infty} \sqrt{(2\ell+1)} [1 - e^{2i\varphi}] Y_{\ell,0}(\cos\theta) \quad (\text{I.4.91})$$

Les fonctions $Y_{\ell,0}$ correspondent aux harmoniques sphériques qui sont écrites de manière générale Y_{ℓ}^m [36]. Elles peuvent être exprimées en termes de polynômes de Legendre généralisés P_{ℓ}^m par

$$Y_{\ell}^m(z, \phi) = C_{\ell}^m P_{\ell}^m(z) e^{im\phi} \quad (\text{I.4.92})$$

Avec

$$C_{\ell}^m = \sqrt{\frac{(2\ell+1)(\ell-m)!}{4\pi(\ell+m)!}} \quad (\text{I.4.93})$$

Et

$$P_{\ell}^m(z) = \frac{(1-z^2)^{m/2}}{2^{\ell}\ell!} \left[\frac{d^{\ell+m}}{dz^{\ell+m}} (z^2 - 1)^{\ell} \right] \quad (\text{I.4.94})$$

Les fonctions $Y_{\ell,0}$ sont définies par l'ensemble des harmoniques sphériques $Y_{\ell}^0(\theta, \phi) = Y_{\ell}(\theta, \phi)$ avec $m = 0$. Les constantes C_{ℓ}^m deviennent dans ce cas $C_{\ell}^0 = C_{\ell} = \sqrt{\frac{(2\ell+1)}{4\pi}}$. Au regard de la relation (I.4.92), les harmoniques sphériques $Y_{\ell,0}$ peuvent être écrites

$$Y_{\ell,0}(\theta, \phi) = \frac{\sqrt{(2\ell+1)}}{2\sqrt{\pi}} P_{\ell}(\cos\theta) \quad (\text{I.4.95})$$

Le calcul numérique de ces polynômes est effectué à l'aide de formules de récurrence que l'on peut trouver facilement dans la littérature, par exemple dans la référence [36]. En insérant la relation (I.4.95) dans (I.4.91), on trouve

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) [e^{2i\varphi} - 1] P_{\ell}(\cos\theta) \quad (\text{I.4.96})$$

La section efficace de diffusion de la particule incidente de nombre quantique orbital ℓ par un noyau dans la direction déterminée par l'angle solide $\Omega = (\theta, \phi)$ est donnée par le carré de l'amplitude de l'onde après la diffusion. On a alors

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 = \left| \frac{1}{2ik} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) [e^{2i\varphi} - 1] P_{\ell}(\cos\theta) \right|^2 \quad (\text{I.4.97})$$

La section efficace non différentielle en angle est obtenue en intégrant sur θ et ϕ de la manière suivante

$$\begin{aligned} \sigma &= \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 |f(\theta)|^2 d\phi d(\cos\theta) \\ &= \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 \left| \frac{1}{2ik} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) [e^{2i\varphi} - 1] P_{\ell}(\cos\theta) \right|^2 d\phi d(\cos\theta) \end{aligned} \quad (\text{I.4.98})$$

La solution de l'intégrale numérique $\int_0^{2\pi} d\phi$ est 2π . La relation d'orthogonalité des polynômes de Legendre est établie suivant [36]

$$\int_{-1}^1 P_{\ell}(z) P_{\ell'}(z) dz = \frac{2}{2\ell+1} \delta_{\ell\ell'} \quad (\text{I.4.99})$$

On peut donc simplifier le problème en calculant la section efficace σ_{ℓ} correspondant à un seul moment angulaire orbital ℓ . La relation (I.4.98) devient

$$\begin{aligned} \sigma \equiv \sigma_{\ell} &= \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 \left| \frac{1}{2ik} (2\ell+1) [e^{2i\varphi} - 1] P_{\ell}(\cos\theta) \right|^2 d\phi d(\cos\theta) \\ &= \frac{1}{2ik} (2\ell+1) [e^{2i\varphi} - 1] \frac{1}{-2ik} (2\ell+1) [e^{-2i\varphi} - 1] \\ &\quad \times \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^1 P_{\ell}^2(\cos\theta) d(\cos\theta) \end{aligned} \quad (\text{I.4.100})$$

La formule (I.4.99) fournit la solution de la seconde intégrale de l'expression I.4.100 tel que

$$\int_{-1}^1 P_{\ell}^2(\cos\theta) d(\cos\theta) = \frac{2}{2\ell+1} \quad (\text{I.4.101})$$

Ainsi, la section efficace σ_{ℓ} est donnée par

$$\begin{aligned}
\sigma_\ell &= \frac{4\pi}{(2\ell+1)2ik} (2\ell+1) [e^{2i\varphi} - 1] \frac{1}{-2ik} (2\ell+1) [e^{-2i\varphi} - 1] \\
&= \frac{\pi(2\ell+1)}{k^2} [e^{2i\varphi} - 1] [e^{-2i\varphi} - 1] \\
&= \frac{\pi(2\ell+1)}{k^2} |e^{2i\varphi} - 1|^2
\end{aligned} \tag{I.4.102}$$

En tenant compte de (I.4.40), on établit la relation entre la section efficace et la matrice de collisions U . Ainsi

$$\sigma_\ell = \frac{\pi(2\ell+1)}{k^2} |U_\ell - 1|^2 \tag{I.4.103}$$

La section efficace de diffusion élastique du neutron est obtenue en faisant la somme sur tous les moments angulaires orbitaux ℓ . Ainsi, on a

$$\sigma = \frac{\pi}{k^2} \sum_\ell (2\ell+1) |U_\ell - 1|^2 \tag{I.4.104}$$

I.4.2 Cas général

Reprenons le raisonnement du paragraphe I.4.1 en le généralisant à tout type d'interaction énergétiquement possible pour un couple α de particules. Dans la région externe, la fonction d'onde Ψ décrit non seulement le mouvement relatif entre les particules en interaction mais aussi leur mouvement interne et spins intrinsèques. La fonction d'onde générale contient

1. un terme Φ_α représentant le mouvement interne du couple α en interaction ;
2. un terme $i^\ell Y_\ell^{m_\ell}$ d'harmoniques sphériques construit sur le moment angulaire orbital du mouvement relatif entre le projectile et la cible ℓ et sa projection m_ℓ sur l'axe z ;
3. un terme $\chi_{s m_s}$ de couplage de spins intrinsèques $\vec{i}$ et $\vec{I}$ des deux particules conduisant au spin de la voie $\vec{s} = \vec{I} + \vec{i}$ et sa projection m_s sur l'axe z ;
4. le coefficient de Clebsh-Gordan [36] construit autour du couple formé par $\vec{\ell}$ et $\vec{s}$, leurs projections m_ℓ et m_s , le résultat de leur couplage $\vec{J} = \vec{\ell} + \vec{s}$ et sa projection m_J ;
5. la partie radiale $\phi_c(r)$, solution de l'équation de Schrödinger de type (I.4.36) pour laquelle on considère un potentiel à composantes centrifuge et coulombienne

$$\frac{d^2\phi_c(r)}{dr^2} + \left[\frac{2\mu E}{\hbar^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - \frac{2\mu E}{\hbar^2} \underbrace{\left(\frac{Z_{\alpha_1} Z_{\alpha_2} e^2}{r} \right)}_{V_c(r)} \right] \phi_c(r) = 0 \tag{I.4.105}$$

où le potentiel coulombien est

$$V_c(r) = \frac{Z_{\alpha_1} Z_{\alpha_2} e^2}{r} \quad (\text{I.4.106})$$

Z_{α_1} et Z_{α_2} sont respectivement les charges des particules 1 et 2 du couple en interaction; e est la valeur d'une charge élémentaire en Coulombs ($e = 1,602176462 \times 10^{-19} \text{C}$ [28]).

L'équation de Schrödinger du système est

$$H\Psi = E\Psi \quad (\text{I.4.107})$$

La solution générale de cette équation dans la région externe est [26]

$$\Psi = \sum_c \underbrace{\left(\frac{1}{r_c} \Phi_\alpha \sum_{m_\ell} \sum_{m_s} (\ell s m_\ell m_s | J m_J) i^\ell Y_\ell^{m_\ell} \chi_{s m_s} \right)}_{\psi_c} \phi_c(r) = \sum_c \psi_c \phi_c(r) \quad (\text{I.4.108})$$

Les fonctions ψ_c sont appelées fonctions de surface pour la voie c . Elles constituent une série complète de vecteurs unitaires qui décrivent la voie suivant les différents composants qui la définissent, $c = (\alpha, \ell, s, J, m_J)$. Ces fonctions remplissent la condition d'orthonormalisation suivante

$$\int \psi_{\alpha \ell s J m_J}^* \psi_{\alpha' \ell' s' J' m_{J'}} dS = \delta_{\alpha \ell s J m_J; \alpha' \ell' s' J' m_{J'}} \quad (\text{I.4.109})$$

S est la surface des voies. Après interaction, l'amplitude des ondes sortantes est perturbée. Dans la voie de sortie c' , la fonction d'onde s'écrit

$$\Psi_{c'} = -U_{c'c} \mathcal{O}_{c'} \quad (\text{I.4.110})$$

La matrice $U_{c'c}$ est la matrice de collision. Elle représente l'amplitude de la fonction sortante dans la voie c' . La matrice U répond à deux grands principes de la physique

1. La conservation du flux : la matrice U est unitaire, ce qui se traduit par $UU^* = 1$;
2. L'invariance par rapport à l'inversion du temps : la matrice U est symétrique, ce qui se traduit par $U_{cc'} \equiv U_{c'c}$.

En terme de matrice U et des fonctions entrantes et sortantes, la fonction générale du système dans la région externe s'écrit

$$\Psi = \sum_{cc'} (\delta_{cc'} \mathcal{I}_c - U_{c'c} \mathcal{O}_{c'}) y_c \quad (\text{I.4.111})$$

Pour une voie c unique incidente , cette équation est réduite à

$$\Psi_{\text{incident}} = \mathcal{I}_c - \sum_{c'} U_{c'c} \mathcal{O}_{c'} \quad (\text{I.4.112})$$

Dans la relation (I.4.112), y_c de la relation (I.4.111) est égale à 1 pour la voie c considérée et 0 pour toutes les autres.

Recherchons maintenant l'expression de la matrice R dans la région interne. Comme dans la relation (I.4.43), exprimons la fonction Ψ comme une combinaison linéaire des fonctions propres des états λ . Nous écrivons

$$\Psi = \sum_{\lambda'} A_{\lambda'} X_{\lambda'} \quad (\text{I.4.113})$$

Les fonctions X_{λ} sont orthogonales et normalisées. La condition de normalisation s'écrit

$$\int_{\Omega} X_{\lambda'}^* X_{\lambda} d\Omega = \delta_{\lambda\lambda'} \quad (\text{I.4.114})$$

En multipliant la relation (I.4.113) par X_{λ}^* , en intégrant le résultat sur le volume de la sphère Ω et en tenant compte de la relation (I.4.114), tous les termes du membre de droite impliquant $X_{\lambda' \neq \lambda}$ deviennent nuls. Le seul terme non nul est le terme en $X_{\lambda' = \lambda}$ de telle sorte que l'on obtient

$$\int_{\Omega} X_{\lambda}^* \Psi d\Omega = A_{\lambda} \int_{\Omega} X_{\lambda}^* X_{\lambda} d\Omega \quad (\text{I.4.115})$$

La relation (I.4.114) fait que l'intégrale du membre de droite de (I.4.115) est égale à 1. Finalement, le coefficient A_{λ} s'exprime ainsi

$$A_{\lambda} = \int_{\Omega} X_{\lambda}^* \Psi d\Omega \quad (\text{I.4.116})$$

Appliquons la même procédure qu'au paragraphe I.4.1 pour retrouver l'expression de la fonction Ψ dans la région interne. L'équation de Schrödinger explicite est

$$\left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2\mu} + V^{\text{int}}(r) \right] \Psi = E \Psi \quad (\text{I.4.117})$$

Les fonctions propres X_{λ} des états λ sont aussi solutions de l'équation de Schrödinger et on a

$$\left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2\mu} + V^{\text{int}}(r) \right] X_{\lambda} = E_{\lambda} X_{\lambda} \quad (\text{I.4.118})$$

Le potentiel $V^{\text{int}}(r)$ interne n'étant pas connu, nous allons encore exploiter la propriété de continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée à la surface de séparation. En multipliant la relation I.4.117 par X_{λ}^* et le complexe conjugué de la relation I.4.118 par Ψ , en effectuant la soustraction entre les équations obtenues,

en faisant une intégration sur le volume Ω de la sphère et en tenant compte de l'hypothèse que $V^{\text{int}}(r)$ est Hermitien, on a

$$\frac{\hbar^2}{2\mu} \int_{\Omega} [X_{\lambda}^* (\nabla^2 \Psi) - \Psi (\nabla^2 X_{\lambda})^*] d\Omega = (E_{\lambda} - E) \int_{\Omega} X_{\lambda}^* \Psi d\Omega \quad (\text{I.4.119})$$

L'intégrale du membre de droite donne le coefficient A_{λ} de la relation I.4.116. La relation I.4.119 devient

$$A_{\lambda} = \frac{\hbar^2}{(E_{\lambda} - E) 2\mu} \int_{\Omega} [X_{\lambda}^* (\nabla^2 \Psi) - \Psi (\nabla^2 X_{\lambda})^*] d\Omega \quad (\text{I.4.120})$$

En s'appuyant sur le théorème de Green qui permet de transformer une intégrale sur le volume en une intégrale sur une surface, l'intégration sur le volume Ω de la sphère se réduit à une intégration sur la surface $\mathcal{S}$ de la sphère ou surface des voies. La relation (I.4.120) devient

$$A_{\lambda} = \frac{\hbar^2}{(E_{\lambda} - E) 2\mu} \int_{\mathcal{S}} [X_{\lambda}^* (\vec{\nabla}_n \Psi) - \Psi (\vec{\nabla}_n X_{\lambda})^*] d\vec{\mathcal{S}} \quad (\text{I.4.121})$$

L'opérateur $\vec{\nabla}_n$ est l'opérateur *gradient* normal à la surface de la voie S_c . La surface externe est elle-même la somme de toutes les surfaces individuelles des voies c

$$\mathcal{S} = \sum_c \mathcal{S}_c \quad (\text{I.4.122})$$

Introduisons la quantité V_c qui résulte de la projection de la fonction Ψ à la surface des voies S et sa dérivée D_c

$$V_c = \left(\frac{\hbar^2}{2\mu a_c} \right)^{1/2} \int \psi_c^* \Psi d\mathcal{S} \quad (\text{I.4.123})$$

$$\begin{aligned} D_c &= \left(\frac{\hbar^2}{2\mu a_c} \right)^{1/2} \int \psi_c^* \vec{\nabla}_n (r_c \Psi) d\vec{\mathcal{S}} \\ &= V_c + \left(\frac{\hbar^2}{2\mu a_c} \right)^{1/2} \int \psi_c^* \vec{\nabla}_n (\Psi) d\vec{\mathcal{S}} \end{aligned} \quad (\text{I.4.124})$$

De la même manière, introduisons la quantité $\gamma_{\lambda c}$ résultant de la projection la fonction X_{λ} sur la surface des voies S et sa dérivée $\delta_{\lambda c}$

$$\gamma_{\lambda c} = \left(\frac{\hbar^2}{2\mu a_c} \right)^{1/2} \int \psi_c^* X_{\lambda J m_J} d\mathcal{S} \quad (\text{I.4.125})$$

$$\begin{aligned} \delta_{\lambda c} &= \left(\frac{\hbar^2}{2\mu a_c} \right)^{1/2} \int \psi_c^* \vec{\nabla}_n (r_c X_{\lambda J m_J}) d\vec{\mathcal{S}} \\ &= \gamma_{\lambda c} + \left(\frac{\hbar^2}{2\mu a_c} \right)^{1/2} \int \psi_c^* \vec{\nabla}_n (X_{\lambda J m_J}) d\vec{\mathcal{S}} \end{aligned} \quad (\text{I.4.126})$$

Des relations (I.4.123), (I.4.124), (I.4.125) et (I.4.126), on déduit les fonctions Ψ , X_λ ainsi que leurs dérivées $\vec{\nabla}_n \Psi$ et $\vec{\nabla}_n X_\lambda$ de la manière suivante

$$\Psi = \sum_c \left(\frac{2\mu a_c}{\hbar^2} \right)^{1/2} V_c \psi_c \quad (\text{I.4.127})$$

$$\vec{\nabla}_n \Psi = \sum_c \left(\frac{2\mu}{a_c \hbar^2} \right)^{1/2} (D_c - V_c) \psi_c \quad (\text{I.4.128})$$

Et

$$X_\lambda = \sum_c \left(\frac{2\mu a_c}{\hbar^2} \right)^{1/2} \gamma_{\lambda c} \psi_c \quad (\text{I.4.129})$$

$$\vec{\nabla}_n X_\lambda = \sum_c \left(\frac{2\mu}{a_c \hbar^2} \right)^{1/2} (\delta_{\lambda c} - \gamma_{\lambda c}) \psi_c \quad (\text{I.4.130})$$

Remplaçons (I.4.127), (I.4.128), (I.4.129) et (I.4.130) dans (I.4.121) ; on obtient

$$\begin{aligned} A_\lambda = & \frac{\hbar^2}{(E_\lambda - E) 2\mu} \sum_c \int_{\mathcal{S}} \left\{ \left[\left(\frac{2\mu a_c}{\hbar^2} \right)^{1/2} \gamma_{\lambda c} \psi_c \right]^* \left[\left(\frac{2\mu}{a_c \hbar^2} \right)^{1/2} (D_c - V_c) \psi_c \right] \right. \\ & \left. - \left[\left(\frac{2\mu a_c}{\hbar^2} \right)^{1/2} V_c \psi_c \right] \left[\left(\frac{2\mu}{a_c \hbar^2} \right)^{1/2} (\delta_{\lambda c} - \gamma_{\lambda c}) \psi_c \right]^* \right\} d\mathcal{S} \end{aligned} \quad (\text{I.4.131})$$

Après la simplification de l'expression (I.4.131) et en tenant compte du fait que $\int_{\mathcal{S}} \psi_c^* \psi_{c'} d\mathcal{S} = \delta_{cc'}$, A_λ devient

$$A_\lambda = \frac{1}{E_\lambda - E} \sum_c [D_c \gamma_{\lambda c} - V_c \delta_{\lambda c}] \quad (\text{I.4.132})$$

On définit comme au paragraphe (I.4.1) les conditions aux limites réelles et constantes B_c égales à la dérivée logarithmique de la fonction interne à la surface de la voie c . On a

$$\frac{\delta_{\lambda c}}{\gamma_{\lambda c}} = B_c \quad (\text{I.4.133})$$

En tenant compte de (I.4.133), la relation (I.4.132) devient

$$\begin{aligned} A_\lambda &= \frac{1}{E_\lambda - E} \sum_c [D_c \gamma_{\lambda c} - V_c \gamma_{\lambda c} B_c] \\ &= \frac{1}{E_\lambda - E} \sum_c \gamma_{\lambda c} [D_c - V_c B_c] \\ &= \frac{1}{E_\lambda - E} \sum_c \gamma_{\lambda c} \hat{D}_c \end{aligned} \quad (\text{I.4.134})$$

où $\hat{D}_c = D_c - V_c B_c$. En réintroduisant A_λ dans la relation (I.4.113), la fonction interne évaluée à la surface des voies $\mathcal{S}$ devient

$$\Psi = \sum_\lambda \frac{1}{E_\lambda - E} \sum_c \gamma_{\lambda c} \hat{D}_c X_\lambda \quad (\text{I.4.135})$$

En projetant l'expression (I.4.135) à la surface des voies $\mathcal{S}$ ($\Psi \rightarrow V_{c'}, X_\lambda \rightarrow \gamma_{\lambda c'}$), on a

$$\begin{aligned} V_{c'} &= \sum_c \sum_\lambda \frac{\gamma_{\lambda c} \gamma_{\lambda c'}}{E_\lambda - E} \hat{D}_c \\ &= \sum_c R_{c'c} \hat{D}_c \end{aligned} \quad (\text{I.4.136})$$

On introduit ainsi la matrice R dont les éléments sont

$$R_{cc'} = \sum_\lambda \frac{\gamma_{\lambda c} \gamma_{\lambda c'}}{E_\lambda - E} \quad (\text{I.4.137})$$

Passons maintenant à la recherche de la matrice des collisions U . En tenant compte de l'équation (I.4.111) de la fonction d'onde du milieu externe exprimée sous la forme d'une superposition d'ondes entrantes et sortantes, les quantités V_c et leurs dérivées D_c s'écrivent [26]

$$V_c = \left(\frac{\hbar^2}{2\mu a_c} \right)^{1/2} \frac{1}{\nu_c^{1/2}} \left\{ y_c \mathcal{I}_c - \left(\sum_{c'} y_{c'} U_{cc'} \right) \mathcal{O}_c \right\} \quad (\text{I.4.138})$$

$$D_c = \left(\frac{\rho_c^2 \hbar^2}{2\mu a_c} \right)^{1/2} \frac{1}{\nu_c^{1/2}} \left\{ y_c \frac{\partial \mathcal{I}_c}{\partial \rho_c} - \left(\sum_{c'} y_{c'} U_{cc'} \right) \frac{\partial \mathcal{O}_c}{\partial \rho_c} \right\} \quad (\text{I.4.139})$$

Les fonctions internes et externes étant égales à la surface des voies, on peut insérer les relations (I.4.138) et (I.4.139) dans (I.4.136). On retrouve, après avoir effectué un réarrangement de l'équation et les simplifications nécessaires, la même expression qu'en (I.4.59). L'expression de la matrice U se met aisément sous la forme (en notation matricielle)

$$U = \Omega W \Omega \quad (\text{I.4.140})$$

La matrice U est une matrice complexe, de même que la matrice W . La matrice W est une matrice intermédiaire donnée par l'expression

$$W = P^{\frac{1}{2}} [I - R(L - B)]^{-1} [I - R(L^* - B)] P^{-\frac{1}{2}} \quad (\text{I.4.141})$$

Les matrices B , P , Ω , L et L^* sont des matrices diagonales. B est une matrice réelle dont les éléments sont les conditions aux limites provenant de la relation (I.4.133). La matrice P est également une matrice réelle. Ses éléments sont les parties réelles des dérivées logarithmiques des ondes sortantes. Elle est définie suivant l'expression

$$P = Re \left(\rho \frac{1}{O} \frac{\partial O}{\partial \rho} \right) \quad (\text{I.4.142})$$

Les matrices Ω , L et L^* sont des matrices complexes. Elles sont respectivement données par les expressions

$$\Omega = \left(\frac{I}{O} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (\text{I.4.143})$$

$$L = \rho \frac{\partial O}{\partial \rho} - B \quad (\text{I.4.144})$$

$$L^* = \rho \frac{\partial I}{\partial \rho} - B \quad (\text{I.4.145})$$

Après l'obtention de la matrice des collisions U , établissons ensuite la démarche pour obtenir la section efficace. En considérant une onde incidente de particules de type α , possédant s et m_s comme spins de voie et leurs composantes, dans un mouvement suivant l'axe z , l'amplitude de l'onde diffusée de la relation (I.4.91) par rapport à l'onde plane incidente se réécrit ainsi [1]

$$\begin{aligned} A_{c',c} &= \frac{\pi^{\frac{1}{2}}}{k_\alpha} \left[-C_{\alpha'}(\theta_{\alpha'}) \delta_{c',c} + i \sum_{Jm_J \ell \ell' m_{\ell'}} (2\ell + 1)^{\frac{1}{2}} (s \ell m_\ell 0 | Jm_J) (\ell' s' m_{s'} m_{\ell'} | Jm_J) \right. \\ &\times \left. \left(e^{2i\omega_{\alpha'\ell'}} \delta_{c',c} - U_{c',c}^J \right) Y_{m'}^{(\ell')}(\Omega_{\alpha'}) \right] \end{aligned} \quad (\text{I.4.146})$$

Le terme $C_{\alpha'}(\theta_{\alpha'})$ est le coefficient qui représente la diffusion purement coulombienne. Elle est calculée suivant la relation [1]

$$C_{\alpha'}(\theta_{\alpha'}) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \eta_{\alpha'} \text{cosec}^2 \left(\frac{\theta_{\alpha'}}{2} e^{-2i\eta_{\alpha'} \log \sin \left(\frac{\theta_{\alpha'}}{2} \right)} \right) \quad (\text{I.4.147})$$

Où $\theta_{\alpha'}$ est l'angle de diffusion et $\eta_{\alpha'}$ est le paramètre de Coulomb donné par la relation

$$\eta_{\alpha'} = \frac{Z_{1\alpha'} Z_{2\alpha'} e^2}{\hbar \nu_{\alpha'}} \quad (\text{I.4.148})$$

Dans la relation (I.4.148), $Z_{1\alpha'}$, $Z_{2\alpha'}$, e , $\hbar$ et $\nu_{\alpha'}$ sont respectivement les nombres de charges des particules 1 et 2 qui constituent le couple de sortie α' , la valeur d'une charge, la constante de Planck réduite ainsi que la vitesse relative entre les deux particules. Cette dernière est donnée par la relation

$$\nu_{\alpha'} = \frac{\hbar k_{\alpha'}}{\frac{mM}{m+M}} \quad (\text{I.4.149})$$

où m , M , $k_{\alpha'}$ sont respectivement la masse de la particule 1, la masse de la particule 2 et le nombre d'onde. Le coefficient $\omega_{\alpha'\ell'}$ qui se trouve dans le terme exponentiel de la relation I.4.146 est le facteur de déphasage coulombien donné par la relation

$$\omega_{\alpha'\ell'} = \begin{cases} 0 & \ell' = 0 \\ \sum_{n=1}^{\ell'} \tan^{-1} \left(\frac{\eta_{\alpha'}}{n} \right) & \ell' \neq 0 \end{cases} \quad (\text{I.4.150})$$

La section efficace différentielle en angle est proportionnelle au carré de la valeur absolue de l'amplitude $A_{c',c}$ telle que

$$d\sigma_{\alpha,\alpha'} = \frac{1}{(2i+1)(2I+1)} \times \sum_{ss'm_s m_{s'}} |A_{\alpha's'm_{s'},\alpha s m_s}(\Omega_{\alpha'})|^2 d\Omega_{\alpha'} \quad (\text{I.4.151})$$

La section efficace intégrée en angle est obtenue en effectuant une intégration sur l'angle solide Ω . La section efficace d'une réaction d'un couple α se désintégrant en donnant un couple α' s'exprime ainsi

$$\sigma_{\alpha,\alpha'}^J = \frac{\pi}{k_\alpha^2} \frac{2J+1}{(2i+1)(2I+1)} \sum_c \sum_{c'} |\delta_{c'c} - U_{c'c}^J|^2 \quad (\text{I.4.152})$$

Le facteur $\frac{2J+1}{(2i+1)(2I+1)}$ est appelé *facteur statistique de spin* et est souvent désigné par g_J tel que

$$g_J = \frac{2J+1}{(2i+1)(2I+1)} \quad (\text{I.4.153})$$

En tenant compte de la contribution de tous les J , moments angulaires totaux possibles, la section de la réaction $\alpha \rightarrow \alpha'$ est obtenue ainsi

$$\sigma_{c,c'} = \frac{\pi}{k_\alpha^2} \sum_J g_J \sum_{c'' \in c} \sum_{c''' \in c'} |\delta_{c'c} - U_{c'c}^J|^2 \quad (\text{I.4.154})$$

On rappelle que α et α' qualifient respectivement la paire de particule/noyau en interaction et la partition du système composé après interaction. Ici la particule sortante est différent de la particule incidente ($\alpha \neq \alpha'$) et définit la section efficace de réaction. Dans le cas contraire (paire sortante $\equiv$ paire entrante), I.4.154 donne la section de diffusion. Les caractéristiques d'un couple (α ou α') sont le nom et le spin intrinsèque de chaque particule/noyau du couple, en plus de l'énergie d'excitation si la particule est le noyau cible ou résiduel. Si l'état d'excitation du noyau résiduel dans la voie de sortie est différent de son état fondamental, on parle d'une *diffusion inélastique* (à ne pas confondre avec la diffusion inélastique thermique). Comme dans le cas de la diffusion, on peut aussi comptabiliser les voies de réaction "inélastiques" en fonction du niveau d'excitation du noyau résiduel.

Pour obtenir la *section efficace totale*, exploitons la propriété de l'unitarité de la matrice des collisions $\sum_{c'} |U_{cc'}|^2 = 1$. En faisant la somme sur toutes les voies de sortie c' , nous obtenons la section efficace contenant les contributions de toutes les voies de désexcitation énergétiquement possibles

$$\begin{aligned} \sum_{c'} |(\delta_{cc'} - U_{cc'})|^2 &= \sum_{c'} (\delta_{cc'} - U_{cc'}^*)(\delta_{cc'} - U_{cc'}) \\ &= \sum_{c'} (\delta_{cc'}\delta_{cc'} - \delta_{cc'}U_{cc'}^* - \delta_{cc'}U_{cc'} + |U_{cc'}|^2) \\ &= \sum_{c'} \delta_{cc'}\delta_{cc'} - \sum_{c'} \delta_{cc'}U_{cc'}^* - \sum_{c'} \delta_{cc'}U_{cc'} \\ &\quad + \sum_{c'} |U_{cc'}|^2 \end{aligned} \quad (\text{I.4.155})$$

De par les propriétés de $\delta_{cc'}$ et de l'unitarité de la matrice U , si $c = c'$, la relation (I.4.155) peut être réécrite

$$\sum_{c'} |(\delta_{cc'} - U_{cc'})|^2 = 1 - U_{cc}^* - U_{cc} + 1 \quad (\text{I.4.156})$$

La matrice U étant complexe, on obtient

$$U_{cc} = \text{Re}(U_{cc}) + \text{Im}(U_{cc}) \quad (\text{I.4.157})$$

et

$$U_{cc}^* = \text{Re}(U_{cc}) - \text{Im}(U_{cc}) \quad (\text{I.4.158})$$

En tenant compte de (I.4.157) et (I.4.158), la relation (I.4.156) se réduit à

$$\begin{aligned} \sum_{c'} |(\delta_{cc'} - U_{cc'})|^2 &= 1 - \text{Re}(U_{cc}) + \text{Im}(U_{cc}) - \text{Re}(U_{cc}) - \text{Im}(U_{cc}) + 1 \\ &= 2 - 2\text{Re}(U_{cc}) \end{aligned} \quad (\text{I.4.159})$$

En combinant (I.4.154) et (I.4.159), la section efficace totale s'écrit

$$\sigma_{\alpha, \text{tot}} = 2 \frac{\pi}{k_\alpha^2} \sum_J g_J \sum_c [1 - \text{Re}(U_{cc}^J)] \quad (\text{I.4.160})$$

I.5 Rôle des facteurs de déphasage φ , de décalage S , de pénétrabilité P et corrélations avec les conditions aux limites B et a_c

I.5.1 Le facteur de déphasage sur sphère dure φ

Le facteur de déphasage sur une sphère dure φ représente le brusque changement de phase que subit l'onde sortante à la voie lors de la diffusion de la particule incidente. C'est le déphasage induit par une sphère de rayon a_c dans l'hypothèse d'une répulsion infinie [1]. Ce déphasage provient de la différence des vitesses de l'onde en présence ou non de forces nucléaires. La section efficace de diffusion élastique potentielle (la section efficace non résonnante) dépend directement du facteur φ . Pour une onde d'une voie c dans la voie élastique avec un moment angulaire total fixé, la section efficace (I.4.152) s'écrit

$$\sigma_{cc} = \frac{\pi}{k_c^2} g_c |1 - U_{cc}|^2 \quad (\text{I.5.1})$$

où

$$g_c = \frac{2J_c + 1}{(2i_c + 1)(2I_c + 1)} \quad (\text{I.5.2})$$

et

$$U_{cc} = e^{-i\varphi_c} P_c^{\frac{1}{2}} [1 - R_{cc}(L_{cc} - B_{cc})]^{-1} [1 - R_{cc}(L_{cc}^* - B_{cc})] e^{-i\varphi_c} P_c^{-\frac{1}{2}} \quad (\text{I.5.3})$$

Avec $B_{cc} = B_c \delta_{cc}$. En éliminant la diffusion résonnante, $R_{cc} = 0$, l'élément U_{cc} de la matrice des collisions se simplifie

$$U_{cc} = e^{-2i\varphi_c} \quad (\text{I.5.4})$$

En tenant compte du fait que $e^{-2i\varphi_c} = \cos 2\varphi_c - i \sin 2\varphi_c$, l'expression (I.5.3) peut se mettre sous la forme

$$U_{cc} = 1 - 2\sin^2\varphi_c - 2i\sin\varphi_c\cos\varphi_c \quad (\text{I.5.5})$$

En insérant la relation (I.5.5) dans (I.5.1), on obtient la section efficace de diffusion élastique potentielle (*shape*) pour la voie c

$$\sigma_c^{\text{shape}} = \frac{4\pi}{k_c^2} g_c \sin^2\varphi_c \quad (\text{I.5.6})$$

I.5.2 Le facteur de décalage énergétique S (ou shift)

Le facteur dit de shift S représente le décalage énergétique entre la position de la résonance observée et sa position réelle dans le noyau composé (valeur propre E_λ). Reprenons l'équation de la matrice des collisions pour la diffusion élastique (I.5.3). Au regard de l'expression de la matrice inverse contenue dans cette relation, le dénominateur est

$$(E_\lambda - E) - \gamma_c^2 (S_{cc} - B_{cc}) + i\gamma_c^2 P_c \iff [E_\lambda - \gamma_c^2 (S_{cc} - B_{cc})] - E + i\gamma_c^2 P_c \quad (\text{I.5.7})$$

Le maximum du module au carré $|1 - U_{cc}|^2$ de la relation (I.5.1) apparaît à l'énergie $E_\lambda - \Delta_\lambda$, avec

$$\Delta_\lambda = \gamma_c^2 (S_{cc} - B_{cc}) \quad (\text{I.5.8})$$

La position du pic de la résonance est donc décalée d'un facteur Δ_λ par rapport à l'énergie de la résonance E_λ qui correspond à l'énergie de l'état du noyau composé dans le référentiel considéré.

I.5.3 Le paramètre de condition aux limites B

Le paramètre réel $B_{cc'} = B_c \delta_{cc'}$ caractérise une des conditions aux limites à la surface de la voie en plus du rayon d'interaction. Il est choisi de manière totalement arbitraire. Le seul critère physique qui intervient dans son choix est qu'il soit **indépendant de l'énergie**. Cela permet de garantir l'hermiticité de l'hamiltonien et la propriété d'orthonormalité des fonctions d'ondes dans la région interne.

Le choix le plus recommandé par les auteurs est $B_{cc'} = -\ell$. Ce choix permet d'annuler le décalage entre la position des résonances observées et la position des états correspondants pour les ondes s ($\ell = 0$) ou à très basse énergie ($ka_c \rightarrow 0$) vu que dans ce cas $S_{cc} = B_{cc} = -\ell$. Ces deux paramètres sont reliés à travers le

décalage de niveau $\Delta_\lambda = (S_{cc} - B_{cc})\gamma_c^2$ de la relation (I.5.7). Cependant, le choix $B_{cc} = -\ell$ ne permet pas d'annuler le décalage des ondes de moment angulaire orbital supérieur à $\ell = 0$ (p, d, f,...) associées aux résonances de plus haute énergie.

Un choix alternatif souvent pratiqué pour résoudre ce problème est de poser $S_{cc} = B_{cc}$. C'est un choix non-physique qui présente l'inconvénient de ne pas conserver l'hermiticité de l'hamiltonien. Ce choix a toutefois un grand avantage pratique car il permet d'imposer $\Delta_\lambda = 0$ pour n'importe quelle énergie et pour n'importe quel type d'onde. Dans le cas de noyaux cibles lourds avec un domaine RRR intrinsèquement réduit (0-2,5 keV pour l' ^{235}U par exemple), la condition $B_{cc} = -\ell$ est plus adaptée puisque les résonances s sont fortement majoritaires dans le domaine énergétique observé (c'est d'ailleurs une explication possible historique de ce choix). La Figure I.5.1 compare les deux choix pour la section efficace de diffusion élastique du système ($n + ^{16}\text{O}$).

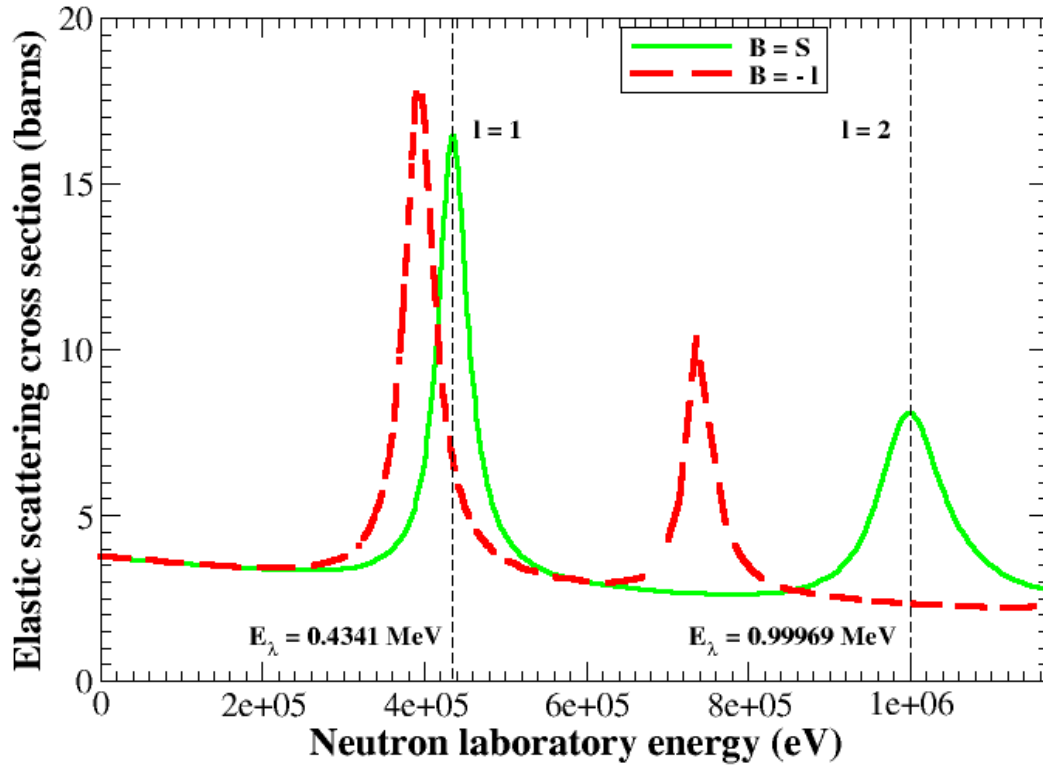


FIGURE I.5.1 – Section efficace de diffusion élastique du système ($n + ^{16}\text{O}$) avec pour conditions aux limites $B_{cc} = S_{cc}$ (courbe pleine) et $B_{cc} = -\ell$ (courbe en pointillé). Le pic des résonances est décalé vers la gauche par rapport à la position de l'état du système composé lorsque $B_{cc} = -\ell$. On remarque naturellement que le décalage augmente avec ℓ comme visible pour la résonance d ($\ell = 2$) à 1 MeV par comparaison avec la résonance p ($\ell = 1$) à 400 keV. Par contre, le pic reste fidèle à la position de l'état propre du noyau composé pour $B_{cc} = S_{cc}$.

I.5.4 Le rayon de voie a_c

Une seconde condition aux limites impliquée dans la connection de la région externe avec la région interne est le rayon de voie, a_c . Comme B , il est fixé de manière arbitraire. Idéalement, il doit être choisi de telle manière que l'interaction nucléaire forte, qui est de courte portée, soit nulle dans la région des voies (région externe). Au sein du formalisme matrice R , le rayon de voie intervient à trois endroits du calcul : dans les facteurs de pénétrabilité $P_\ell(E)$ et de décalage de niveau (ou shifts) $S_\ell(E)$ ainsi que dans le calcul des facteurs de déphasage sur sphère dure $\varphi_\ell(E)$.

Le manuel ENDF-6 [28], qui propose un format de codage des données neutroniques évaluées, énumère différentes manières de choisir et d'utiliser le rayon pour toutes les voies neutroniques. Regroupons ces différents choix en cinq options. La *première option* permet l'utilisation du rayon a_c (toujours fixe avec l'énergie) obtenu suivant la formule (I.3.11) uniquement pour le calcul des facteurs de pénétrabilité $P_\ell(E)$ et de décalage de niveau $S_\ell(E)$. Les facteurs de déphasage sur sphère dure $\varphi_\ell(E)$ sont alors calculés en utilisant un rayon de diffusion possiblement de valeur différente de a_c , notée AP, ici indépendant de l'énergie. La *seconde option* admet l'utilisation d'une valeur de rayon différente de la recommandation de la formule (I.3.11), toujours notée AP, pour le calcul des trois facteurs $P_\ell(E)$, $S_\ell(E)$ et $\varphi_\ell(E)$. La *troisième option* autorise l'utilisation du rayon a_c (indépendant de l'énergie) dans le calcul des facteurs $P_\ell(E)$ et $S_\ell(E)$ tandis que le calcul des facteurs de déphasage sur sphère dure $\varphi_\ell(E)$ est effectué en utilisant un rayon de diffusion dépendant de l'énergie $AP(E)$. La *quatrième option* permise par le format ENDF est l'utilisation d'un rayon dépendant de l'énergie $AP(E)$ pour le calcul des trois paramètres $P_\ell(E)$, $S_\ell(E)$ et $\varphi_\ell(E)$. Enfin, la *cinquième et dernière option* assigne l'utilisation d'un rayon AP (indépendant de l'énergie) au calcul des facteurs $P_\ell(E)$ et $S_\ell(E)$; le calcul des facteurs $\varphi_\ell(E)$ est quant à lui, réalisé en utilisant le rayon $AP(E)$.

Options	$P_\ell(E)$	$S_\ell(E)$	$\varphi_\ell(E)$
Première	a_c	a_c	AP
Deuxième	AP	AP	AP
Troisième	a_c	a_c	$AP(E)$
Quatrième	$AP(E)$	$AP(E)$	$AP(E)$
Cinquième	AP	AP	$AP(E)$

TABLE I.5.1 – Résumé des différentes options pour le choix du rayon de voie prévues par le format ENDF lors du stockage de l'information pour le calcul des facteurs de pénétrabilité $P_\ell(E)$, de décalage de niveau $S_\ell(E)$ et des facteurs de déphasage sur sphère dure $\varphi_\ell(E)$. a_c désigne la valeur indépendante de l'énergie établie suivant la formule (I.3.11) tandis que AP est une valeur arbitraire choisie par l'évaluateur.

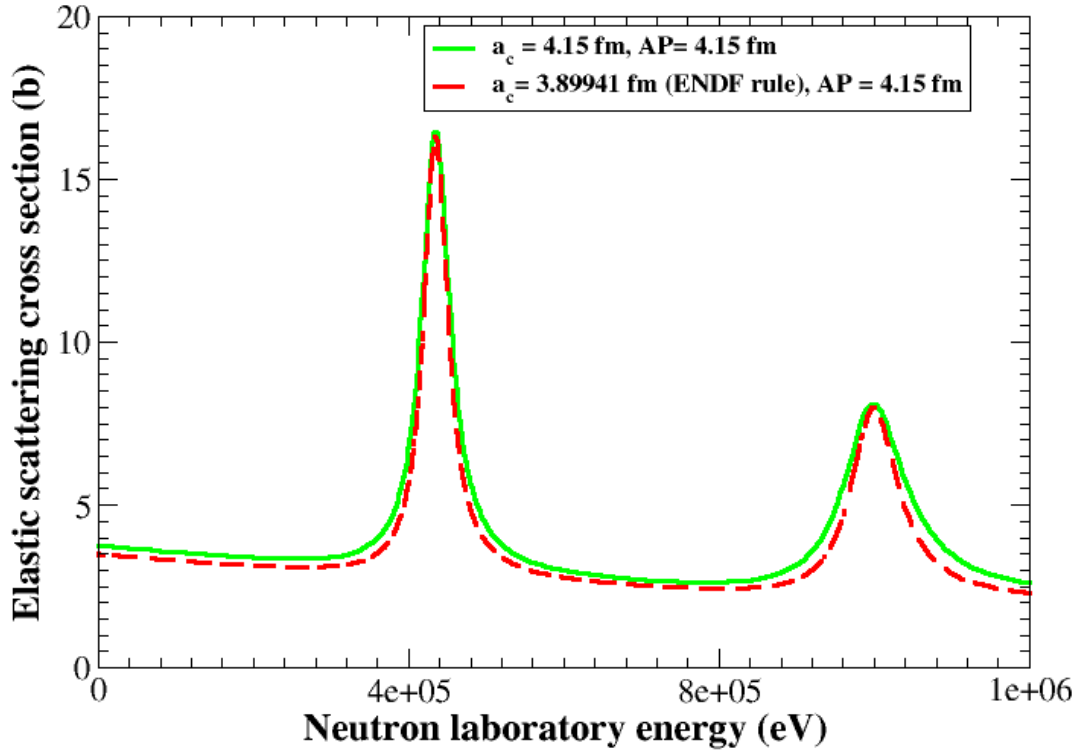


FIGURE I.5.2 – Section efficace de diffusion élastique du système ($n + {}^{16}\text{O}$) avec les conditions aux limites $B = S$. Comparaison entre la section efficace obtenue pour un rayon unique ($a_c = AP = 4.15$ fm suggéré par la référence [38]) (courbe pleine) et celle obtenue en utilisant deux valeurs simultanées du rayon (a_c, AP) tel que $a_c = 3.89941$ fm soit calculé à partir de (I.3.11) et $AP = 4.15$ fm suggéré par la référence [38] (courbe en pointillé). On pressent que le choix fait par l'évaluateur aura une incidence sur la signification physique des paramètres.

Le Tableau I.5.1 résume les cinq options et la Figure I.5.2 compare les sections efficaces de diffusion élastique obtenues pour la première option ($a_c \neq AP$) et la seconde option ($a_c = AP$). Les évaluateurs de données nucléaires sont assurément amenés à faire des choix entre les différentes options. La plupart des anciennes évaluations sont effectuées sur base d'un rayon unique indépendant de l'énergie pour tous les ingrédients de la matrice des collisions. Cette approche a été fortement défendue par F. Fröhner et O. Bouland [37]. Pour le cas d'un rayon unique et constant, nous citerons par exemple l'évaluation de l' ${}^{16}\text{O}$ par L. Leal [38]. On rencontre également des évaluations réalisées sur la base d'un rayon de diffusion qui varie avec l'énergie (ex : les travaux de thèse de P. Archier sur le Sodium [6]). En plus de ce pôle de discussion sur le choix de l'utilisation ou non d'un rayon unique, nous pouvons également relever la possibilité de rattacher un rayon à chaque nombre quantique orbital ℓ de la voie. La formule standard de calcul du rayon de voie neutronique (I.3.11) proposée par le manuel ENDF-6 fait également l'objet de discussions. La plupart des évaluations que l'on rencontre se font sur la base

de rayons de voie ajustés sur les données nucléaires analysées. Cette pratique est valable aussi bien pour les neutrons que pour l'ajustement des données impliquant des particules chargées. Le rayon de diffusion ou « rayon effectif » peut quant à lui être extrait des informations fournies par les calculs réalisés sur la base du modèle optique (projection en terme de section efficace de diffusion potentielle via le paramètre R') au moyen du code TALYS pour les ondes s à basse énergie comme nous l'aborderons dans les travaux préliminaires à un ajustement.

I.6 Approximation Reich-Moore (RM) de la théorie de la matrice R

Le calcul des sections efficaces en matrice R exacte peut se révéler très laborieux lorsqu'on est amené à traiter un grand nombre de voies. Cela est particulièrement vrai lorsqu'il s'agit d'un noyau lourd. En effet, de tels noyaux présentent un grand nombre de voies de désexcitation radiative (jusqu'à 800 transitions électromagnétiques). La difficulté majeure réside dans le calcul de la matrice inverse $[1 - R(L - B)]^{-1}$ de l'expression (I.4.82) à cause de la taille des matrices qui la composerait. Pour résoudre ce problème, C. W. Reich et M. S. Moore [39] ont proposé, en 1958, l'approximation qui porte leur nom et qui consiste à négliger tous les éléments de la matrice R non diagonaux relatifs aux voies photons. En effet, ces voies présentent individuellement des signes aléatoires et leurs termes croisés s'annulent en moyenne. Seuls les termes diagonaux interviennent alors. Les éléments diagonaux restants des voies photons sont absorbés par le dénominateur de la matrice R . La matrice ainsi obtenue est dite « réduite » car définie dans un sous-espace de voies sans photons. L'élément de matrice est donné, sous l'approximation Reich-Moore, par l'expression

$$R_{cc'} = \sum_{\lambda} \frac{\gamma_{\lambda c} \gamma_{\lambda c'}}{E_{\lambda} - E - i \frac{\Gamma_{\lambda\gamma}}{2}} \quad (\text{I.6.1})$$

où $\Gamma_{\lambda\gamma}$ est la largeur totale de désexcitation radiative appartenant à la résonance λ . La section efficace de capture est alors obtenue en effectuant la différence entre la section efficace totale et la somme des sections efficaces partielles de toutes les autres voies non photons. Ainsi

$$\sigma_{c\gamma} = \sigma_c - \sum_{c' \notin \gamma} \sigma_{cc'} \quad (\text{I.6.2})$$

Cette approximation étant difficile à mettre en défaut, c'est elle qui a été choisie, en sus du formalisme général, pour ce travail de thèse.

I.7 Conclusion sur le chapitre

Dans ce chapitre, un rappel du contexte théorique dans lequel se déroule cette thèse, a été fait. Nous avons présenté, en utilisant une démarche qui permet de mettre en exergue la provenance et le rôle de chaque ingrédient, la manière dont la section efficace est obtenue. Nous avons également rappelé les processus décrits phénoménologiquement par le modèle optique qui convient bien au domaine statistique ; lequel permet une description des contributions s'étendant dans le domaine des résonances résolues. Ces processus sont notamment la capture directe, la diffusion inélastique directe et la diffusion élastique potentielle. De la théorie de la matrice R , nous pouvons retrouver les approximations les plus simples bien connues [Simple Niveau Breit-Wigner (SLBW) et Multi Niveau Breit-Wigner (MLBW)]. Nous invitons le lecteur à consulter par exemple la référence [40] ou [28] pour avoir d'amples informations sur les deux formalismes]. Ces dernières étaient justifiées historiquement pour des coûts moindres en taille mémoire et temps de calculs. Dans ce chapitre, nous avons présenté l'approximation Reich-Moore, la moins réductrice, sur laquelle nous avons choisi de nous appuyer au cours de ce travail en sus du formalisme matrice R exacte.

Chapitre II

Le système unifié dans la modélisation des sections efficaces et choix du système composé $^{17}\text{O}^*1$ pour application

II.1 Introduction

Les codes de calcul de sections efficaces ont longtemps été rigidement attachés à la spectroscopie neutronique dans le domaine de la physique des réacteurs. En effet, les données nucléaires évaluées sont pour la plupart fournies dans le référentiel du laboratoire du neutron. Pour alimenter la base de mesures expérimentales, il arrive qu'on ait recours à l'inversion de données dans le but de remplacer, par les données d'une réaction réciproque, la mesure manquante d'une réaction en neutron incident. Bien qu'une comparaison rapide d'un calcul de section efficace en cinématique directe et les données provenant de l'inversion d'une réaction réciproque vont dans le sens de la validation de l'hypothèse du noyau composé sur laquelle s'appuie l'inversion dans le domaine des résonances résolues [41], des questions subsistent quant à l'impact des phénomènes directs et semi-directs dans cette région lors de l'évaluation. De plus, l'analyse de fichiers de paramètres évalués dans des systèmes de référence différents montrent des incohérences sur des données comptant pourtant pour un même système composé. Toutes ces questions peuvent trouver une réponse en s'appuyant sur une modélisation de sections efficaces qui remplace le référentiel du laboratoire du projectile (resp. ejectile), dont l'origine de l'échelle en énergie est le seuil d'émission du projectile (resp. ejectile), par le *référentiel unifié* du centre de masse du système composé excité dont l'origine de l'échelle en énergie est l'énergie de l'état fondamental de ce dernier.

1. Le signe * dans tout le chapitre signifie un système composé dans son état excité.

II.2 Du référentiel du laboratoire au centre de masse (CM) dans le système composé excité

II.2.1 Référentiel du laboratoire avec référence au seuil d'émission du projectile (resp. ejectile)

Le référentiel du laboratoire est un système dans lequel la cible est au repos. La quantité de mouvement initial du projectile est (le détail de la manière dont cette formule est obtenue est fournie dans l'annexe B)

$$K = k\hbar = \sqrt{\frac{2mM}{m+M} \left[E^{Lab} \frac{M}{m+M} - Q \right]} \quad (\text{II.2.1})$$

où k est le nombre d'onde, m est la masse du projectile et M la masse de la cible. E^{Lab} est l'énergie de la particule incidente (le projectile) dans le système du laboratoire. Q est l'énergie de réaction dans le CM. Elle est obtenue par différence entre l'énergie de séparation du projectile $S_{proj.}$ et celle de l'éjectile $S_{ej.}$ suivant l'équation

$$Q = -(S_{proj.} - S_{ej.}) \quad (\text{II.2.2})$$

La référence pour l'énergie de la particule incidente est fixée à l'énergie seuil $S_{proj.}$. Cela veut dire qu'au seuil de la réaction, $E^{Lab} = 0$. La section efficace d'une réaction évaluée dans le système du laboratoire s'articule ainsi

$$\sigma_{cc'}(E^{Lab}) = \frac{\pi}{k^2(E^{Lab})} g_c |\delta_{cc'} - U_{cc'}|^2 \quad (\text{II.2.3})$$

Dans la relation II.2.3, l'élément de la matrice des collisions $U_{cc'}$ contient l'élément de la matrice $R_{cc'}$ qui est égal à (Eq. (I.4.137))

$$R_{cc'}(E^{Lab}) = \sum_{\lambda} \frac{\gamma_{\lambda c}^{Lab} \gamma_{\lambda c'}^{Lab}}{E_{\lambda}^{Lab} - E^{Lab}} \quad (\text{II.2.4})$$

La matrice R est calculée à chaque énergie du projectile simultanément pour toutes les voies ouvertes sur une plage d'énergie donnée. L'étiquetage projectile-éjectile devient extrêmement complexe à gérer puisque pour un élément de matrice d'une voie d'entrée de couple α et d'une voie de sortie de couple α' , l'élément de matrice de la réaction réciproque de voie d'entrée de couple α' et de voie de sortie de couple α est également présent. Il y a donc constamment une transformation des projectiles en éjectiles et des cibles en noyaux résiduels. Les paramètres d'entrée de la matrice R tabulés étant souvent attachés au référentiel du laboratoire d'un projectile déterminé, ce jeu de transformation mutuelle projectiles-éjectiles et cibles-noyaux résiduels peut être une source d'erreurs. Il faut donc veiller à ce que les transformations mutuelles d'un système de référence à l'autre soient prises en compte correctement dans la matrice R lorsque le couple de la voie d'incidence

change. Les transformations des paramètres d'un référentiel à un autre s'effectue ainsi

$$E_{\lambda}^{\text{Lab},\alpha} = E_{\lambda}^{\text{Lab},\alpha'} \frac{M_{\alpha'}}{M_{\alpha'} + m_{\alpha'}} \frac{M_{\alpha} + m_{\alpha}}{M_{\alpha}} - (S_{\text{proj.},\alpha'} - S_{\text{proj.},\alpha}) \frac{M_{\alpha} + m_{\alpha}}{M_{\alpha}} \quad (\text{II.2.5})$$

$$\gamma_{\lambda}^{\text{Lab},\alpha} = \gamma_{\lambda}^{\text{Lab},\alpha'} \sqrt{\frac{M_{\alpha'}}{M_{\alpha'} + m_{\alpha'}}} \sqrt{\frac{M_{\alpha} + m_{\alpha}}{M_{\alpha}}} \quad (\text{II.2.6})$$

Les étiquettes α et α' désignent les couples impliqués dans la formation et la désexcitation du système composé, les deux pouvant bien se retrouver dans la voie d'incidence comme dans la voie de sortie. M et m sont respectivement les masses de la cible et du projectile.

II.2.2 Le référentiel unifié du centre de masse du système composé excité

Le référentiel du centre de masse (CM) est un système dans lequel la cible est en mouvement. La quantité de mouvement initiale du projectile est

$$K = k\hbar = \sqrt{\frac{2mM}{m+M} [E^{\text{CM}} - S_{\text{part.}}]} \quad (\text{II.2.7})$$

où k est le nombre d'onde, m est la masse du projectile et M la masse de la cible. E^{CM} est l'énergie du projectile (resp. éjectile) dans le référentiel du centre de masse par rapport à l'énergie de l'état fondamental du système composé. La différence ($E^{\text{CM}} - S_{\text{part.}}$) est due au fait qu'une réaction n'est considérée ouverte qu'à partir du seuil d'émission du projectile. Cette différence permet une gestion correcte des voies ouvertes et non ouvertes à une énergie donnée. La section efficace d'une réaction évaluée dans le système du centre de masse du système composé excité est

$$\sigma_{cc'}(E^{\text{CM}}) = \frac{\pi}{k^2 (E^{\text{CM}})} g_c |\delta_{cc'} - U_{cc'}|^2 \quad (\text{II.2.8})$$

L'élément de la matrice $R_{cc'}$ s'écrit

$$R_{cc'}(E^{\text{CM}}) = \sum_{\lambda} \frac{\gamma_{\lambda c}^{\text{CM}} \gamma_{\lambda c'}^{\text{CM}}}{E_{\lambda}^{\text{CM}} - E^{\text{CM}}} \quad (\text{II.2.9})$$

L'élément de matrice II.2.9 est sans doute le plus aisé à manipuler par rapport à celui de l'équation II.2.4. En effet, les inquiétudes relevées au paragraphe II.2.1 par rapport aux changements de référentiels qui accompagnent l'interchangeabilité des couples projectiles-cibles et éjectiles-noyaux résiduels n'ont plus raison d'être. Les quantités $\gamma_{\lambda c}^{\text{CM}}$, $\gamma_{\lambda c'}^{\text{CM}}$ et E_{λ}^{CM} de la matrice R restent inchangées dans le référentiel du CM si la référence de l'échelle en énergie pour le couple (E_{λ}^{CM} , E^{CM}) est l'énergie de l'état fondamental du système composé excité. Le référentiel ainsi défini étant

commun à toutes les réactions ouvertes, les paramètres de résonances utilisés pour leur modélisation restent identiques quel que soit le couple de la voie d'entrée. La modélisation des sections efficaces dans un référentiel unifié constitue l'objectif principal de cette thèse.

II.2.3 L'avantage du passage du système du laboratoire au système unifié du centre de masse du noyau composé excité

Les méthodes classiques de modélisation de section efficace, qui s'appuient sur le référentiel du laboratoire rattaché au projectile, ne permettent d'observer que des réactions ayant dans la voie d'incidence la particule-projectile en question. Les réactions ayant des projectiles différents sont donc forcément analysées dans des systèmes du laboratoire différents, ce qui rend les paramètres des résonances E_λ et $\Gamma_{\lambda c}(E_\lambda)$ non comparables aisément. Ainsi, pour deux réactions réciproques qui partagent un même noyau composé et qui sont évaluées chacune dans son propre système de référence du laboratoire, il est vraisemblable d'obtenir des paramètres de résonances E_λ et $\Gamma_{\lambda c}(E_\lambda)$ différents. De plus, vu que le système du laboratoire restreint le panel des réactions observées à un seul couple dans la voie d'entrée, l'information sur les réactions réciproques est obtenue en faisant recours à l'inversion de données.

L'élément de la matrice R (Eq. (I.4.137)) étant calculé avec l'amplitude réduite $\gamma_{\lambda c}$, un paramètre de structure nucléaire indépendant de l'énergie du projectile, la largeur de la résonance $\Gamma_{\lambda c}(E)$ tabulée dans les fichiers d'évaluation peut être ignorée. Dans ce cas, l'amplitude réduite est traitée directement au lieu d'être convertie à partir de la largeur de la résonance par la formule

$$\Gamma_{\lambda c}(E) = 2P_c(E)\gamma_{\lambda c}^2 \quad (\text{II.2.10})$$

où $P(E)$ est la pénétrabilité de la barrière potentielle qui dépend de l'énergie du projectile.

La modélisation des sections efficaces dans le référentiel unifié du centre de masse du système composé excité apporte une réponse qui résout les questions soulevées ci-dessus. Cette approche, dans laquelle nous proposons l'utilisation des paramètres communs, les amplitudes réduites $\gamma_{\lambda c}^{\text{CM}}$, permet de scruter toutes les réactions ouvertes de manière simultanée. Les réactions réciproques sont traitées directement sans inversion de données. La force et la cohérence de notre approche s'appuient sur le fait d'avoir un unique jeu de paramètres de structure nucléaire par noyau pour reproduire toutes les sections efficaces, quel que soit le couple de particules impliqué dans l'interaction. La Figure II.2.1 donne une comparaison succincte de la méthode unifiée par rapport aux méthodes classiques dans le cas du système composé $^{17}\text{O}^*$.

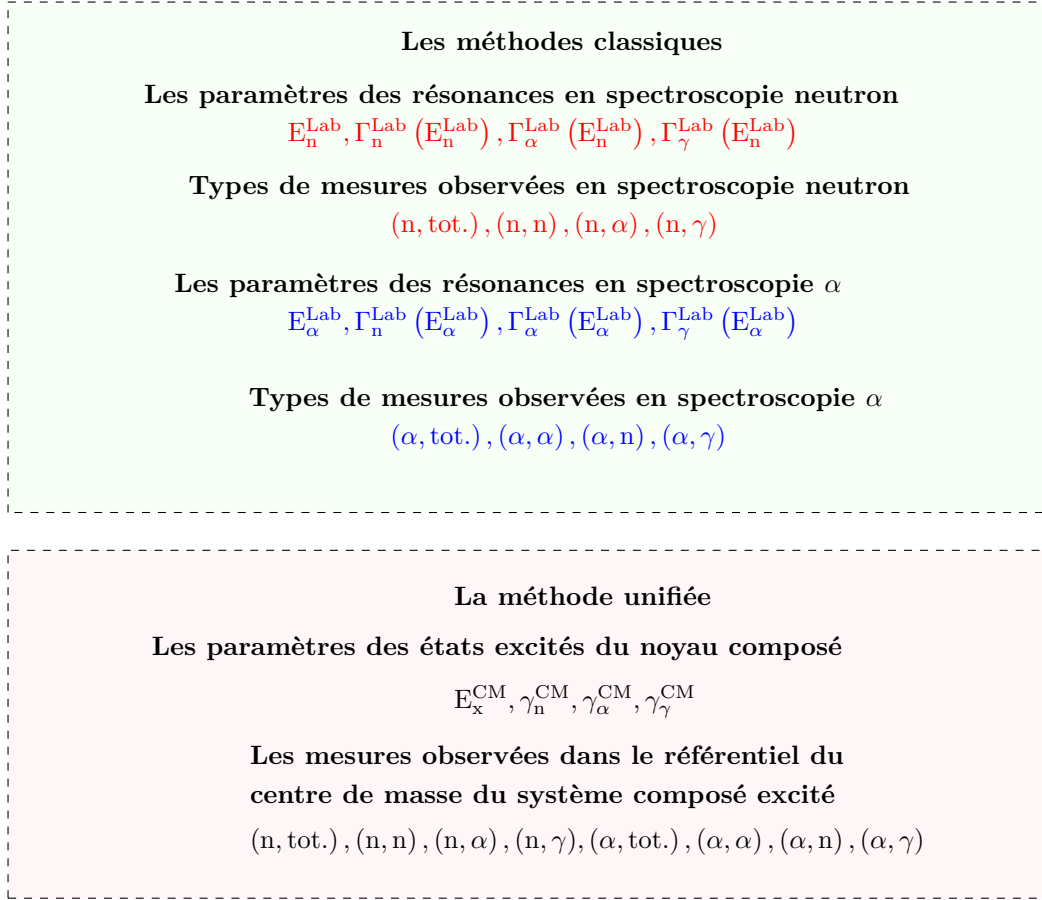


FIGURE II.2.1 – Comparaison des paramètres utilisés et des réactions pouvant être observées dans les méthodes classiques et la méthode unifiée dans le cas du système composé $^{17}\text{O}^*$.

II.2.4 Le problème de l'inversion de données

Considérons une réaction d'un couple α (projectile et cible) vers un couple α' (éjectile et noyau résiduel) dont la section efficace est

$$\sigma_{\alpha\alpha'}(E_\alpha) = \frac{\pi}{k_\alpha^2} g_\alpha \sum_{c'} |\delta_{cc'} - U_{cc'}|^2 \quad (\text{II.2.11})$$

La section efficace de sa réaction réciproque est

$$\sigma_{\alpha'\alpha}(E_{\alpha'}) = \frac{\pi}{k_{\alpha'}^2} g_{\alpha'} \sum_c |\delta_{c'c} - U_{c'c}|^2 \quad (\text{II.2.12})$$

En divisant la relation (II.2.12) par la relation (II.2.11), on obtient

$$\frac{\sigma_{\alpha'\alpha}(E_{\alpha'})}{\sigma_{\alpha\alpha'}(E_\alpha)} = \frac{\frac{\pi}{k_{\alpha'}^2} g_{\alpha'} \sum_c |\delta_{c'c} - U_{c'c}|^2}{\frac{\pi}{k_\alpha^2} g_\alpha \sum_{c'} |\delta_{cc'} - U_{cc'}|^2} \quad (\text{II.2.13})$$

En tenant compte du fait que $\delta_{c'c} = \delta_{cc'} = 0$ pour $c \neq c'$ et que la matrice U est unitaire ($\sum_c |U_{cc'}|^2 = 1$ et $\sum_{c'} |U_{c'c}|^2 = 1$) et symétrique ($U_{cc'} = U_{c'c}$), la relation (II.2.13) devient

$$\sigma_{\alpha'\alpha}(E_{\alpha'}) = \frac{k_{\alpha}^2 g_{\alpha'}}{k_{\alpha'}^2 g_{\alpha}} \sigma_{\alpha\alpha'}(E_{\alpha}) \quad (\text{II.2.14})$$

E_{α} est l'énergie du projectile de la réaction $\alpha \rightarrow \alpha'$ et $E_{\alpha'}$ est l'énergie du projectile de la réaction $\alpha' \rightarrow \alpha$. Dans le système du laboratoire, l'énergie de la réaction réciproque est obtenue en appliquant le changement de référentiel suivant la relation (II.2.15).

$$E^{\text{Lab},\alpha'} = E^{\text{Lab},\alpha} \frac{M_{\alpha}}{M_{\alpha} + m_{\alpha}} \frac{M_{\alpha'} + m_{\alpha'}}{M_{\alpha'}} - (S_{\text{proj},\alpha} - S_{\text{proj},\alpha'}) \frac{M_{\alpha'} + m_{\alpha'}}{M_{\alpha'}} \quad (\text{II.2.15})$$

Les propriétés physiques de la matrice U (unitarité et symétrie) justifient, comme on le voit par l'établissement de l'équation (II.2.14), la pratique de l'inversion de données souvent utilisée par les évaluateurs. Toutefois, l'observable obtenu par la réaction $\alpha \rightarrow \alpha'$ ne contient pas forcément la même information physique que celui obtenu par la réaction $\alpha' \rightarrow \alpha$. De ce point de vue, en inversant les données, nous pensons qu'il existe un risque de mauvaise modélisation d'une réaction nucléaire à partir d'une information erronée obtenue de la part de sa réaction réciproque.

II.3 Justification du choix du système composé $^{17}\text{O}^*$ pour application

L'oxygène possède une grande importance dans l'exploitation des réacteurs nucléaires. Il est présent dans les combustibles oxydes usuels (le dioxyde d'uranium UO_2 , les oxydes mixtes $\text{UO}_2\text{-PuO}_2$). L'oxygène intervient aussi dans la thermalisation des neutrons à travers l'eau utilisée comme modérateur. Il est également présent dans l'eau qui sert de fluide caloporteur (l'eau simple H_2O utilisée par les réacteurs à eau légère et l'eau lourde D_2O utilisée par les réacteurs à eau lourde). Le Tableau II.3.1 est un récapitulatif des caractéristiques des six familles de réacteurs de type génération II encore en activité en 2005 par rapport au combustible, au modérateur et au fluide caloporteur utilisés.

Types de réacteurs	PWR	BWR	GCR	PHWR	RBMK (Russe)	FBR ²
Combustible	UO ₂ enrichi	UO ₂ enrichi	U naturel, UO ₂ enrichi	UO ₂ enrichi	UO ₂ enrichi	UO ₂ – PuO ₂
Modérateur	H ₂ O	H ₂ O	Graphite	D ₂ O	Graphite	-
Caloporteur	H ₂ O	H ₂ O	CO ₂	D ₂ O	H ₂ O	Sodium liquide
Pays	USA, France, Japon, Russie	USA, Japon, Suède	Royaume Uni	Canada	Russie	Japon, France, Russie

TABLE II.3.1 – Récapitulatif de la présence de l’oxygène suivant le type du réacteur (Source : Réacteurs type génération II encore en exploitation en 2005 [42]).

Dans la plupart des six réacteurs de génération IV sélectionnés par GIF *Generation IV International Forum*, l’oxygène est également présent. Il intervient soit dans les combustibles, soit dans le fluide caloporteur ou dans le modérateur. Le récapitulatif fourni dans le Tableau II.3.2 montre les différents endroits où intervient l’oxygène dans chacun de ces types de réacteurs.

Types de réacteurs	SFR	VHTR	GFR	LFR	MSR	SCWR
Modérateur	-	Graphite	-	-	Graphite si spectre thermique	H ₂ O ou D ₂ O pour le spectre thermique
Caloporteur	Sodium liquide	Hélium gaz	Hélium gaz	Plomb ou LBE liquide	Sel liquide (qui est aussi le combustible)	H ₂ O dans l’état supercritique
Combustible (composé chimique)	Oxyde Métal	Oxycarbure Oxyde	Nitrure Carbure	Oxyde Nitrure Carbure	Fluorures	Oxyde

TABLE II.3.2 – Récapitulatif de la présence de l’oxygène suivant le type du réacteur dans les réacteurs de génération IV (Source : Principales caractéristiques des réacteurs de génération IV sélectionnés par le GIF [43])

2. En France, on désigne nommément le réacteur Phénix.

II.3.1 La réaction $^{16}\text{O}(\text{n}, \alpha)^{13}\text{C}$; enjeu de la sûreté des réacteurs

Par sa présence, l'oxygène constitue un enjeu dans la sûreté des réacteurs. En effet, il contribue à hauteur de 25% à la quantité d'hélium totale produite dans le combustible $\text{UO}_2\text{-PuO}_2$ en fin d'irradiation dans un réacteur à eau légère (REL) par la réaction $^{16}\text{O}(\text{n}, \alpha)^{13}\text{C}$ [44]. L'abondance naturelle de l'isotope ^{16}O est de 99.762001 % (base de données RIPL3 [45]). Les autres sources d'hélium sont [44] les fissions ternaires (7%) et la décroissance des actinides mineurs (68%) dont les contributions proviennent de la décroissance du Plutonium-238 (4%), du Césium-244 (21%) et du Césium-242 (75%). Il est connu maintenant que la présence des bulles de gaz dans le combustible altère les propriétés mécaniques des surfaces de revêtement (gainnes) des crayons du combustible. Cela empêche un parfait échange de chaleur entre le combustible et le caloporteur. La présence des bulles de gaz dans les gainnes du combustible peut aussi conduire à leur éclatement. En plus de l'hélium produit dans le combustible, une partie du gaz hélium qui fragilise les gainnes de revêtement des crayons du combustible provient du liquide caloporteur [46].

II.3.2 ^{16}O , un enjeu dans les calculs de criticité des réacteurs

Le calcul de sensibilité au k_{eff} de la réaction $^{16}\text{O}(\text{n}, \alpha)^{13}\text{C}$ intégrée ($E > 3\text{MeV}$) montre un coefficient de sensibilité ($\frac{dk}{k} / \frac{d\sigma}{\sigma}$) de l'ordre de -3 pcm par pour cent pour un réacteur à eau légère [47]. Pour le réacteur rapide, tel Phénix (600 Mwt), ce coefficient varie de -0.03 à -2.12 pcm par pour cent.

II.3.3 La structure nucléaire de l' ^{17}O

L'isotope ^{17}O a l'avantage d'avoir une densité de niveaux faible. En conséquence, son domaine de résonances résolues (RRR) est très étendu. Dans le travail d'évaluation de l' ^{16}O de L. C. Leal [38], il couvre le domaine 0-6 MeV ; l'énergie supérieure était choisie de façon à rester en dessous du seuil du premier état inélastique neutronique (premier état à 6.049 MeV). De plus, deux mesures de réactions réciproques, la réaction $^{16}\text{O}(\text{n}, \alpha)^{13}\text{C}$ et la réaction $^{16}\text{O}(\alpha, \text{n})^{13}\text{C}$, sont accessibles dans cet intervalle en plus des réactions de capture et de diffusion élastique. Cela en fait un candidat idéal pour étudier la question complexe de l'inversion de données. En dessous du seuil d'émission du neutron, l'isotope possède uniquement trois états liés bien connus. Cela permet d'amorcer une étude de son domaine thermique en s'efforçant de garder une cohérence entre les bases de données en provenance de différentes disciplines de la Physique (par exemple, la base de données de la Physique des réacteurs [38] et celle de l'Astrophysique [16]). En effet,

la comparaison des deux bases met en évidence des informations complémentaires en dessous du S_n qui prêtent à discussion.

$E_x(\text{eV})$	J^π	Base d'Astrophysique [16]		Base de la phys. des réacteurs [38]	
		$\tau_{1/2}$	$\gamma_{\gamma,\text{tot}}(\sqrt{eV})$	$\gamma_{\gamma,\text{tot}}(\sqrt{eV})$	$\gamma_n(\sqrt{eV})$
8.70e+05	1/2+	258.6 ps	7.97e-04	2.90e-01	1070.67
3.05e+06	1/2-	120 fs	3.70e-02	3.65e-01	177.55
3.84e+06	5/2-	≤ 25 fs	$\geq 8.11\text{e-}02$	3.97e-01	885.14

TABLE II.3.3 – Comparaison entre les paramètres des états liés provenant des bases d'Astrophysique et de Physique des réacteurs en utilisant le référentiel unifié.

Dans le Tableau II.3.3, nous observons, d'une part, l'absence d'une largeur neutron dans la base d'Astrophysique. Comme conséquence, la largeur totale (Γ_{tot}) est égale à la largeur totale des voies de désexcitation radiatives $\Gamma_{\gamma,\text{tot}}$, inversement proportionnelle au temps de demi-vie de l'état excité ($\Gamma \approx \frac{\hbar}{2\tau_{1/2}}$). D'autre part, nous observons dans la base de la Physique des réacteurs une largeur neutron assez grande servant à reproduire correctement la section efficace à l'énergie thermique du neutron. En effet, la queue des résonances négatives est observée à l'énergie thermique, suggérant la présence de la largeur neutronique aux états liés. Toutefois, puisque le facteur de pénétrabilité sous S_n est nul dans le référentiel du laboratoire et au regard de la relation (II.2.10), la tabulation de l'amplitude réduite γ_n , comme suggéré par F. Fröhner and O. Bouland [25], est définitivement significative pour les états liés.

II.3.4 Evolution en dents de scie de l'évaluation neutronique de l' ^{16}O et écarts de normalisation entre bases de données évaluées et expérimentales

Depuis 2005, des discussions autour de l'évaluation neutronique de l' ^{16}O ont été mises en place au sein d'un groupe de travail du WPEC. Dans ce cadre, des écarts entre évaluations existantes (ENDF/B-VI.8, JEFF-3.0 pour la valeur haute et JENDL-3.3 pour la valeur basse) sur la section efficace $^{16}\text{O}(n, \alpha)$ avaient été relevés (voir le rapport du sous-groupe 22, WPEC-SG 22 [48]). Ces écarts ont aussi été observés sur les mesures expérimentales. Dans le but d'apporter une réponse à ce problème, une demande pour inscrire la section efficace de la réaction $^{16}\text{O}(n, \alpha)$ sur la liste des priorités (HPRL-*High Priority Request List*) [47] du groupe de travail WPEC a été effectuée.

Par la suite, la valeur basse a été adoptée dans les évaluations ENDF/B-VII.0 et JEFF-3.1.1. Les changements sur la section efficace $^{16}\text{O}(n, \alpha_0)$ ont été intégrés

dans JEFF-3.1.1 par G. Noguère et ont conduit à une diminution de cette section efficace de 20% [49]. Les discussions se sont poursuivies dans le cadre du projet CIELO (*Collaborative International Evaluation Library Organisation*) [50] piloté par le sous-groupe 40 (WPEC-SG 40), entre 2013 -2016, et ont abouti à la révision de la section efficace thermique $^{16}\text{O}(n, n)$ de -3% et de la section efficace $^{16}\text{O}(n, \alpha)$ de +40%. Le projet CIELO n'a pas permis de trouver un parfait consensus entre évaluations sur les données de l' ^{16}O . En effet, deux tendances se sont dégagées en ce qui concerne l'évaluation de la section efficace $^{16}\text{O}(n, \alpha)$. La valeur haute (+ 40 %) a été adoptée par CIELO-1 [50] (i.e. : évaluation de la partie résonnante effectuée par LANL/ JRC-Geel [51]) et les modifications sont incluses dans le fichier ENDF/B-VIII.0. Le groupe CIELO-2 (i.e. : évaluation de la partie résonnante effectuée par IRSN/JRC-Geel [51]) a fourni deux propositions à étudier [50]. Comme montré sur Fig. II.3.1, la section efficace résonnante $^{16}\text{O}(n, \alpha)$ de l'évaluation JEFF-3.3 suit toujours la tendance basse. Le projet CIELO a recommandé de nouvelles expériences plus précises pour résoudre ces différences [50, 51]. Fig. II.3.1 montre l'évolution de l'évaluation de la section efficace $^{16}\text{O}(n, \alpha)$ dans la bibliothèque européenne JEFF et la bibliothèque américaine ENDF/B. Sur cette figure, le détail montre que du côté de la bibliothèque JEFF seule la version JEFF-3.0 suit la tendance à la valeur haute. Les versions allant de JEFF-3.1.1 à JEFF-3.3 suivent la tendance à la valeur basse. Du côté de la bibliothèque ENDF/B, la tendance à la valeur haute est observée pour les versions ENDF/B-VI.8 et ENDF/B-VIII.0 et la tendance à la valeur basse pour les versions ENDF/B-VII.0 et ENDF/B-VII.1.

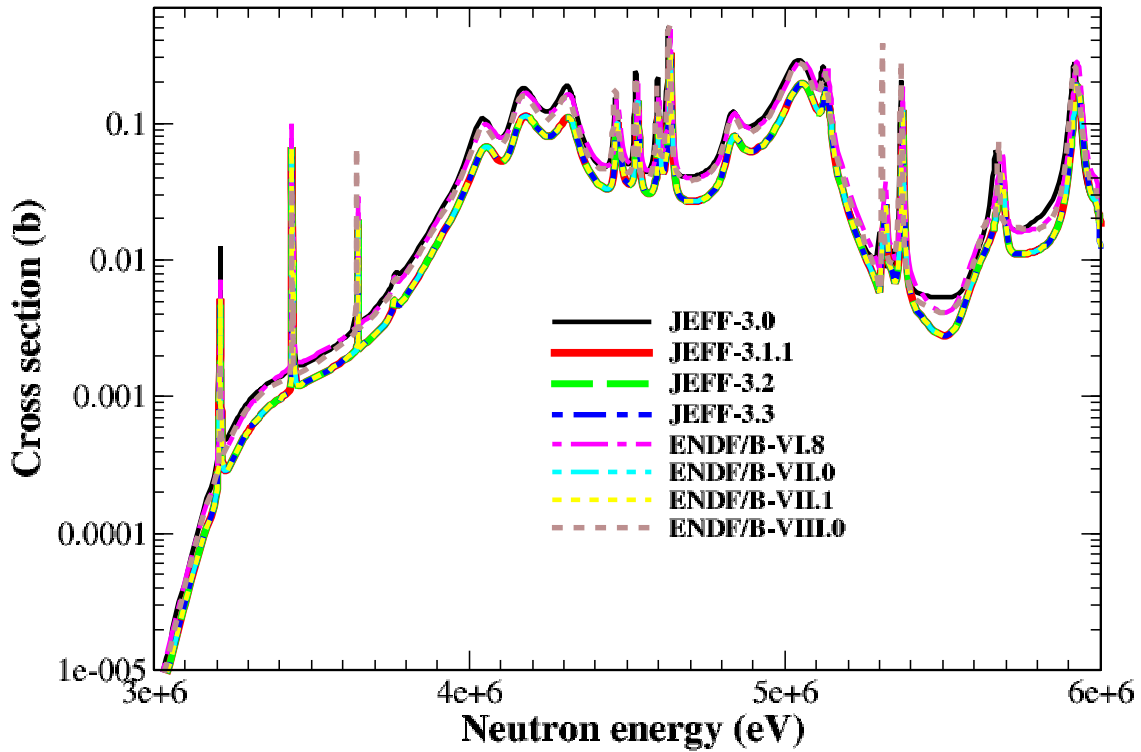


FIGURE II.3.1 – Evolution de l'évaluation de la section efficace $^{16}\text{O}(n, \alpha)$ dans les bibliothèques d'évaluation ENDF/B et JEFF. Les données sont extraites de la base JANIS [52].

Notons également que des différences entre les deux évaluations sont observées sur les sections efficaces totale $^{16}\text{O}(n, \text{tot})$, de diffusion élastique $^{16}\text{O}(n, n)$ et de capture $^{16}\text{O}(n, \gamma)$. Par exemple, les valeurs de ces dernières à l'énergie thermique ($E = 0,0253$ eV) sont respectivement $\sigma_{\text{tot}} = 3,852$ barns, $\sigma_{\text{él}} = 3,8518$ barns et $\sigma_{\text{capt}} = 1,9 \times 10^{-4}$ barns pour le fichier JEFF-3.3. Elles sont de $\sigma_{\text{tot}} = 3,794$ barns, $\sigma_{\text{él}} = 3,7939$ barns et $\sigma_{\text{capt}} = 1,698 \times 10^{-4}$ barns pour le fichier ENDF/B-VIII.0.

II.3.5 Importance du système $^{17}\text{O}^*$ comme source de neutrons au sein du processus s dans le domaine d'Astrophysique

Le processus s (de l'anglais, *slow*) est un des processus par lesquels sont formés les éléments lourds (au dessus de la masse du Fe) dans les étoiles par une succession de captures neutroniques et de désintégration β^- . Il tire son nom du fait qu'il est lent par comparaison au processus rapide r (de l'anglais, *rapid*). La réaction $^{13}\text{C}(\alpha, n)^{16}\text{O}$ constitue la principale source de neutrons au côté de la réaction $^{22}\text{Ne}(\alpha, n)^{25}\text{Mg}$. Dans la région des étoiles de masses faibles et intermédiaires (AGB, *Asymptotic Giant Branch* stars, $M \leq 10M_{\odot}$, $M_{\odot}$ étant la masse du soleil), le processus s est

responsable de la synthèse des éléments dont les masses sont principalement dans l'intervalle de $90 < A < 140$. Dans la région des étoiles plus lourdes ($M \geq 10M_{\odot}$), le processus s produit des éléments de masses beaucoup plus faibles, de l'intervalle de $70 < A < 90$. Le ^{13}C est obtenu suite à la capture du proton par le ^{12}C suivant les réactions $^{12}\text{C}(p, \gamma)^{13}\text{N}(\beta^+)^{13}\text{C}$. La littérature étant très abondante à ce sujet, nous invitons le lecteur à consulter par exemple les références [53, 54, 55] pour plus de détails.

II.4 Conclusion sur le chapitre

Dans ce chapitre, nous avons présenté une approche innovante dans la modélisation/analyse de sections efficaces des réactions nucléaires. Cette approche se démarque des méthodes classiques par le fait que la modélisation est effectuée dans un référentiel unifié. L'approche s'appuie sur le référentiel du centre de masse du système composé excité et non sur le référentiel du laboratoire du projectile (resp. éjectile) comme dans les méthodes classiques. La référence, prise habituellement à l'énergie d'émission du projectile (resp. éjectile) dans les méthodes classiques, devient dans la nouvelle approche l'énergie de l'état fondamental du système composé excité. Les paramètres des résonances habituellement exprimés dans le système du laboratoire du projectile (resp. éjectile) dans les méthodes classiques deviennent dans la nouvelle méthode des paramètres de structure nucléaire des états du système composé excité, exprimés dans le référentiel unifié du centre de masse de ce dernier. Les avantages de ce référentiel unifié ont été mis en évidence. La plus importante repose sur le caractère unificateur de la nouvelle méthode. Toutes les réactions qui partagent un même système composé sont modélisées avec des paramètres communs exprimés dans un même référentiel. Cela permet de les calculer de manière simultanée et cohérente, sans faire recours à l'inversion de données dans le cas de la disponibilité de réactions réciproques. Ainsi, la cohérence entre fichiers provenant de mesures sur des isotopes cibles différents mais qui partagent un même système composé est assurée et la comparaison directe entre fichiers de paramètres de différentes physiques (par ex. Physique des réacteurs vs Astrophysique) devient possible. De plus le système unifié est ouvert à la gestion d'observables nouvelles et complémentaires permettant de réduire par l'ajout d'informations l'incertitude sur les paramètres ajustés finaux.

Nous avons également présenté le cas choisi pour application, le système composé $^{17}\text{O}^*$. Dans le domaine de la Physique des réacteurs, l'évaluation des sections efficaces des réactions nucléaires est fortement dominée par la spectroscopie neutronique et le système $^{17}\text{O}^*$ est évalué suivant la voie d'entrée $n + ^{16}\text{O}$. Nous avons montré l'importance du système $n + ^{16}\text{O}$ dans l'exploitation des réacteurs du point de vue criticité et sûreté. La structure nucléaire de $^{17}\text{O}^*$ présente un domaine résonnant assez large dans lequel sont disponibles à l'observation deux réactions

réciproques : les réactions $^{16}\text{O}(\text{n}, \alpha)$ et $^{13}\text{C}(\alpha, \text{n})$. Le système $^{17}\text{O}^*$ permet ainsi l'étude de l'hypothèse de l'inversion de données souvent utilisée par les évaluations classiques en spectroscopie neutronique. Enfin, la réaction $^{13}\text{C}(\alpha, \text{n})$ constitue une source de neutron importante dans le domaine de l'Astrophysique. Sur un plan plus prospectif, la réaction $^{13}\text{C}(\alpha, \text{n})$ constitue une source intrinsèque de neutron pour les combustibles de quatrième génération à matrice $\text{UP}_u\text{A}_m\text{C}$ [56] comme nous le verrons par la suite au cours d'une petite application. Sur ce point de vue, le système composé $^{17}\text{O}^*$ constitue un bon exemple de la pertinence d'échange d'informations entre les domaines de la Physique des réacteurs et de l'Astrophysique.

Chapitre III

L'environnement contextuel à la thèse

III.1 Introduction

Les paramètres utilisés dans le cadre de la théorie de la matrice R sont les produits de travaux impliquant des codes d'évaluation, pour lesquels la physique associée aux modèles et les outils d'analyse de données sont déterminants, ainsi que la disponibilité des données expérimentales. Les données sous forme de paramètres, issues des codes d'évaluation sont ensuite traitées par les codes de "processing" dont le rôle est de transcrire l'information sous forme de bibliothèque d'application. Certains codes d'évaluation peuvent jouer à la fois les deux rôles (par exemple, le code CONRAD [57]). Au cours de cette thèse, nous avons utilisé largement les outils disponibles dans notre environnement de travail et les paramètres évalués particulièrement pendant le développement et la validation du module de calcul de sections efficaces TORA (*TOol for Reactions Analysis*) que nous avons construit presque d'une page blanche au cours de cette thèse. Les données expérimentales nous ont été également utiles pour la confrontation aux calculs théoriques. Toutefois, les données expérimentales du système composé $^{17}\text{O}^*$ (impliqué dans les réactions $n + ^{16}\text{O}$ et $\alpha + ^{13}\text{C}$) vont jouer un rôle primordial dans nos efforts d'ajustement de paramètres dans le cadre du référentiel unifié du CM présenté au chapitre II et à travers un couplage entre le module TORA et le code CONRAD. Les raisons du choix du système composé $^{17}\text{O}^*$ ont été expliquées au chapitre II. Dans ce chapitre, nous rappelons, de manière succincte, les outils que nous avons exploités au cours de la thèse.

III.2 Les codes de calcul pertinents

III.2.1 Le code CONRAD

Le code CONRAD (*C*ode for *N*uclear *R*reaction *A*nalysis and *D*ata *A*ssimilation)[57] est un code dont le développement a commencé en 2005 au Laboratoire d'Etudes de Physique (LEPh) du Centre du Commissariat à l'Energie Atomique et aux Energies Alternatives (CEA) de Cadarache. Il est écrit en langage orienté objet C++. Nous souhaitons souligner qu'au début de cette thèse, le code CONRAD était fortement rattaché à la spectroscopie neutronique. Par contre, la dernière version de CONRAD, révisée par P. Tamagno, traite sans discrimination les particules chargées et les particules neutres dans la voie d'entrée comme dans la voie de sortie. Dans cette thèse, nous avons exploité les capacités du code CONRAD à utiliser les calculs d'un code externe pour effectuer l'analyse de mesures expérimentales. Le but est de réaliser un ajustement de paramètres de résonance sur des mesures de sections efficaces dans le cadre du référentiel unifié du CM à travers un couplage entre le code CONRAD et le module externe TORA de calcul de sections efficaces. Ce module sera décrit au chapitre IV. Plusieurs outils contribuant à l'analyse de mesures sont disponibles à travers le code CONRAD : les méthodes mathématiques visant à transformer une quantité nucléaire en observable en situation expérimentale (Doppler, fonction de résolution en énergie) et les méthodes permettant de confronter l'observable théorique avec les données expérimentales. Dans cette section, nous présenterons de manière succincte la méthode des moindres carrés généralisée (GLS - *Generalized Least Square*), et le fonctionnement du code CONRAD en mode externe. Pour avoir une présentation beaucoup plus approfondie du code CONRAD, nous invitons le lecteur à consulter les références [57, 58, 59, 60, 61] et les thèses de P. Tamagno [21] et de P. Archier [6].

III.2.1.1 La méthode des moindres carrés généralisée du code CONRAD

Pour présenter la méthode des moindres carrés généralisée implémentée dans le code CONRAD, nous nous appuyons ici sur la description donnée par P. Archier dans les références [6, 60]. La fonction des moindres carrés généralisée implémentée dans CONRAD pour le cas de l'évaluation d'une section efficace par exemple se présente ainsi

$$\chi_{\text{GLS}}^2 = (\vec{\sigma}_{\text{exp}} - \vec{\sigma}_{\text{th}})^T \cdot (M_{\text{exp}})^{-1} \cdot (\vec{\sigma}_{\text{exp}} - \vec{\sigma}_{\text{th}}) + (\vec{x} - \vec{x}^{\text{prior}})^T \cdot (M_x^{\text{prior}})^{-1} (\vec{x} - \vec{x}^{\text{prior}}) \quad (\text{III.2.1})$$

Les ingrédients de la fonction χ_{GLS}^2 de la relation III.2.1 sont les suivants :

1. Le vecteur contenant les valeurs de la section efficace expérimentale $\vec{\sigma}_{\text{exp}}$;

2. Le vecteur contenant les valeurs de la section efficace théorique $\vec{\sigma}_{th}$;
3. Le vecteur contenant les valeurs des paramètres *a priori* $\vec{x}^{prior}$;
4. Le vecteur contenant les valeurs des paramètres *a posteriori* $\vec{x}$;
5. La matrice de covariance expérimentale M_{exp} ;
6. La matrice de covariance associée aux paramètres *a priori* M_x^{prior} .

Le but de l'ajustement est d'obtenir les paramètres ajustés (*a posteriori*) du modèle théorique qui reproduisent les données expérimentales le plus fidèlement possible. L'un des indices qui permettent de déterminer la justesse des paramètres obtenus *a posteriori* est le critère de convergence ϵ . Ce critère est un compromis entre la meilleure précision et un temps de calcul raisonnable. Dans CONRAD, le critère de convergence est appliqué ainsi

$$\left| \frac{\chi_{(n)}^2 - \chi_{(n-1)}^2}{\chi_{(n-1)}^2} \right| \leq \epsilon \quad (\text{III.2.2})$$

$\chi_{(n)}^2$ est la valeur du χ^2 à l'itération n et $\chi_{(n-1)}^2$ la valeur du χ^2 à l'itération $n-1$. Le critère de convergence est fixé librement par l'utilisateur (habituellement de l'ordre de 10^{-3}). Dans CONRAD, la méthode itérative de Gauss-Newton permet de résoudre l'équation III.2.1. Le vecteur des paramètres *a posteriori* à l'itération $n+1$ est donné par

$$\vec{x}^{(n+1)} = \vec{x}^{(n)} + M_x^{(n+1)} G_x^{(n)T} M_{exp}^{-1} [\vec{\sigma}_{exp} - \vec{\sigma}^{(n)} - G_x^{(n)} (\vec{x}^{prior} - \vec{x}^{(n)})] \quad (\text{III.2.3})$$

où $G_x^{(n)}$ est la matrice des dérivées de la $n^{\text{ième}}$ itération. La matrice de covariance associée aux paramètres *a posteriori* pour la $(n+1)^{\text{ième}}$ itération est

$$M_x^{(n+1)} = \left[(M_x^{prior})^{-1} + G_x^{(n)T} M_E^{-1} G_x^{(n)} \right] \quad (\text{III.2.4})$$

III.2.1.2 La gestion de flux de données en mode externe

Lors de l'analyse des données en mode externe, CONRAD attend du code externe la section efficace nucléaire calculée qu'il compare ensuite à la section efficace expérimentale après mise en condition expérimentale (Doppler, fonction de résolution). La comparaison de la section efficace calculée avec la section efficace mesurée est réalisée sur une grille énergétique établie à partir de la grille expérimentale. Concrètement, dans la relation III.2.1, le vecteur contenant les valeurs de la section efficace théorique $\vec{\sigma}_{th}$ provient du code externe. Il est calculé à partir des paramètres $\vec{x}$ (ou $\vec{x}^{prior}$ au début de l'ajustement) et de la grille fournie par le code CONRAD.

III.2.2 Le code SAMMY

Le code SAMMY est un code d'évaluation de données nucléaires développé depuis 1980 au laboratoire national d'Oak Ridge (ORNL-*Oak Ridge National Laboratory*). Le code était au début destiné à l'analyse de données « maison » provenant de l'accélérateur linéaire d'Oak Ridge. La version SAMMY-8 [62] disponible au moment de cette thèse comprend les différentes approximations de la théorie de la matrice R (Reich-Moore, MLBW, SLBW - option incorporée en 1984 [63]) dont le MLBW approprié pour les calculs de sections efficaces théoriques des noyaux légers et des sections efficaces à basse énergie des noyaux lourds fertiles. L'analyse de mesures est effectuée en combinant les techniques bayésiennes (GLS) et les méthodes mathématiques mettant en situation expérimentale les quantités nucléaires des mesures (Doppler, fonction de résolution). Le code SAMMY est depuis longtemps un code de référence dans les travaux d'évaluation de données nucléaires. Dans cette thèse, nous avons utilisé le code SAMMY pour une partie de la validation des sections efficaces calculées par le module TORA (voir chapitre IV). La référence [63] présente tous les modèles physiques et mathématiques de la version SAMMY-8 et constitue son manuel d'utilisation.

III.2.3 Le code NJOY

Le code NJOY a été développé essentiellement par R. E. MacFarlane [64] au laboratoire de Los Alamos (LANL-*Los Alamos National Laboratory*). C'est un code de traitement qui reconstruit les sections efficaces ponctuelles et multigroupes à partir des fichiers de format ENDF (fichiers ENDF-6) de bibliothèques de données évaluées. Il produit des bibliothèques d'application pour les codes déterministes et Monte Carlo du transport des neutrons dans les cœurs de réacteurs. Le code NJOY est constitué de modules dédiés aux différentes tâches. Nous retiendrons les modules utiles pour ces travaux de thèse : RECONR, BROADR, UNRESR, THERMR, GROUPE. La fonction et l'utilisation de chacun de ces modules sont largement documentées dans la référence [64]. Au cours de cette thèse, nous avons eu souvent recours au code NJOY pour reconstruire des sections efficaces dans le domaine RRR à partir d'une bibliothèque évaluée (JEFF, ENDF/B, JENDL, etc.). Dans le domaine RRR, les modules nécessaires pour reconstruire les sections efficaces à n'importe quelle température sont les modules RECONR et BROADR. Le module RECONR reconstruit les sections efficaces ponctuelles dépendantes de l'énergie à partir des paramètres de résonance tabulés. Le module BROADR corrige de l'effet Doppler les sections efficaces nucléaires. La combinaison donc de RECONR et BROADR permet d'obtenir les sections efficaces ponctuelles à la température de l'expérience.

III.2.4 Le code TALYS

Le code TALYS est le fruit d'une collaboration entre le NRG (*Nuclear Research and Consultancy Group*) de Petten et le CEA (*Commissariat à l'Energie Atomique et aux Energies Alternatives*) de Bruyères-le-Chatel. Il est dédié à la prédiction des réactions nucléaires [18]. Il est capable de traiter les réactions avec une gamme de projectiles couvrant les neutrons, les photons, les protons, les deutons, les tritons, ^3He and ^4He . Les cibles visées sont de masse $A > 12$ (la version actuelle, TALYS 1.9, peut traiter les cibles de masse $12 < A < 339$) et la gamme d'énergie couverte va de 1 keV à 200 MeV. Les observables produites par TALYS sont entre autres les sections efficaces totales et partielles, les sections efficaces différentielles en angle et double-différentielles avec l'angle et l'énergie de la particule diffusée, etc. La force du code TALYS est d'incorporer de manière systématique dans la section efficace générée à une énergie donnée, les composantes en provenance de toutes les phénomènes physiques de l'interaction nucléaire : les réactions directes, les réactions de pré-équilibre et les réactions du noyau composé. Les sections efficaces produites par le code TALYS sont normalisées sur un calcul ECIS-06 [65] de modèle optique sphérique ou à voies couplées. Le code TALYS est le code générateur des données évaluées de la bibliothèque TENDL (TALYS-based Evaluated Nuclear Data Library) en format ENDF-6. Dans cette thèse, nous avons utilisé le code TALYS pour calculer les éléments de la matrice S (voir chapitre V) qui nous ont permis d'estimer les sections efficaces de diffusion élastique potentielle par moment angulaire orbital ℓ .

III.3 Bases de données expérimentales préalables aux études

III.3.1 Le système en interaction ($n + ^{16}\text{O}$)

III.3.1.1 La section efficace totale

Les données expérimentales de M. Ohkubo Ces données ont été produites en 1986 par M. Ohkubo [66] auprès de l'accélérateur linéaire de l'Agence Japonaise de l'Energie Atomique (JAEA - *Japan Atomic Energy Agency*) [67]. La technique de temps du vol (TOF) a été utilisée pour l'acquisition du spectre énergétique des neutrons produits par une source de Tantale [neutrons produits suivant la réaction $^{181}\text{Ta}(\gamma, n)$] refroidie à l'eau et ralentis par un modérateur entourant la cible. La distance parcourue par les neutrons de la source à l'échantillon est de 47 m. Deux échantillons d'oxyde d'aluminium (Al_2O_3) ont été analysés : le premier échantillon a une densité de (aluminium 0.0436 at/b, oxygène 0.0654 at/b) et le second a une densité de (aluminium 0.178 at/b, oxygène 0.267 at/b). La section efficace totale de l'oxygène est obtenue par soustraction de la section efficace totale d'aluminium (échantillon de 0.637 at/b en dessous de 32 keV, échantillon de 0.198

at/b ailleurs) de l'échantillon Al_2O_3 . Dans EXFOR (N°21926002), les données tabulées vont de 0,79071 keV à 934,66 keV. Ces données couvrent la première résonance de l'oxygène-16 à l'énergie $E_\lambda = 434,1$ keV [38]. La valeur originale de l'énergie au pic de la résonance fournit par l'auteur est de 432 ± 3 keV mais est corrigée dans la base EXFOR (428,66 keV). Les valeurs de la section efficace au pic de cette résonance sont ainsi de 14,2 b (valeur originale déclarée par l'auteur, échantillon épais), 14,11 b (EXFOR), 16,55 b (JEFF-3.3, $E = 435,0$ keV) et 16,52 b (ENDF/B-VIII.0, $E = 434,0$ keV). Au pic de la résonance, la valeur de la section efficace expérimentale est donc basse par rapport aux évaluations. La section efficace originale est soupçonnée d'être contaminée par de l'hydrogène provenant de la contamination de l'échantillon d'oxyde d'aluminium (Al_2O_3) par de la moisissure. L'auteur a recommandé de corriger sa valeur en lui soustrayant la valeur de la section efficace de l'hydrogène avec dépendance en énergie multipliée par un facteur de contamination de 0,005. Cette recommandation est intégrée dans EXFOR.

Les données expérimentales de F. G. Perey et al Les données expérimentales de F. G. Perey et al [68] ont été aussi obtenues par la technique de temps de vol (TOF) auprès de l'accélérateur linéaire ORELA (*Oak Ridge Electron Linear Accelerator*). La distance parcourue par les neutrons entre la source [cible de Tantale refroidie à l'eau et entourée par le béryllium, neutrons produits par des réactions photonucléaires (γ, n) dans la cible] et l'échantillon est de 47,35 m. L'échantillon étudié est un cylindre de SiO_2 dont l'épaisseur (densité en molécules de SiO_2) est de 0,3247 molécules/b, ce qui revient à une densité en atomes d'oxygène de 0,6494 at/b. Pour mesurer la transmission par l'oxygène, un disque extérieur de silicium d'épaisseur (densité en atomes de silicium) de 0,3226 at/b a été utilisé. Les données de cette mesure disponibles dans la base EXFOR (N°10377003) nous ont intéressés car elles couvrent un large spectre (187,38 keV- 49 MeV) y compris, comme pour les données d'Ohkubo (paragraphe III.3.1.1), la résonance de plus basse énergie (≈ 434 keV). Le point négatif de ces données est qu'elles intègrent des incertitudes larges (par exemple en $E = 0,18823$ MeV, l'incertitude statistique est de $\Delta\sigma_{\text{tot}} = 1,886$ b soit 1520% de la valeur de la section efficace). De plus, entre 187,38 keV et 220 keV, une plage d'énergie hors résonance, il y a apparemment un problème de normalisation (la section efficace varie entre 0,12 b et 6 b). Par contre, la mesure présente une très bonne statistique pour les résonances à ≈ 997 keV et $\approx 1,312$ MeV. Les ailes de la résonance inversée ("window") à $\approx 2,35$ MeV sont bien décrites par ces données mais pour le fond du puit de la résonance, ces données ne présentent pas une bonne statistique.

Les données expérimentales de Cierjacks Les données présentées dans ce paragraphe ont été mesurées par S. Cierjacks [69] en 1980 auprès du cyclotron isochrone du KIT (*Karlsruhe Institute of Technology*). L'acquisition du spectre en énergie des neutrons a été réalisée par technique de temps de vol. La distance de vol est de $189,252 \pm 0,0009$ m. Les neutrons sont produits par la réaction $\text{U}(d, xn)$

sur une cible d'uranium naturel et sont détectés par un scintillateur plastique. La section efficace de l'oxygène est obtenue à partir de mesures de transmission effectuées sur un échantillon d'eau liquide dont l'épaisseur est de 1.201 at/b. Les données disponibles dans EXFOR (N°20742003) couvrent une plage d'énergie allant de 3,1367 à 32 MeV. Ces données présentent une très bonne statistique dans la région d'intérêt pour cette thèse (plus de 9 mille points en-dessous de 6 MeV). Elles sont en bon accord avec la récente évaluation, CIELO-2 [38].

Les données expérimentales de D.C. Larson et *al.* Ces données ont été mesurées par D. C. Larson et *al.* en 1979 [70] auprès de l'accélérateur linéaire ORELA du laboratoire nationale d'Oak Ridge (ORNL - *Oak Ridge National Laboratory*). Le spectre en énergie des neutrons a été obtenu par technique de temps de vol. La distance de vol est de 80 m. Les données disponibles dans EXFOR (N°12882004) couvrent une plage d'énergie de 6 MeV à 69 MeV. Ces données reproduisent bien les flancs de la fenêtre à $\approx 2,35$ MeV et leur normalisation est en adéquation avec l'évaluation de L. C. Leal et *al.* [38]. Toutefois, elles ne présentent pas une bonne statistique comparé aux données de Cierjacks (paragraphe III.3.1.1).

Les données expérimentales de Fowler et *al.* Les données présentées ici ont été mesurées par Fowler et *al.* [71] auprès de l'accélérateur Van de Graaf du laboratoire nationale d'Oak Ridge (ORNL Van de Graaf) en 1971. Deux jeux de données existent dans la base EXFOR suivant les deux sources de neutrons utilisées : une source d' ^3H , neutrons obtenus par la réaction $^3\text{H}(p, n)$ et une source de ^7Li , neutrons obtenus par la réaction $^7\text{Li}(p, n)$. Les neutrons étaient détectés par un scintillateur de cristal de stilbène. La section efficace totale de l'oxygène est déduite de deux différentes transmissions mesurées : le premier échantillon est un échantillon d'oxyde de Béryllium et le second un échantillon de Béryllium, tous les deux d'épaisseur de 0,3194 at/b. Les données disponibles dans EXFOR (N°10137007 et N°10137005) couvrent la plage d'énergie de 1,8 à 4,3 MeV pour la source d' ^3H et la plage d'énergie de 0,6 MeV à 4,3 MeV pour la source de ^7Li . Les données de la source de ^7Li comportent peu de points dans la région des résonances à $\approx 0,997$ MeV et $\approx 1,312$ MeV et ces deux résonances sont absentes. Ces données présentent par contre une meilleur statistique que celles de la source d' ^3H . Elles mettent également en évidence les résonances d'énergies $\approx 1,7$ MeV, $\approx 2,9$ MeV et ≈ 3 MeV qui n'apparaissent pas sur la plupart des données présentées dans cette rubrique. Les données de la source d' ^3H , quant à elles, ne sont pas bien résolues. Elles ont été utilisées pour déterminer la normalisation des données de la source de ^7Li . Ces dernières couvrent mal le domaine de la résonance à $\approx 2,35$ MeV.

Les données expérimentales de Y. Danon Plus récentes, dans l'impulsion du projet CIELO, les données de Y. Danon [72] ont été mesurées en 2015 auprès de l'accélérateur linéaire du RPI (*Rensselaer Polytechnic Institute*). La technique

de temps de vol a été utilisée pour déterminer le spectre en énergie des neutrons. La distance de vol est de 250 m. L'expérience a été effectuée sur deux échantillons d'eau liquide d'épaisseurs respectives de 2 cm et de 5 cm. La section efficace de l'oxygène a été obtenue en soustrayant la section efficace évaluée (ENDF/B-VII.1) de l'hydrogène des mesures de transmission de l'eau. Les données de Y. Danon ne sont pas encore disponibles dans la base de données EXFOR. Pour les utiliser, nous avons donc numérisé le profil des deux expériences à partir des graphes disponibles dans la littérature [72]. Les données présentées dans la référence [72] sont entre autres en bon accord, pour les deux échantillons, avec les données évaluées (ENDF/B-VII.1), l'évaluation de L. C. Leal [38] et les données expérimentales de Cierjacks 1980 (paragraphe III.3.1.1) après normalisation respective de 0.988, 1.004 et 0.968.

III.3.1.2 La section efficace $^{16}\text{O}(n, \alpha)^{13}\text{C}$ de G. Giorginis et *al.*

Les données de la section efficace de la réaction $^{16}\text{O}(n, \alpha)$ ont été mesurées par G. Giorginis et *al.*[73] en 2008 en utilisant un spectromètre à cible gazeuse développé à l'IRMM (*Institute for Reference Materials and Measurements*). La section efficace de la réaction $^{16}\text{O}(n, \alpha)$ était obtenue pour un échantillon de gaz constitué de 97% de Krypton et de 3% de CO_2 . Deux sources de neutrons ont été utilisées :

1. Les neutrons d'énergie inférieure à 4,4 MeV étaient produits par une source de TiT solide suivant la réaction $\text{T}(p, n)^3\text{He}$. L'épaisseur de la cible de TiT était de $214 \mu\text{g}/\text{cm}^2$.
2. Les neutrons d'énergie supérieure 4,96 MeV ont été produits par une source gazeuse en deutérium suivant la réaction $\text{D}(d, n)^3\text{He}$.

A l'origine, deux jeux de données de la section efficace $^{16}\text{O}(n, \alpha)$ ont été présentés [73] : le premier, qui couvre la plage d'énergie allant de 3,8 à 4,5 MeV, est obtenu avec l'utilisation de la source de neutrons $\text{T}(p, n)^3\text{He}$ et le second qui couvre la plage d'énergie allant de 4,8 à 9,2 MeV est obtenu par l'utilisation de la source $\text{D}(d, n)^3\text{He}$. Actuellement, quatre jeux de données existent dans la base EXFOR après la révision de ces données par l'auteur, dans le cadre du projet CIELO [50] :

1. Un jeu qui couvre la plage d'énergie de 3,950 à 4,400 MeV, source de neutrons : $\text{T}(p, n)^3\text{He}$, 19 points, EXFOR N°23040002 ;
2. Un jeu qui couvre la plage d'énergie de 3,900 à 5,200 MeV, source de neutrons : $\text{T}(p, n)^3\text{He}$, 30 points, EXFOR N°23040003 ;
3. Un jeu qui couvre la plage d'énergie de 3,900 à 5,200 MeV, source de neutrons : $\text{T}(p, n)^3\text{He}$, 28 points, EXFOR N°23040004 ;
4. Un jeu qui couvre la plage d'énergie de 4,96 à 9 MeV, source de neutrons : $\text{D}(d, n)^3\text{He}$, 55 points, EXFOR N°23040005.

Ces données ont l'avantage d'être accompagnées par une documentation concise des incertitudes qui leur sont associées et leurs origines. Par contre, la faible statistique handicape la lisibilité des résonances fines.

III.3.1.3 La section efficace $^{16}\text{O}(\text{n}, \text{n})$

Plusieurs jeux de données expérimentales différentielles angulaires sont disponibles pour évaluer la section efficace de diffusion élastique $^{16}\text{O}(\text{n}, \text{n})$. On peut citer par exemple les Refs. de [74, 75, 76, 77, 78, 79, 80, 81]. Certains ont été exploités pour la base expérimentale de l'évaluation de L. C. Leal et *al.* [82] (ex : [74]) et d'autres pour l'évaluation de R. O. Sayer et *al.* [12]. Les données intégrées angulairement de ce type de section efficace sont plutôt rares, dans la base EXFOR, on peut citer par exemple les données de la référence [81] (EXFOR N°10276022) ainsi que la valeur thermique recommandée par S. F. Mughabghab [83].

Les données expérimentales de Lister et Sayers Les données expérimentales de la section efficace de diffusion élastique $^{16}\text{O}(\text{n}, \text{n})$ de D. Lister et A. Sayers [74] sont constituées de mesures de distribution angulaire qui ont été réalisées auprès de l'accélérateur VdG de l'Université de Columbia. Les neutrons étaient issus d'une source de tritium par la réaction $\text{T}(\text{p}, \text{n})^3\text{He}$. Les protons sont issus de l'accélérateur Van de Graaff. L'énergie des neutrons est déduite de l'énergie des noyaux de recul. Les mesures de la section efficace de diffusion élastique $^{16}\text{O}(\text{n}, \text{n})$ ont été effectuées sur un échantillon contenant un gaz de CO_2 . Les données présentées par l'auteur sont sous forme de coefficients de polynômes de Legendre. Le degré des polynômes de Legendre va de 0 à 6. La mesure publiée dans la référence [74] et attachée dans la base de données EXFOR (N°11334004) contient : 70 points avec une résolution énergétique de 25 keV et 58 points avec une résolution énergétique de 18 keV.

Les données expérimentales de Okazaki Les données expérimentales de diffusion élastique $^{16}\text{O}(\text{n}, \text{n})$ de A. Okazaki [75] ont été mesurées sur un échantillon d' O_2 . Les neutrons étaient fournis par une source lithium par la réaction $\text{Li}(\text{p}, \text{n})$. Les données disponibles dans la base EXFOR sont pour 4 points d'énergies : 0.41 MeV, 0.438 MeV, 0.465 MeV et 0.493 MeV. Ces données ont été mesurées aux angles suivants (en cosinus, dans le CM) : 0.7, 0.34, 0.00, -0.50, -0.68 pour les deux premiers points et 0.7, 0.34, 0.00, -0.50 pour les deux derniers points.

Les données expérimentales de Fowler et Cohn Les mesures de la section efficace de diffusion élastique différentielle angulaire $^{16}\text{O}(\text{n}, \text{n})$ de J. L. Fowler et H. O. Cohn [77] ont été obtenues par diffusion des neutrons sur un échantillon d' O_2 . Les neutrons étaient détectés par un compteur proportionnel. Deux jeux de données sont disponibles dans la base de données EXFOR. Le premier jeu (EXFOR N°11401002) est constitué de deux points en énergie : 1 MeV et 1.21 MeV. Les angles représentés pour ce jeu sont (en cosinus, dans le CM) : -0.75, -0.6, -0.39,

-0.2, -0.01, 0.17, 0.36, 0.55, 0.73, 0.84 pour la première énergie et -0.75, -0.6, -0.39, -0.18, 0.00, 0.18, 0.36, 0.54, 0.73, 0.85 pour la seconde. Le deuxième jeu (EXFOR N°11401003) comporte 4 points en énergie : 0.730 MeV, 1.50 MeV, 1.75 MeV et 2.15 MeV. Les angles représentés pour ces quatre points sont respectivement (en cosinus, dans le CM) : 0.86, 0.73, 0.57, 0.57, 0.18, -0.01, -0.20, -0.40, -0.60, -0.76 pour le premier point, 0.84, 0.75, 0.55, 0.36, 0.17, -0.01, -0.19, -0.39, -0.60, -0.73 pour le second point, 0.85, 0.75, 0.56, 0.36, 0.17, -0.01, -0.19, -0.40, -0.59, -0.74 pour le troisième point et 0.86, 0.75, 0.56, 0.37, 0.18, -0.01, -0.20, -0.39, -0.59, -0.74 pour le quatrième point.

Les données expérimentales de Drigo et al. Les données de la section efficace différentielle de diffusion élastique présentées ici ont été mesurées auprès de l'accélérateur VdG du *Laboratori Nazionali di Legnaro* par L. Drigo et al. [78]. Les neutrons utilisés comme projectiles étaient obtenus en exploitant trois sources de neutrons polarisés constituées respectivement par les cibles de Lithium-7 solide, Carbon-12 solide et de Deuterium gazeux. Ainsi, les neutrons étaient produits suivant les réactions : ${}^7\text{Li}(p, n)$, ${}^{12}\text{C}(d, n)$ et ${}^2\text{H}(d, n)$. L'énergie des neutrons utilisés comme projectiles était obtenue par technique de temps de vol. La section efficace de diffusion élastique différentielle a été mesurée avec un échantillon d'O₂ liquide. Les neutrons diffusés étaient détectés par 14 scintillateurs liquides. EXFOR (N°20751002) contient deux points en énergies : à 2,56 MeV et 2,76 MeV. Sept angles sont couverts pour ces deux points (en degrés, référentiel du laboratoire) : 25, 45, 65, 90, 115, 135 et 155.

Les données expérimentales de Johnson et Fowler Les données expérimentales de la section efficace de diffusion élastique différentielle de C. H. Johnson et J. L. Fowler [79] ont été mesurées auprès de l'accélérateur tandem VdG du laboratoire nationale d'Oak Ridge (ORNL - *Oak Ridge National Laboratory*). La source de neutrons était constituée par une cible de zirconium-tritium bombardée par les protons fournis par l'accélérateur. $\sigma_{(n,n)}^{16\text{O}}(E, \theta)$ a été mesurée avec un échantillon d'oxyde de béryllium. Les neutrons diffusés étaient détectés par des détecteurs scintillateurs cristaux au stilbène. Les données disponibles dans EXFOR (N°11419002) couvrent quatorze points en énergies : 3.266 MeV à 4.200 MeV. Une dizaine d'angles (tabulés sous forme de cosinus dans le référentiel du CM) sont couverts pour chacun des 14 points.

Les données expérimentales de Fowler et Johnson Les données expérimentales de la section efficace neutronique de diffusion élastique différentielle en angle ${}^{16}\text{O}(n, n)$ de Fowler et Johnson [80] ont été mesurées auprès de l'accélérateur VdG d'ORNL. La source de neutron provenait de la réaction ${}^7\text{Li}(p, n)$. Un échantillon d'O₂ liquide a été utilisé. Les neutrons diffusés étaient détectés par un scintillateur de stilbène. Les mesures disponibles dans la base de données EXFOR (N°10028002) couvrent quatre points en énergies : 1.833, 3.211 , 3.4405

et 3.4413 MeV. Pour chacune de ces énergies, la section efficace a été mesurée sur douze angles (angle fourni sous forme de cosinus dans le référentiel du CM).

Les données expérimentales de Kinney et Perey Ces données expérimentales ont été mesurées par W. E. Kinney et F. G. Perey [81] auprès de l'accélérateur VdG d'ORNL. Les neutrons utilisés comme projectiles provenaient de la réaction $^2\text{H}(d, n)$. La technique de temps de vol a été utilisée pour déterminer les énergies des neutrons provenant de la source. La section efficace de diffusion élastique différentielle en angle a été mesurée avec un échantillon de H_2O . Les neutrons diffusés étaient détectés par des détecteurs scintillateurs liquides. Le premier jeu EXFOR (N°10276003) contient les données sous forme de coefficients de polynômes de Legendre pour huit points en énergie : 4,34 MeV à 8,56 MeV. Les degrés des polynômes de Legendre vont de 0 à 6 pour chacune de ces énergies. Le second jeu (EXFOR N°10276022) est sous la forme de section efficace $^{16}\text{O}(n, n)$ intégrée angulairement pour ces huit points.

La valeur thermique de Mugabghab La valeur de la section efficace $^{16}\text{O}(n, n)$ à l'énergie thermique ($E = 0.0253$ eV dans le référentiel du laboratoire) donnée par S. F. Mugabghab [83] correspond à une recommandation et est disponible dans EXFOR (N°V1001037). Elle est de $\sigma_s^{0.0253} = 3,761 \pm 0,006$ b.

III.3.1.4 La section efficace $^{16}\text{O}(n, \gamma)$

La valeur thermique de Mugabghab La valeur de la section efficace de capture à l'énergie thermique recommandée par S. F. Mugabghab [83] (EXFOR N°V1001037) est de $\sigma_\gamma^{0.0253} = 0.190 \pm 0.019$ mb.

La valeur thermique de Firestone et Rivay La valeur thermique de R. B. Firestone et Zs. Revay [84] pour $\sigma_\gamma^{16}\text{O}$ a été obtenue auprès du réacteur FRM II (*Forschungs-Neutronenquelle Heinz*) et du réacteur BRR (*Budapest Research Reactor*). La section efficace de capture a été mesurée en irradiant un échantillon d'eau lourde d'épaisseur 3mm par un flux de neutrons froids extraits des réacteurs FRM II et BRR dont les coeurs se trouvaient respectivement à 51 m et 30 m. Les γ rapides obtenus étaient détectés par des germanium de haute pureté (HPGe). La section efficace présentée directement par les auteurs dans la référence [84] mais aussi disponible dans EXFOR (N°23296011) est $\sigma_\gamma = 0.17 \pm 0.003$ mb.

III.3.2 Le système en interaction ($\alpha + ^{13}\text{C} \leftrightarrow ^{17}\text{O}^*$)

III.3.2.1 Les données expérimentales de Bair et Haas

Les données expérimentales de J. K. Bair et F. X. Haas ont été mesurées en 1973 [85] auprès de l'accélérateur VdG du laboratoire ORNL qui a fourni les projectiles

d' He^+ utilisés pour produire les réactions $^{13}\text{C}(\alpha, n)^{16}\text{O}$. L'échantillon étudié était constitué d'un disque de carbone enrichi au ^{13}C . Le taux d'enrichissement n'est pas renseigné. Les données EXFOR (N°C0489002) couvrent une plage d'énergie allant de 0.9973 à 5.4019 MeV (855 points) dans le référentiel du laboratoire de la particule α . Ces données emblématiques constituent une référence pour les évaluateurs et sont souvent inversées pour évaluer la section efficace de la réaction $^{16}\text{O}(n, \alpha)^{13}\text{C}$. L'auteur a recommandé [85] l'application d'une renormalisation de 80 à 85% sur ces données. Cette recommandation n'a été pas appliquée sur les données EXFOR.

III.3.2.2 Les données expérimentales de Harissopulos et *al.*

Les données de la section efficace de réaction $^{13}\text{C}(\alpha, n)^{16}\text{O}$ présentées dans ce paragraphe ont été mesurées par S. Harissopulos et *al.* [86] auprès de l'accélérateur tandem de DTL (*Dynamitron-Tandem-Laboratorium*) à la Rhur-Universität Bochum. Le but de cette expérience était d'abaisser l'incertitude de la mesure en dessous de 10% pour la soustraction du bruit de fond dans les systèmes de détection des géo-neutrinos comme le détecteur de KamLAND (*Kamioka Liquid scintillator Anti-Neutrino Detector*). Cette section efficace $^{13}\text{C}(\alpha, n)^{16}\text{O}$ a été mesurée sur un échantillon de carbone d'épaisseur $22 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ enrichi au ^{13}C . Le taux d'enrichissement était de 99%. Les données présentées par l'auteur et disponibles dans EXFOR (N°F0786004) sont 30% plus bas que celles de J. K. Bair et F. X. Haas (paragraphe III.3.2.1). Elles couvrent une plage d'énergie allant de 0.767 à 7.962 MeV dans le référentiel du laboratoire de la particule α et elles sont constituées de 679 points. L'incertitude rapportée sur ces données est de 4%. Ces données sont, comme les données de J. K. Bair et F. X. Haas (paragraphe III.3.2.1), aussi une référence souvent mise en avant par les évaluateurs.

III.3.3 Le système en interaction ($\alpha + {}^3\text{He} \leftrightarrow {}^7\text{Be}^*$)

III.3.3.1 La section efficace différentielle en angle ${}^4\text{He}({}^3\text{He}, {}^3\text{He}){}^4\text{He}$

Les données expérimentales de Barnard et *al.* Les données expérimentales différentielles en angle ${}^4\text{He}({}^3\text{He}, {}^3\text{He}){}^4\text{He}$ de A. C. L. Barnard et *al.* [87] ont été mesurées auprès de l'accélérateur VDG de Rice University. Les particules ${}^3\text{He}$ utilisées comme projectile étaient fournies par l'accélérateur VdG. Les mesures des sections efficaces de diffusion élastique différentielles en angle ont été effectuées sur un échantillon d' ${}^4\text{He}$ gazeux. Les particules ${}^3\text{He}$ diffusées étaient détectées par des détecteurs à barrière de silicium. Les données EXFOR (N°A1269002) sont tabulées pour les énergies de la particule ${}^3\text{He}$ allant de 2.454 MeV à 5.737 MeV dans le référentiel du laboratoire et pour les angles suivants (valeurs en degrés, référentiel du CM) : 54.77, 63.45, 73.95, 90.03, 104.6, 116.6, 125.3 et 140.8.

Les données expérimentales de Tombrello et Parker Les données expérimentales des sections efficaces de diffusion ${}^4\text{He}({}^3\text{He}, {}^3\text{He}){}^4\text{He}$ différentielles

en angle mesurées par T. A. Tombrello, P. D. Parker [88] ont été recueillies auprès de l'accélérateur Tandem VdG de California Institute of Technology. Les particules ^3He étaient diffusées par un échantillon d' ^4He gazeux. Trois jeux de mesures sont disponibles dans EXFOR dont un dupliqué (N°A1295006) contenant des sections efficaces de diffusion élastique différentielles en angle pour les énergies de ^3He suivantes (référentiel du laboratoire) : 6.25, 8.72 , 9.69 et 11.94 MeV.

Les données expérimentales de Spiger et Tombrello R. J. Spiger et T. A. Tombrello [89] ont mesuré les sections efficaces différentielles en angle à la fois pour les diffusions élastiques $^4\text{He}(^3\text{He}, ^3\text{He})^4\text{He}$, $^3\text{He}(^4\text{He}, ^4\text{He})^3\text{He}$ et la réaction $^4\text{He}(^3\text{He}, \text{p})^6\text{Li}$. Les projectiles ^3He ou ^4He utilisés étaient collectés auprès de l'accélérateur tandem VdG de California Institute of Technology. Les sections efficaces étaient mesurées sur un échantillon gazeux d' ^4He ou ^3He suivant l'expérience réalisée. Dans EXFOR (N°A1094004, N°A1094005), les deux jeux de données disponibles concernent uniquement la diffusion du tritium par l' ^4He .

III.3.4 Le système en interaction ($\text{p} + ^6\text{Li} \leftrightarrow ^7\text{Be}^*$)

Les données expérimentales de McCray Les données expérimentales des sections efficaces de diffusion élastique du proton par le lithium [$^6\text{Li}(\text{p}, \text{p})^6\text{Li}$], différentielle en angle, qui sont présentées dans ce paragraphe ont été mesurées par J. A. McCray [90] auprès d'un accélérateur Van de Graff. Ces sections efficaces ont été mesurées sur des échantillons métalliques de ^6Li et pour les énergies du proton de 0.45 à 2.9 MeV. Un jeu de données est disponible dans la base EXFOR (N°A1410003).

Les données expérimentales d'Elwyn et al. Les mesures expérimentales d'Elwyn et al. [91] ont été réalisées auprès de l'accélérateur Dynamitron du laboratoire national d'Argonne (*Argonne National Laboratory*). L'observable mesurée concerne la section efficace de la réaction $^6\text{Li}(\text{p}, ^3\text{He})\alpha$ différentielle en angle. Les sections efficaces étaient mesurées pour un échantillon mince ($\approx 25 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ pour les distributions angulaires en dessous de 1 MeV et $\approx 70 - 80 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ au delà) de LiF enrichi à 99.3% en ^6Li . Les particules ^3He étaient détectées par des détecteurs à barrière de surface au Si. Dans EXFOR, nous trouvons deux jeux de données (N°F0012002 et N°F0012003) couvrant les énergies de 0.136 MeV à 2.973 MeV. Ces données ont été également publiées par l'auteur dans la référence [91]. Les données sont fournies pour les angles variant entre 0-180 degrés dans le référentiel du CM.

III.3.5 Le système en interaction ($\text{n} + ^{23}\text{Na} \leftrightarrow ^{24}\text{Na}^*$)

La disponibilité de mesures de transitions radiatives individuelles pour le système ($\text{n} + ^{23}\text{Na}$) permettra de confronter de manière directe l'impact de la matrice R exacte avec le formalisme Reich-Moore lors d'un calcul de section efficace de

capture pour les noyaux légers. La section efficace de capture est naturellement la plus sensible à la présence ou non de voies de radiation individuelles Γ_{γ_i} . Les données expérimentales exploitées ont été mesurées par J. Hori et *al.* [92] auprès de l'accélérateur Pelletron de Tokyo Institute of Technology. Le spectre d'énergie des neutrons a été obtenu par technique de temps de vol à partir des neutrons obtenus par la réaction ${}^7\text{Li}(p, n){}^7\text{Be}$ situés à 30 cm d'un détecteur scintillateur de verre de ${}^6\text{Li}$ dont l'axe principal était à un angle de 14 degrés par rapport à la direction du flux des protons. L'échantillon de ${}^{23}\text{Na}$ est un disque de densité 22.9×10^{-3} noyaux/b situé à 12 cm dans la direction du flux de protons. Le spectromètre anti-Compton HPGe utilisé pour la détection des radiations γ issues de la capture était situé à 74,6 cm de l'échantillon et son axe principal faisait un angle de 125 degrés avec la direction du flux de protons. Au total, 22 transitions individuelles γ ont été observées pour chacune des deux résonances. Ces deux résonances sont la résonance large à 53 keV ($J^\pi = 2^-$) et la résonance fine à 35-keV ($J^\pi = 2^-$). Le Tableau III.3.1 reporte les largeurs radiatives en eV [92].

Etat final J_f^π	$E_\lambda = 53 \text{ keV } (J^\pi = 2^-)$	$E_\lambda = 35 \text{ keV } (J^\pi = 2^-)$
1^+	0.128 ± 0.013	0.016 ± 0.004
2^+	0.083 ± 0.009	0.239 ± 0.030
2^+	-	-
$3^{(+)}$	0.233 ± 0.023	0.080 ± 0.010
1^+	-	-
2^+	0.071 ± 0.008	0.036 ± 0.007
3^+	-	0.166 ± 0.020
3^+	0.063 ± 0.009	-
$4^+ (2^+)$	-	0.044 ± 0.007
3^+	0.039 ± 0.007	0.010 ± 0.004
2^-	0.005 ± 0.002	-
1^+	0.154 ± 0.015	-
1^+	0.049 ± 0.006	-
3^+	0.031 ± 0.005	0.130 ± 0.016
$2^+(1^+)$	0.015 ± 0.003	-
$0^+ - 4^+$	0.020 ± 0.005	-
$(1, 2)^-$	-	0.023 ± 0.004
1^-	0.030 ± 0.004	-
	0.016 ± 0.004	0.016 ± 0.004
3	-	0.078 ± 0.010
2^-	0.019 ± 0.010	0.005 ± 0.002
1^-	-	0.008 ± 0.002

TABLE III.3.1 – Largeurs des transitions radiatives suite à une capture neutronique par l'isotope ${}^{23}\text{Na}$ observées par Hori et *al.* [92].

III.3.6 Le système en interaction ($n + {}^{238}\text{U} \leftrightarrow {}^{239}\text{U}^*$)

Nous nous sommes intéressé aux données de capture radiative du système ($n + {}^{238}\text{U}$) dans le but de les utiliser pour application sur des calculs de sections efficaces en matrice R exacte. Les données expérimentales exploitées ici ont été mesurées auprès du réacteur HFBR (*High Flux Beam Reactor*) de Brookhaven [93] par D. R. Price et *al.* [94]. La source de neutrons est un rotor de tungstène, nickel et acier. Le flux de neutrons collimaté parcourt la distance de 22 m avant d'atteindre une cible d'uranium (appauvrie en ${}^{235}\text{U}$) de 0.6 cm d'épaisseur. L'énergie des neutrons est obtenue par TOF. Les radiations γ produites par la réaction sont détectées par un détecteur germanium. Les largeurs des transitions de capture radiative obtenues pour six résonances sont présentées dans le Tableau III.3.2. Dans cette expérience, l'étude des raies γ en provenance des voies de capture a été limitée à la plage d'énergie des radiations compris entre 3200 keV et 4202 keV à cause des problèmes de résolution dus à l'effet Compton.

	Energies des résonances en eV					
	6.7	10.2	21	37	66	81
Largeurs des transitions radiatives Γ_γ (meV)	0 ± 0.030	0 ± 0.030	0.015 ± 0.04	0.027 ± 0.09	0.01 ± 0.09	0.09 ± 0.13
	0.11 ± 0.030	0 ± 0.030	0.06 ± 0.05	0 ± 0.02	0 ± 0.03	0.18 ± 0.18
	0.07 ± 0.02	0 ± 0.030	0 ± 0.02	0 ± 0.02	0 ± 0.03	0 ± 0.03
	0.03 ± 0.03	0.01 ± 0.023	0.26 ± 0.05	0.24 ± 0.03	0.42 ± 0.08	0.15 ± 0.12
	0.63 ± 0.03	0.29 ± 0.023	0.93 ± 0.03	0.1 ± 0.03	0.38 ± 0.16	0.65 ± 0.09
	0.09 ± 0.03	0 ± 0.030	0.15 ± 0.04	0.08 ± 0.05	0.07 ± 0.06	0.31 ± 0.19
	0 ± 0.02	0 ± 0.030	0.1 ± 0.05	0 ± 0.02	0.23 ± 0.25	0 ± 0.03
	0.76 ± 0.06	0.53 ± 0.026	0.23 ± 0.03	0.15 ± 0.03	0.12 ± 0.05	0.37 ± 0.22
	1.13 ± 0.07	0.91 ± 0.27	0.59 ± 0.04	0.32 ± 0.03	0.24 ± 0.06	0.24 ± 0.11
	0.026 ± 0.04	-0.07 ± 0.25	0.055 ± 0.037	0.32 ± 0.05	0.05 ± 0.085	0.4 ± 0.13
	0.13 ± 0.05	0.29 ± 0.27	0.27 ± 0.04	0.19 ± 0.07	0.27 ± 0.07	0.041 ± 0.159
	0.26 ± 0.05	0.42 ± 0.27	0.45 ± 0.04	0.075 ± 0.059	0.23 ± 0.07	0.33 ± 0.12
	0.10 ± 0.02	0.45 ± 0.30	0.15 ± 0.05	0.07 ± 0.04	0.17 ± 0.011	0.12 ± 0.18
	0.12 ± 0.03	0.92 ± 0.29	0.15 ± 0.04	0.17 ± 0.05	0.35 ± 0.11	0.25 ± 0.19
	0.05 ± 0.03	0.15 ± 0.30	0.11 ± 0.04	0.25 ± 0.05	0.39 ± 0.11	0.26 ± 0.11
	0.54 ± 0.04	0.66 ± 0.032	0.14 ± 0.04	0.55 ± 0.05	0.30 ± 0.11	0.33 ± 0.19
	0.07 ± 0.03	0.74 ± 0.32	0.30 ± 0.05	0.38 ± 0.05	0.35 ± 0.08	0.36 ± 0.13
	0.10 ± 0.03	0.49 ± 0.32	0.09 ± 0.07	0.20 ± 0.08	0.072 ± 0.111	0.29 ± 0.20
	0.08 ± 0.08	0.26 ± 0.032	0.12 ± 0.05	0.04 ± 0.078	0.24 ± 0.08	0.092 ± 0.213
	0.14 ± 0.08	-0.035 ± 0.346	-0.055 ± 0.069	0.2 ± 0.06	0.23 ± 0.14	0.24 ± 0.23
	0.031 ± 0.058	0.19 ± 0.36	0.2 ± 0.05	0.18 ± 0.09	0.41 ± 0.14	-0.07 ± 0.23
	0.005 ± 0.06	-0.055 ± 0.036	0.2 ± 0.08	0.18 ± 0.09	0.21 ± 0.13	0.16 ± 0.24
	0.13 ± 0.06	0.16 ± 0.38	0.14 ± 0.04	0.15 ± 0.09	0.12 ± 0.13	0.12 ± 0.24

TABLE III.3.2 – Largeurs de transitions radiatives de capture neutronique par l'isotope ${}^{238}\text{U}$ reportées par D. R. Price et *al.*[94].

III.4 Les fichiers des paramètres de résonance exploités au cours de la thèse

III.4.1 Le fichier de paramètres évalués du système $(n + {}^{16}\text{O})$

Les paramètres de résonance du système $(n + {}^{16}\text{O})$ que nous avons exploités au cours de cette thèse ont été évalués par L. C. Leal et *al.* dans le cadre du projet CIELO [50]. Ces paramètres ont été tabulés en format ENDF-6 (fichier JEFF33T3 [95]) et publiés dans la référence [38]. Ils suivent le formalisme Reich-Moore et sont tabulés dans le format Reich-Moore étendu (en anglais, *R-Matrix Limited*) dans le référentiel du laboratoire du neutron. Le format Reich-Moore étendu est proposé par le format ENDF-6 [28] qui lui attribue le flag LRF= 7. Ce format permet, en plus des voies classiques (neutron, capture totale et deux voies de fission), l'ajout de voies d'autres réactions. L'isotope ${}^{16}\text{O}$ n'est naturellement pas concerné par la fission mais a trois voies ouvertes en dessous de 6 MeV (limite actuelle du domaine RRR) : les voies de diffusion et de capture du neutron et la voie décrivant la réaction ${}^{16}\text{O}(n, \alpha){}^{13}\text{C}$. Le fichier JEF33T3 reporte donc pour chaque résonance les informations suivantes

1. L'énergie de la résonance en eV ;
2. La largeur de la voie de désexcitation gamma totale $\Gamma_{\gamma\text{tot}}$ en meV ;
3. La largeur de la voie neutron Γ_n en meV ;
4. La largeur de la voie alpha Γ_α en meV.

D'autres informations comme le moment angulaire total et la parité J^π lui sont associées, le moment angulaire orbital de la voie ℓ , le spin de la voie s , le rayon de la voie a_c ainsi que le rayon de diffusion R' de la voie sont également fournis. La procédure historique d'évaluation du système $(n + {}^{16}\text{O})$ dans le référentiel du laboratoire du neutron a contraint les évaluateurs à avoir recours à l'inversion de données pour ajuster les largeurs Γ_α à partir des mesures ${}^{13}\text{C}(\alpha, n){}^{16}\text{O}$ qui sont souvent plus faciles à réaliser que les mesures en cinématique directe de la réaction ${}^{16}\text{O}(n, \alpha){}^{13}\text{C}$. C'est ce qui a été fait par L. C. Leal dans son évaluation. Ces paramètres ont constitué pour nous une base précieuse que nous avons utilisée largement au cours des développements et validation du module TORA présenté au chapitre IV. Les amplitudes issues de ces paramètres constitueront le jeu *a priori* pour le travail d'ajustement.

III.4.2 Les fichiers de paramètres des systèmes en interaction ($\alpha + {}^3\text{He}$) et ($p + {}^6\text{Li}$) $\leftrightarrow {}^7\text{Be}^*$

E_λ en eV	J^π	Voie	γ_λ en $\sqrt{eV}$	ℓ	s
-3691020.96	$3/2^-$	α	1612.82	1	$1/2$
		proton	-2045.32	1	$1/2$
		proton	-637.89	1	$3/2$
		proton	0.0	3	$3/2$
13373129.71	$5/2^-$	α	286.33	3	$1/2$
		proton	1447.38	1	$3/2$
		proton	0.0	3	$1/2$
		proton	0.0	3	$3/2$
16495400, 47	$5/2^-$	α	1805.886	3	$1/2$
		proton	-533.11	1	$3/2$
		proton	0.0	3	$1/2$
		proton	0.0	3	$3/2$
8107527.30	$7/2^-$	α	1210.65	3	$1/2$
		proton	0.0	3	$1/2$
		proton	0.0	3	$3/2$
		proton	0.0	5	$3/2$

TABLE III.4.3 – Paramètres de résonance du système composé ${}^7\text{Be}^*$ convertis dans le référentiel du laboratoire de la particule α incidente.

Les paramètres présentés dans ce paragraphe proviennent d'un effort de comparaison des résultats des codes actuels coordonné par l'Agence Internationale de l'Energie Atomique (AIEA). Participaient à ce projet l'ensemble des codes opérant sous la théorie de la matrice R [15] : AMUR, AZURE2, CONRAD, EDA, FRESCO, GECCOS, and SAMMY. Les codes CONRAD et SAMMY ont été présentés respectivement dans les paragraphes III.2.1 et III.2.2. Pour les autres codes, nous invitons le lecteur à consulter les descriptions fournies dans la référence [15]. Tous les participants à ce projet étaient invités à calculer les sections efficaces induites par des particules chargées du système composé ${}^7\text{Be}^*$ sous des conditions communes prédéfinies (même jeu de paramètres de résonances, mêmes énergies et angles, conditions aux limites $B = -\ell$, etc). Les données d'entrée des codes, préparées au sein du projet et partagées à tous les membres étaient constituées d'un jeu de paramètres de résonance unique et de données expérimentales des auteurs que nous avons présentés aux paragraphes III.3.3.1, III.3.3.1, III.3.3.1, III.3.4, III.3.4. Les résultats des calculs des codes présents dans le projet sont comparés dans la référence [15]. De notre côté, nous avons testé avec le module TORA les données d'entrée de ces codes que nous nous sommes procurées auprès de P. Tamagno et P. Archier (CEA, LEPH) qui participaient au projet. Nous montrerons les résultats

de nos calculs, que nous comparons à ceux des codes SAMMY et CONRAD, au chapitre IV. Les paramètres des résonances que nous avons utilisés, convertis respectivement dans les référentiels du laboratoire de la particule incidente pour les systèmes ($\alpha + {}^3\text{He}$) et ($p + {}^6\text{Li}$), sont présentés dans les Tableau III.4.3 et Tableau III.4.4.

E_λ en eV	J^π	La voie	γ_λ en $\sqrt{eV}$	ℓ	s
-6545063.53	$3/2^-$	proton	-1448.74	1	$1/2$
		proton	-451.83	1	$3/2$
		proton	0.0	3	$3/2$
		α	1142.39	1	$1/2$
2016299.14	$5/2^-$	proton	1025.20	1	$3/2$
		proton	0.0	3	$1/2$
		proton	0.0	3	$3/2$
		α	202.81	3	$1/2$
3582794.37	$5/2^-$	proton	-377.61	1	$3/2$
		proton	0.0	3	$1/2$
		proton	0.0	3	$3/2$
		α	1279.14	3	$1/2$
-625538.65	$7/2^-$	proton	1210.65	3	$1/2$
		proton	0.0	3	$3/2$
		proton	0.0	5	$3/2$
		α	857.53	3	$1/2$

TABLE III.4.4 – Paramètres de résonance du système composé ${}^7\text{Be}^*$ convertis dans le référentiel du laboratoire du proton incident.

Les rayons associés à la voie α et à la voie proton sont respectivement de $a_\alpha = 4,241511$ fm et $a_p = 3,94397$ fm. Les énergies de séparation de la particule α et du proton sont respectivement $S_\alpha = 1,58$ MeV et $S_p = 5,6$ MeV.

III.4.3 Le fichier de paramètres du système ($n + {}^{23}\text{Na}$)

Les largeurs des voies neutroniques utilisées sont extraites des bibliothèques JEFF-3.3 ou JEFF-3.1. Bien que ce dernier est proposé en Breit et Wigner multi-niveau, la présence d'une largeur neutronique Γ_n et d'une largeur totale de capture radiative $\Gamma_{\gamma_{\text{tot}}}$ permet de réaliser des calculs des sections efficaces de capture et de diffusion élastique en Reich-Moore ou en matrice R exacte. Le cas matrice R exacte est possible sous réserve de disposer des largeurs des voies individuelles de désexcitation radiative dont la somme est équivalente à la largeur totale de capture radiative $\Gamma_{\gamma_{\text{tot}}}$. L'analyse des différences entre les deux fichiers permet de relever les évolutions proposées dans le fichier JEFF-3.3. Dans le but de comparer les calculs en RM avec des calculs en matrice R exacte, un nouveau

fichier a été constitué autour des deux résonances à $E_\lambda = 53$ keV et $E_\lambda = 35$ keV dont les transitions de capture radiative ont été mesurées par Hori et *al.*[92] (voir le paragraphe III.3.5). Les largeurs des voies neutrons de ce nouveau fichier ont été extraites du fichier JEFF-3.3. Dans le nouveau fichier, la largeur totale de la voie de capture radiative usuelle du formalisme Reich-Moore a été remplacée par les vingt deux largeurs radiatives individuelles obtenues par Hori et *al.*[92]. La somme des largeurs radiatives partielles obtenues par Hori et *al.*[92] ($\Gamma_\gamma = 979$ meV pour la résonance à $E_\lambda = 53$ keV et $\Gamma_\gamma = 828$ meV pour la résonance $E_\lambda = 35$ keV) couvre 100% de la largeur $\Gamma_{\gamma_{\text{tot}}}$ attendue étant donné que le bruit de fond généré par l'effet Compton a été corrigé correctement par Hori et *al.* [92]. Un calcul en matrice R exacte complet peut donc être comparé au calcul RM, contrairement à l'état du système ($n + {}^{238}\text{U}$) (voir III.4.4). Le rayon de voie unique associé aux paramètres du fichier JEFF-3.1 est $a_n = 5.2$ fm. Pour les paramètres du fichier JEFF-3.3, il est recommandé un rayon de voie $a_n = 4.287394$ fm pour le calcul des facteurs de pénétrabilité et de décalage énergétique et un rayon de diffusion $R' = 4.9$ fm pour le calcul des facteurs de déphasage sur sphère dure.

III.4.4 Le fichier de paramètres du système en interaction ($n + {}^{238}\text{U}$)

Le fichier des paramètres de résonances du système ($n + {}^{238}\text{U}$) sur lequel nous nous appuyons est un fichier qui provient de la bibliothèque d'évaluation JEFF-3.1. Ce fichier est évalué en Reich-Moore et est donc parfaitement approprié pour nos applications aux calculs de sections efficaces sous ce formalisme. Les paramètres de résonance de l'évaluation JEFF-3.1 couvrent un domaine résonnant allant jusqu'à 20 keV. Les largeurs des voies de fission non nulles existantes pour quelques résonances de ce domaine étant très faibles, elles ont été négligées. En tout, nous avons 3342 résonances réparties en deux groupes : 926 résonances $\ell = 0$ ($J^\pi = 0.5^+$) dont 22 résonances négatives et 2416 résonances $\ell = 1$ ($J^\pi = 0.5^-$ et $J^\pi = 1.5^+$).

Comme pour le système ($n + {}^{23}\text{Na}$) présenté au paragraphe III.4.3, le choix du système ($n + {}^{238}\text{U}$) a été motivé par la disponibilité de largeurs de désexcitation radiative individuelles Γ_{γ_i} sur lesquelles nous avons réalisé des calculs de sections efficaces en matrice R exacte. Ces largeurs ont été mesurées par Price et *al.* [94]. Nous avons présenté ces données au paragraphe III.3.6. Pour l'étude spécifique matrice R exacte, nous avons confectionné un nouveau fichier constitué de six résonances dont les largeurs partielles Γ_{γ_i} de capture radiative sont bien connues. Les largeurs neutroniques Γ_n pour ces six résonances ont été extraites du fichier évalué JEFF-3.1. La somme des largeurs Γ_{γ_i} représente $\sim 26\%$ de la valeur de la largeur radiative totale Γ_γ attendue. Cela n'est pas étonnant vu qu'une partie des radiations individuelles n'a pas pu être extraite de la mesure à cause des difficultés liées à la correction du bruit de fond généré par l'effet Compton [94]. Pour compenser les contributions manquantes, nous avons effectué des calculs de

pseudo-matrice R (impliquant une contribution en matrice R exacte pour les 23 largeurs partielles connues et une section efficace résiduelle Reich-Moore permettant de compenser les 80% de la largeur radiative totale Γ_γ manquants). Les résultats des calculs seront confrontés à ceux du code SAMMY obtenus par O. Bouland en 2005 [96]. Le rayon de voie associé aux paramètres de résonance est $a_n = 9.45$ fm.

III.5 Conclusion sur le chapitre

Le but de ce chapitre était de présenter succinctement l'environnement (logiciel et données) dont nous disposons pour effectuer ce travail de thèse. Ces outils sont composés de codes, de paramètres d'entrée (les évaluations) et de bases expérimentales d'observables. Le rôle que joue chacun a été précisé. Parmi les outils logiciels essentiels on compte le code CONRAD qui sert de support au module de calcul de sections efficaces TORA, lequel est la pièce maîtresse de ce travail de thèse. Ce module sera présenté au chapitre IV. Les données expérimentales du système composé $^{17}\text{O}^*$ seront utilisées pour ajuster les paramètres dans le cadre du référentiel unifié du CM de ce système. Les données du système composé $^7\text{Be}^*$ seront exploitées pour la validation des calculs du module TORA, dans une dynamique de comparaison aux autres codes référents opérant sous la théorie de la matrice R . Enfin, les données du ^{23}Na et de l' ^{238}U seront exploitées pour des études spécifiques relatives à l'impact de l'approximation Reich-Moore. La disponibilité effective des données de désexcitation des voies individuelles de capture a rendu possible cette investigation.

Chapitre IV

Mise en place et validation du module de calcul de sections efficaces TORA (*TOols for Reactions Analysis*)

IV.1 Introduction

Dans le souci de mener à bien l'objectif de cette thèse laquelle consiste à proposer une approche de modélisation de sections efficaces cohérente pour toutes les réactions qui partagent un même système composé, nous avons développé un module de travail, TORA (*Tool for Reactions Analysis*), destiné à compléter le code CONRAD [57] (*Code for Reaction Analysis and Data Assimilation*) dans son travail d'analyse de données nucléaires. TORA est un module de calcul de sections efficaces des réactions nucléaires écrit en C++. De manière indépendante, il est capable de calculer les sections efficaces des réactions nucléaires, autres que celles de fission et les réactions nucléaires avec des photons en voie d'entrée, à la fois intégrées et différentielles en angle dans le domaine des résonances résolues (RRR). Ces sections efficaces sont calculées à 0 K à partir d'un jeu de paramètres de résonance et sur une grille en énergie quelconque. Le processus de calcul des sections efficaces par TORA est établi sous la théorie de la matrice R [1]. Le calcul peut être effectué en approximation Reich-Moore [39] ou en matrice R exacte (sans approximation).

L'objectif de ce chapitre est de présenter les capacités de calcul de sections efficaces du module TORA. Nous montrerons, en guise de validation, les calculs effectués sous approximation Reich-Moore. Les calculs par le module TORA peuvent être réalisés dans deux référentiels différents : le référentiel unifié du CM du système composé et le référentiel historique du laboratoire du projectile. Une première

démonstration du calcul dans le système unifié du CM est faite avec un calcul simultané, sur un jeu unique de paramètres de résonances, des sections efficaces des réactions $^{16}\text{O}(n, \alpha)^{13}\text{C}$ et $^{13}\text{C}(\alpha, n)^{16}\text{O}$.

IV.1.1 Justification du développement d'un nouveau module

La plupart des codes d'évaluation de Physique des Réacteurs ont été réfléchis dans le référentiel du laboratoire associé au neutron. Cela est particulièrement vrai au regard des évaluations d'isotopes des bibliothèques officielles qui fournissent des données essentiellement pour des réactions induites par neutron. Le code CONRAD, développé au Laboratoire d'Etudes de Physiques (LEPh) du centre CEA de Cadarache, était également conçu dans cet esprit au début de cette thèse. Cet état de fait a changé avec les récents développements réalisés par P. Tamagno [15] qui permettent à la dernière version du code CONRAD d'évaluer les sections efficaces de réactions avec projectiles chargés. Le module TORA a été donc conçu dans le but de permettre à la version précédente du code CONRAD la réalisation d'analyse de mesures dans le référentiel unifié du centre de masse du système composé excité sans altérer sa structure initiale. Au delà de cet objectif, la construction d'un module indépendant a permis un gain pédagogique substantiel et une maîtrise de l'outil tout au long des développements.

IV.2 Développement et validation de l'outil

IV.2.1 Formalisme de la matrice R sans approximation

IV.2.1.1 Les fichiers d'entrée et de sortie

Les fichiers d'entrée Le module de calcul TORA nécessite en entrée deux fichiers : un fichier contenant les paramètres de résonances et un fichier qui contient une grille en énergie soit en provenance des données expérimentales, soit fourni par un autre code comme NJOY. Dans sa première partie (le préambule), le fichier de paramètres de résonances commence par une rubrique qui attribue les couples de particules participant aux réactions : les projectiles (resp. éjectiles dans la voie de sortie) et les cibles (resp. noyaux résiduels). La seconde rubrique attribue le spin et la parité pour les particules (neutron, proton, α , etc.). Elle décrit pour chaque niveau d'excitation possible des particules (ou noyaux) les spins et parités ainsi que les énergies associées. A chaque particule ou noyau est ensuite fourni dans la même rubrique les masses en unité de masse atomique (u.m.a), nombre de masse A et charge Z. La troisième rubrique fournit une liste exhaustive des moments angulaires totaux et parités associés aux états du système composé. La rubrique suivante décrit les rayons de voies et les rayons effectifs. La valeur des rayons est soit fournie par moment angulaire orbital ℓ ou peut être calculée

suivant la convention ENDF [28] pour les neutrons ou suivant la Ref. [29] pour les particules chargées. En plus de dépendre de ℓ , les rayons peuvent varier aussi en fonction de l'énergie. Dans cette rubrique, un indicateur permet de préciser si les paramètres de résonances sont fournis dans le référentiel du laboratoire (LAB) ou dans le référentiel unifié du CM. L'indicateur relatif au calcul appliqué (matrice R ou Reich-Moore) est aussi nécessaire. Enfin, le type de paramètres de résonances (amplitudes réduites ou largeurs observées), les seuils d'émission des projectiles (resp. éjectiles) S_x sont également à fournir.

La seconde partie du fichier d'entrée contient exclusivement les informations permettant de fournir par voie c les paramètres de résonances. Ces paramètres sont les énergies du niveau (en eV) et les amplitudes réduites (en $\sqrt{eV}$) ou les largeurs à mi-hauteur (en meV). Seules les voies de fission ne sont pas prises en charge par TORA. Chaque amplitude réduite ou largeur à mi-hauteur est rattachée à une voie. Chaque voie, à l'exception des voies γ explicites, est caractérisée par le couple de particules en interaction (le projectile/éjectile et sa cible/résiduel, à laquelle correspond un niveau d'excitation), le moment angulaire total (spin total J), la parité π , le moment angulaire orbital ℓ et le spin de la voie s. Pour les voies γ explicites, TORA prévoit la possibilité d'effectuer des calculs uniquement sur la base du nombre de voies de désexcitation γ fournies par l'utilisateur.

Le second fichier contient, en plus de la grille en énergie, la spécification de la réaction : le projectile, la cible, l'éjectile, le noyau résiduel ainsi que le type (diffusion élastique, capture, etc) de section efficace requise. C'est ce fichier qui permet de discriminer les sections efficaces intégrées ou différentielles en angle [calculées suivant le formalisme de Blatt et Biedenharn [35] (option par défaut) ou à partir de coefficients de Legendre fournis]. Les angles de diffusion peuvent être exprimés au choix dans le référentiel du LAB ou dans le référentiel du CM. L'Eq. (C.17) dans l'annexe C permet d'obtenir le cosinus de l'angle dans le CM s'il est fourni dans le référentiel LAB. Ce fichier permet également d'indiquer si le calcul demandé est réalisé dans le référentiel du laboratoire ou le référentiel du CM unifié (option par défaut). Enfin, une indication supplémentaire permet de préciser le système de référence de la grille tabulée en énergie (énergies d'excitation dans le référentiel du CM unifié ou énergies dans le système du laboratoire du projectile).

Le fichier de sortie Le fichier de sortie contient les sections efficaces calculées en format colonne : énergie-section pour les sections efficaces intégrées en angle, énergie-angle-section dans le cas différentiel en angle.

IV.2.1.2 Le fichier intermédiaire

Ce fichier intermédiaire permet de récupérer les amplitudes réduites converties à partir des largeurs des résonances du référentiel du LAB si le fichier d'entrée des

paramètres de résonance contient ces dernières. Dans le cas où le fichier d'entrée contient déjà les amplitudes réduites, elles seront tout simplement réécrites dans le fichier intermédiaire. C'est un fichier de format simple où les résonances sont groupées par famille de couple J^π . Pour chaque résonance est indiquée la valeur de l'énergie correspondante, la valeur de l'amplitude réduite pour chaque voie ouverte et une description de la voie cohérente avec le fichier d'entrée. Ce fichier a l'avantage de ne contenir que des informations directement utiles au calcul des éléments de la matrice R (les amplitudes réduites) dans le même système de référence que celui du calcul demandé.

IV.2.1.3 La construction et la gestion des voies

Le principe appliqué par le module TORA dans la construction des voies est celui du couplage $\vec{\ell} - \vec{s}$ pour les voies non radiatives. Il construit d'abord le nombre quantique s de spin de la voie à partir des informations communiquées sur les spins intrinsèques de la cible (resp. noyau résiduel) I et du projectile (resp. éjectile) i fournies dans le fichier d'entrée. Le principe du calcul du nombre quantique du spin s est le suivant

$$\vec{s} = \vec{i} + \vec{I} \iff |I - i| \leq s \leq |I + i| \quad (\text{IV.2.1})$$

Si $I \neq 0$ et $i \neq 0$, s peut prendre plusieurs valeurs (réduites à 2 dans le cas des neutron et proton). Dans le cas contraire, s ne possède qu'une seule valeur.

A partir de la liste des J^π fournie dans le fichier d'entrée, le module TORA établit ensuite les ℓ qui participent à la formation d'un couple J^π donné. La règle de sélection pour ℓ est la suivante

$$\vec{J} = \vec{\ell} + \vec{s} \iff |\ell - s| \leq J \leq |\ell + s| \quad (\text{IV.2.2})$$

Dans l'étape suivante, TORA procède à la sélection des voies autorisées et non autorisées. La formation du système composé à partir du couple (projectile + cible) suivi d'une désexcitation de ce système avec un couple (éjectile + noyau résiduel) donné est possible si pour le couple J^π formé par le projectile et la cible, il existe un couple $J'^{\pi'}$ formé par l'éjectile et le noyau résiduel tels que

$$J^\pi = J'^{\pi'} \quad (\text{IV.2.3})$$

Ce qui a pour conséquence que le ℓ impliqué doit vérifier la conservation de la parité telle que

$$\pi = (-1)^\ell \times \pi_i \times \pi_I \quad (\text{IV.2.4})$$

où π_i et π_I sont les parités du projectile et de la cible. Ainsi, les voies autorisées sont sélectionnées sur la base de (IV.2.3) et (IV.2.4). Dans le module TORA, chaque voie c est caractérisée par

$$c \equiv (\alpha, J, \pi, \ell, s) \quad (\text{IV.2.5})$$

IV.2.1.4 Calcul en matrice R dans un même référentiel

Dans le cadre du formalisme matrice R, l'élément de la matrice R calculé dans le référentiel du laboratoire est obtenu suivant l'expression

$$R_{cc'}^{J^\pi} = \sum_{\lambda} \frac{\gamma_{\lambda c}^{J^\pi} \gamma_{\lambda c'}^{J^\pi}}{E_{\lambda}^{J^\pi} - E} \quad (\text{IV.2.6})$$

où $\gamma_{\lambda c}^{J^\pi}$, $\gamma_{\lambda c'}^{J^\pi}$, $E_{\lambda}^{J^\pi}$ et E sont respectivement les amplitudes réduites des voies c et c' , l'énergie de la résonance et l'énergie du projectile dans le référentiel du laboratoire. Comme indiqué au paragraphe II.2.1 du chapitre II, il s'établit une transformation mutuelle des cibles en noyaux résiduels et des projectiles en éjectiles. Cette transformation est accompagnée *constamment* d'un changement de référentiel.

Dans le référentiel unifié du CM, le calcul de l'élément de la matrice R s'effectue ainsi

$$R_{cc'}^{J^\pi} = \sum_{\lambda} \frac{\gamma_{\lambda c}^{J^\pi; \text{CM}} \gamma_{\lambda c'}^{J^\pi; \text{CM}}}{E_{x\lambda}^{J^\pi; \text{CM}} - E_x^{\text{CM}}} \quad (\text{IV.2.7})$$

où $\gamma_{\lambda c}^{J^\pi; \text{CM}}$, $\gamma_{\lambda c'}^{J^\pi; \text{CM}}$, $E_{x\lambda}^{J^\pi; \text{CM}}$ et E_x^{CM} sont respectivement les amplitudes réduites des voies c et c' , l'énergie de la résonance et l'énergie du projectile. Ces énergies sont étalonnées par rapport à l'énergie du fondamental du noyau excité. Tous les paramètres sont exprimés dans le référentiel commun du CM. L'avantage de ce référentiel se souligne de manière remarquable ici : *la transformation mutuelle des éjectiles en projectiles n'a plus besoin d'être constamment accompagnée par le changement du référentiel*. Les paramètres sont en effet communs à toutes les réactions présentes et ne subissent aucune transformation pour leur utilisation au calcul de la matrice R.

IV.2.1.5 Le calcul des facteurs de pénétrabilité, de décalage énergétique et de diffusion sur sphère dure

Energies positives (au-dessus du seuil de la réaction)

Les voies neutrons Les facteurs de pénétrabilité P_ℓ , les facteurs de décalage ou shift S_ℓ et les facteurs de diffusion sur sphère dure ϕ_ℓ dépendent du moment angulaire orbital ℓ . Dans le module TORA, pour les voies neutrons, ils sont calculés selon chaque moment angulaire orbital ℓ suivant les formules de récurrence que l'on peut retrouver dans le manuel ENDF-6 [28]

$$P_\ell = \frac{\rho^2 P_{\ell-1}}{(\ell - S_{\ell-1})^2 + P_{\ell-1}^2} \quad (\text{IV.2.8})$$

$$S_\ell = \frac{\rho^2 (\ell - S_{\ell-1})}{(\ell - S_{\ell-1})^2 + P_{\ell-1}^2} - \ell \quad (\text{IV.2.9})$$

$$\phi_\ell = \phi_{\ell-1} - \tan^{-1} \left[\frac{P_{\ell-1}}{\ell - S_{\ell-1}} \right] \quad (\text{IV.2.10})$$

Les facteurs de départ, pour $\ell = 0$, sont choisis ainsi

$$\begin{aligned} P_0 &= \rho \\ S_0 &= 0 \end{aligned} \quad (\text{IV.2.11})$$

$$\phi_0 = \rho \quad (\text{IV.2.12})$$

Le facteur ρ véhicule la dépendance de ces paramètres en fonction de l'énergie cinétique dans la voie dans le référentiel du laboratoire et au rayon de voie. Dans le référentiel du laboratoire, ce facteur est calculé par

$$\rho(E, a_c) = k_c(E) a_c \quad (\text{IV.2.13})$$

où k_c est le nombre d'onde dans la voie c dans le CM obtenu suivant la formule (voir le paragraphe II. C. 2 de la réf. [62])

$$k_c = \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{2mM}{m+M} \left[E \frac{M}{m+M} - Q \right]} \quad (\text{IV.2.14})$$

M et m sont respectivement les masses de la cible et du projectile. L'énergie de la réaction Q est exprimée dans le CM et calculée par la différence entre l'énergie de séparation du projectile et celle de l'éjectile. Elle est nulle dans le cas d'une diffusion élastique.

Dans le système unifié du CM, la relation (IV.2.14) devient

$$k_c = \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{2mM}{m+M} [E^{CM} - S_{part.}]} \quad (\text{IV.2.15})$$

E^{CM} est l'énergie du projectile (resp. éjectile) dans le CM avec pour référence le fondamental du noyau composé (NC). $S_{part.}$ est l'énergie du seuil d'émission du projectile (resp. éjectile).

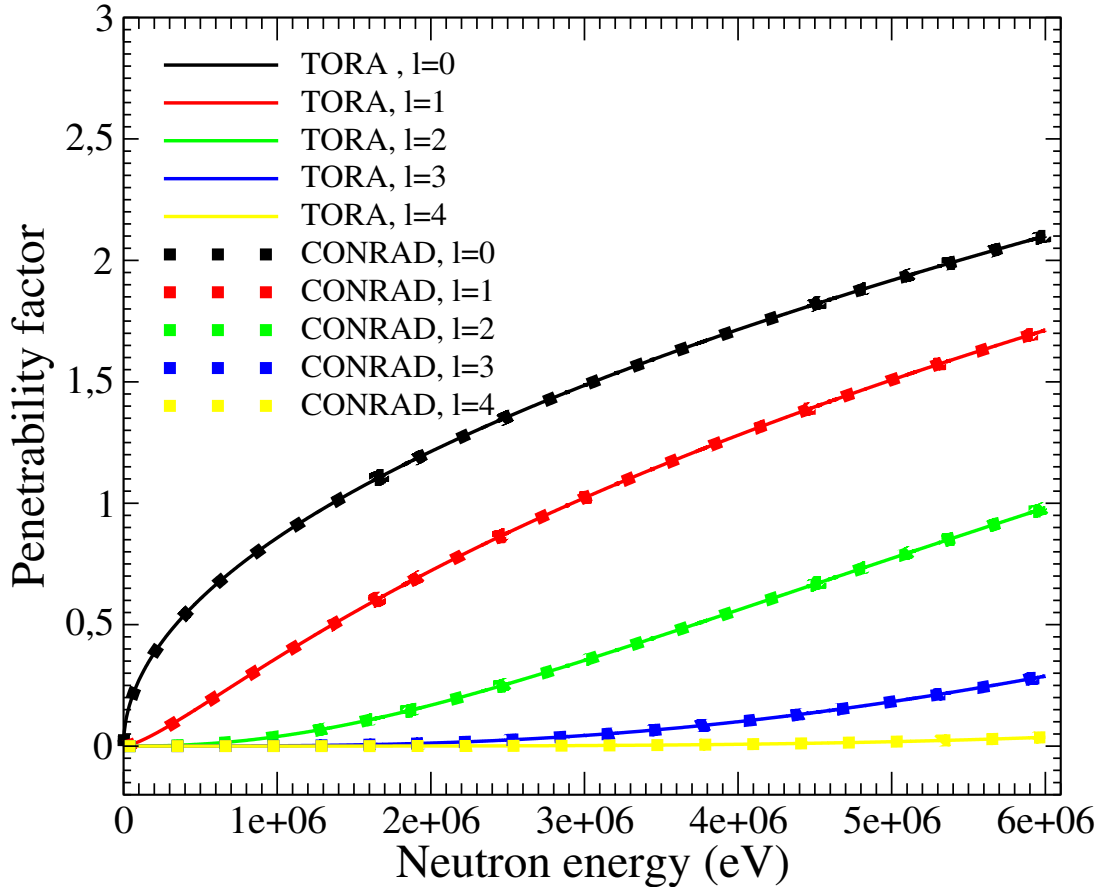


FIGURE IV.2.1 – Facteurs de pénétrabilité pour le système $(n + {}^{16}\text{O})$. La comparaison est faite entre les calculs du code CONRAD et du module TORA. Les énergies sont exprimées dans le référentiel du laboratoire du neutron incident.

La Fig. IV.2.1 montre les valeurs des facteurs de pénétrabilité P_ℓ calculés par le module TORA et celles des facteurs calculés par le code CONRAD pour le système $(n + {}^{16}\text{O})$. Nous observons que les P_ℓ croissent avec l'énergie des neutrons. Pour une même énergie, la valeur de ces facteurs diminue quand le moment angulaire orbital ℓ croît. Ainsi, la valeur maximale est observée pour $\ell = 0$. Les résultats des calculs sont en conformité avec l'expression (I.4.24) du potentiel centrifuge. En effet, pour les valeurs du moment angulaire orbital ℓ faibles, la barrière centrifuge à franchir est faible (ou nulle dans le cas $\ell = 0$) et cela explique les valeurs des facteurs P_ℓ fortes observées. La Fig. IV.2.2 montre les résultats des calculs des S_ℓ du module TORA et du code CONRAD. Nous remarquons que pour les basses énergies, $S_\ell \approx -\ell$. Ces résultats justifient le choix des conditions aux limites $B_c = -\ell$, comme cela a été présenté au paragraphe I.5.3. En effet, en prenant $\rho \rightarrow 0$ dans la relation (IV.2.9), on retrouve bien $S_\ell = -\ell$. Les facteurs montrés sur la Fig. IV.2.1 et Fig. IV.2.2 ont été calculés en utilisant un rayon unique $a_c = 4,15$ fm recommandé par L. C. Leal

dans le fichier évalué JEFF33T3 [95] .

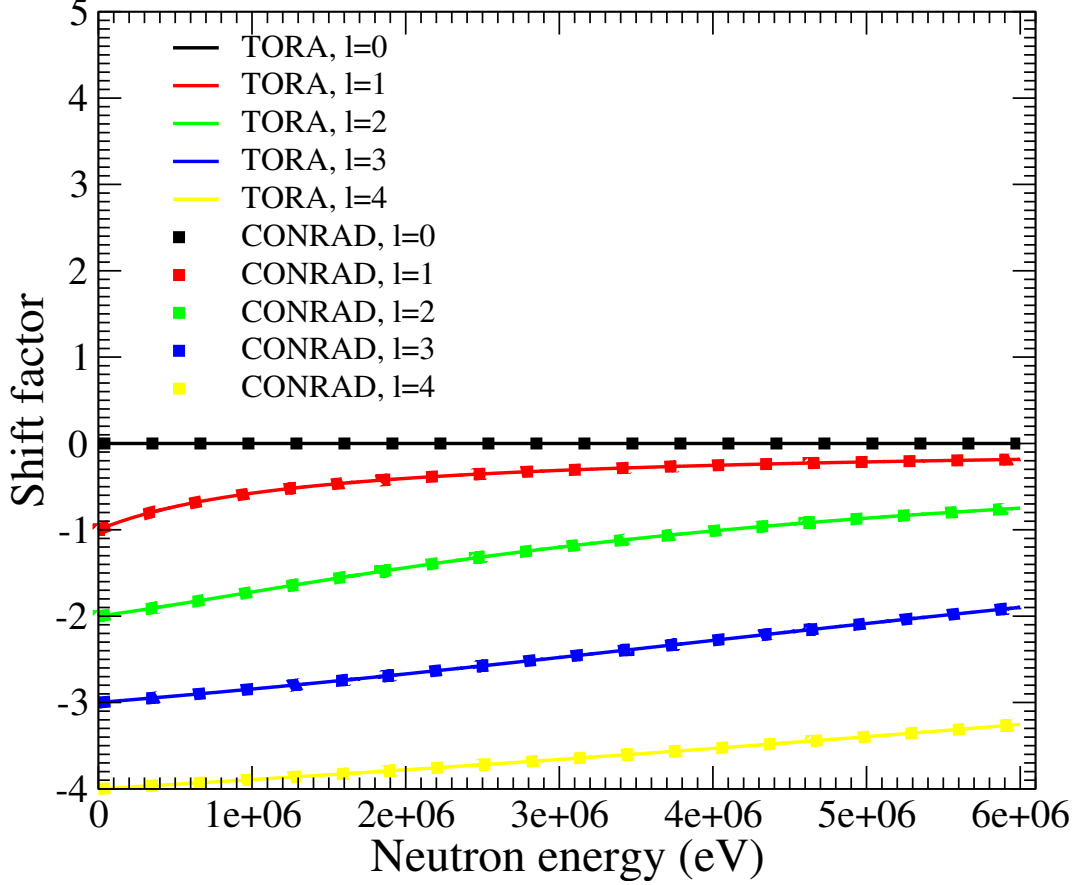


FIGURE IV.2.2 – Facteurs de décalage énergétique pour le système $(n + {}^{16}\text{O})$. La comparaison est faite entre les résultats du code CONRAD et ceux du module TORA. Les énergies exprimées sont dans le référentiel du laboratoire du neutron.

Les particules chargées Pour calculer les facteurs P_ℓ , S_ℓ et ϕ_ℓ pour les particules chargées, nous devons aussi tenir compte du potentiel coulombien. Le module TORA emprunte ce calcul au code CONRAD. Dans la méthode implémentée dans CONRAD, ces facteurs sont calculés à partir des fonctions régulières et irrégulières de Coulomb ainsi que leurs dérivées (Eq. (I.4.66) et (I.4.67) du chap. I [fonctions de Coulomb explicites avec $\eta \neq 0$]).

Energies négatives En-dessous de l'énergie de séparation du projectile (resp. éjectile), les facteurs de pénétrabilité sont nuls. Par contre, les valeurs des facteurs shifts ne le sont pas. La même procédure qu'au paragraphe IV.2.1.5 permet d'obtenir les fonctions de Coulomb [97] aux énergies négatives en considérant une valeur imaginaire pure pour ρ .

La valeur du nombre d'onde k est calculée dans le référentiel du laboratoire par

$$k_c = \frac{1}{\hbar} \left[\frac{2mM}{m+M} \left(E \frac{M}{m+M} - Q \right) \right]^{1/2} \in \mathbb{C} \quad (\text{IV.2.16})$$

Et dans le référentiel du CM unifié par

$$k_c = \frac{1}{\hbar} \left[\frac{2mM}{m+M} \left(E^{\text{CM}} - S_{\text{part.}} \right) \right]^{1/2} \in \mathbb{C} \quad (\text{IV.2.17})$$

Les voies de désexcitation radiatives Dans le traitement des voies photons, les P_ℓ sont pris égaux à l'unité [28, 62]. Les facteurs S_ℓ et ϕ_ℓ sont choisis nuls.

IV.2.1.6 La matrice des collisions U

U est calculé selon $U = \Omega W \Omega$ avec $W_{cc'} = P_c^{1/2} (\mathbf{I} - \mathbf{R}L)_{cc'}^{-1} (\mathbf{I} - \mathbf{R}L^*)_{cc'} P_{c'}^{-1/2}$ (cfr. (I.4.140) et (I.4.141) du chap. I) où $L = (S + iP - B)$ et B est un paramètre arbitraire. Le module TORA prend par défaut comme condition aux limites $B = S$. Le module permet toutefois de choisir une condition aux limites $B = -\ell$.

IV.2.2 Le formalisme Reich-Moore

IV.2.2.1 Les fichiers d'entrée et de sortie

Les fichiers d'entrée Seul le fichier des paramètres de résonance est modifié dans le cas d'un calcul Reich Moore. Les voies de désexcitations radiatives n'étant pas traitées de manière individuelle, le fichier des paramètres de résonance contient, à leur place, une largeur $\Gamma_{\lambda\gamma}$ ou une amplitude $\gamma_{\lambda\gamma}$ totale radiative attachée à chaque résonance λ . Le fichier intermédiaire est modifié en conséquence.

IV.2.2.2 Calcul de la matrice R réduite

La particularité du formalisme Reich-Moore par rapport à celui de la matrice R exacte repose sur le fait qu'une partie des voies γ est traitée statistiquement par une voie effective qui n'intervient pas dans la taille de la matrice R. Dans le système du laboratoire, l'élément de la matrice R dans le module TORA se présente de la manière suivante pour un J^π donné

$$R_{cc'}^{J^\pi} = \sum_{\lambda} \frac{\gamma_{\lambda c} \gamma_{\lambda c'}}{E_{\lambda} - E - i\gamma_{\lambda\gamma}^2} \quad (\text{IV.2.18})$$

où $\gamma_{\lambda\gamma}$ est l'amplitude réduite associée aux voies γ traitée de façon statistique. Dans le système du CM unifié, l'élément de la matrice R en approximation Reich-Moore se présente ainsi

$$R_{cc'}^{J^\pi} = \sum_{\lambda} \frac{\gamma_{\lambda c}^{\text{CM}} \gamma_{\lambda c'}^{\text{CM}}}{E_{x\lambda}^{\text{CM}} - E_x^{\text{CM}} - i \left(\gamma_{\lambda\gamma}^{\text{CM}} \right)^2} \quad (\text{IV.2.19})$$

IV.2.2.3 Calcul de la matrice U réduite

La taille de la matrice U est très réduite sous approximation Reich-Moore par rapport au cas matrice R exacte. Nous rappelons que l'approximation Reich-Moore a été proposée dans ce but [39]. Elle devient

$$U^{J^\pi} = \begin{bmatrix} U_{00} & U_{01} & U_{02} & \dots \\ U_{10} & U_{11} & U_{12} & \dots \\ U_{20} & U_{21} & U_{22} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{bmatrix} \quad (\text{IV.2.20})$$

Les indices 0, 1, 2, ... sont des étiquettes des voies ouvertes uniquement dans un sous-espace sans les voies photons.

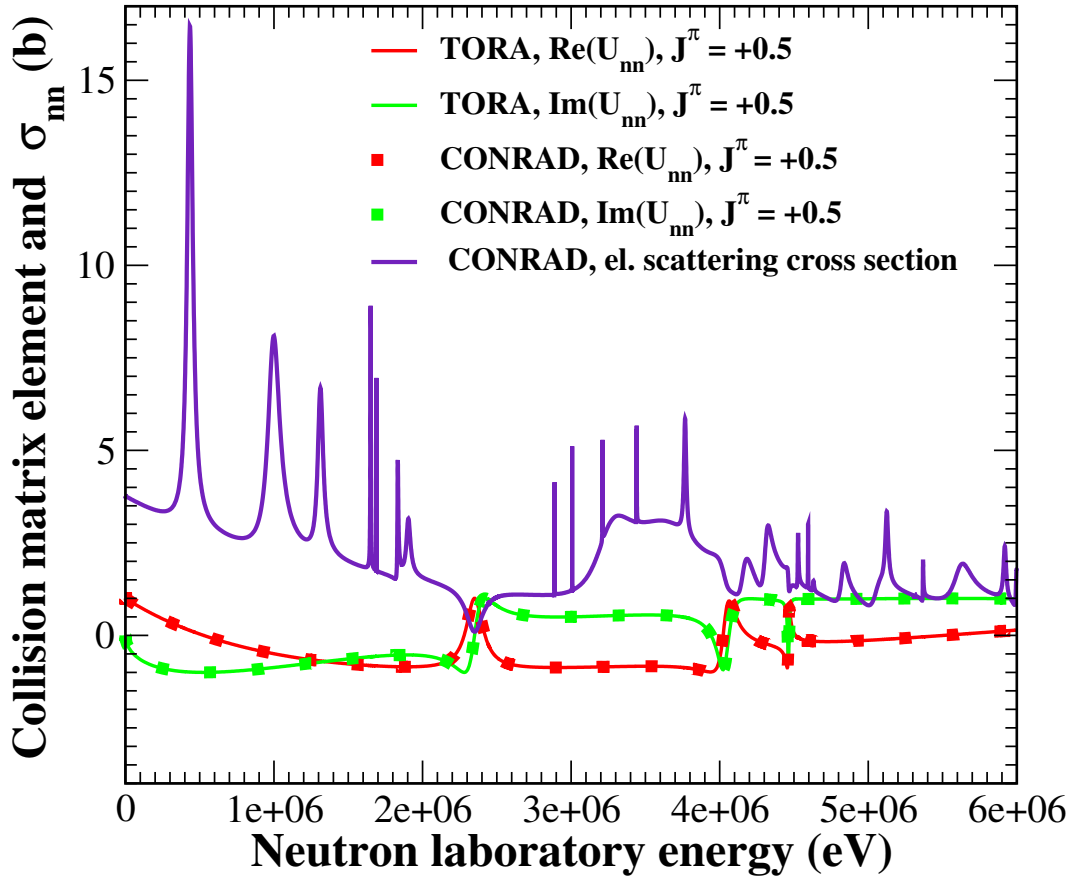


FIGURE IV.2.3 – Les éléments de la matrice des collisions de la voie $^{16}\text{O}(n, n)$ sous l'approximation Reich-Moore. Comparaison des résultats du code CONRAD et du module TORA. Les énergies sont exprimées dans le référentiel du laboratoire du neutron. La section efficace $^{16}\text{O}(n, n)$ est ajoutée pour mieux montrer le comportement des éléments de la matrice U par rapport à cette dernière.

La Fig. IV.2.3 montre les résultats des calculs des parties réelles et imaginaires de la matrice U pour la voie de diffusion élastique du neutron par ^{16}O . Seuls les résultats pour le couple $J^\pi = 0.5^+$ sont montrés ici pour ne pas alourdir les figures. Dans la plage d'énergie de 0-6 MeV, uniquement trois résonances du fichier JEFF33T3 [95] appartiennent à la famille du $J^\pi = 1/2^+$. Il s'agit des résonances situées à : 2.3678, 4.0541 et 4.4661 MeV.

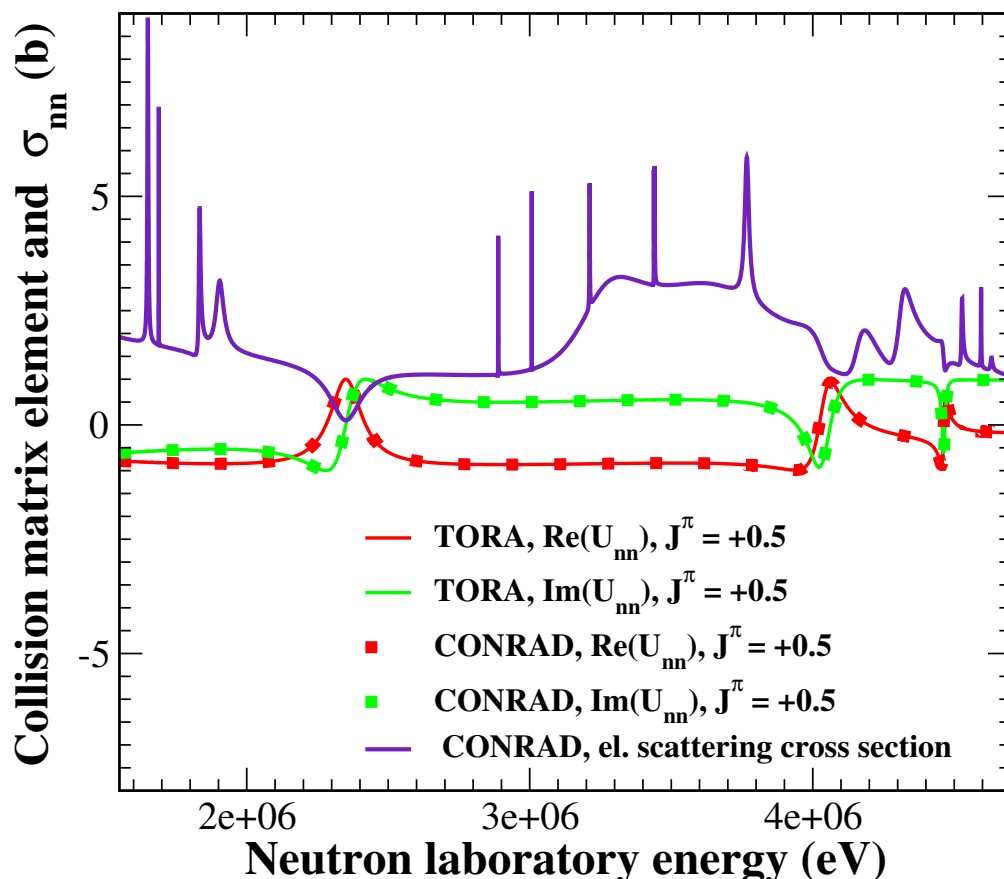


FIGURE IV.2.4 – Les éléments de la matrice des collisions de la voie $^{16}\text{O}(n,n)$ sous l'approximation Reich-Moore (agrandissement au niveau de trois résonances positives de $J^\pi = 1/2^+$). Comparaison des résultats du code CONRAD et du module TORA. Les énergies sont exprimées dans le référentiel du laboratoire du neutron. La section efficace $^{16}\text{O}(n,n)$ est ajoutée pour mieux montrer le comportement des éléments de la matrice U par rapport à cette dernière.

La Fig. IV.2.4 est un agrandissement de la Fig. IV.2.3 au niveau de la zone contenant les trois résonances. Les graphes des parties réelles et imaginaires de la matrice U montrent sans surprise des maxima et minima au niveau de la position des trois résonances concernées. Les maxima pour la partie réelle (en rouge) correspondent exactement aux minima des résonances correspondantes dans

la section efficace. Par contre les extrema de la partie imaginaire de la matrice U (en vert) présentent un léger décalage. La Fig. IV.2.5 montre les résultats des calculs des parties réelle (couleur rouge) et imaginaire (couleur verte) de la matrice U pour la voie $^{16}\text{O}(n, \alpha)$. Comme pour le cas de la voie de diffusion élastique, seuls les résultats pour le couple $J^\pi = 0.5^+$ sont montrés ici pour ne pas alourdir les figures et uniquement les trois résonances du fichier JEFF33T3 [95] appartenant à la famille du $J^\pi = 1/2^+$ sont considérées.

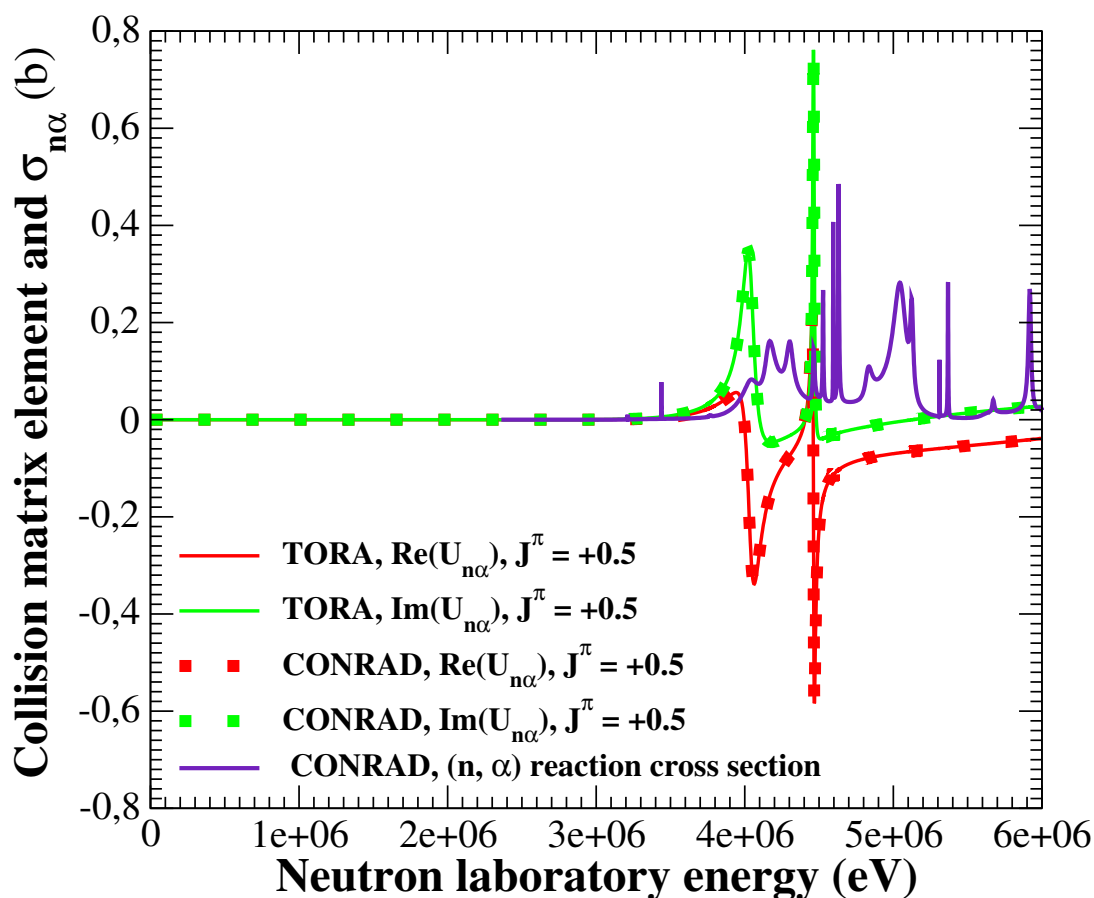


FIGURE IV.2.5 – Les éléments de la matrice des collisions de la voie $^{16}\text{O}(n, \alpha)$ sous l'approximation Reich-Moore. Comparaison des résultats du code CONRAD et du module TORA. Les énergies sont exprimées dans le référentiel du laboratoire du neutron. La section efficace $^{16}\text{O}(n, \alpha)$ est ajoutée pour mieux montrer le comportement des éléments de la matrice U par rapport à cette dernière.

La Fig. IV.2.6 est un agrandissement de la Fig. IV.2.5 au niveau de ces trois résonances. Les valeurs des parties réelle et imaginaire de la matrice U sont nulles dans la voie $^{16}\text{O}(n, \alpha)$ avant son ouverture. Cela est expliqué par le fait que les valeurs des facteurs de pénétrabilité dans la voie $^{16}\text{O}(n, \alpha)$ sont nulles en dessous

du seuil d'émission α , S_α . De manière surprenante, dans la plage d'énergie où les voies $^{16}\text{O}(n, n)$ et $^{16}\text{O}(n, \alpha)$ sont simultanément ouvertes, la comparaison entre les Fig. IV.2.4 et Fig. IV.2.6 montre que le minimum dans la voie de diffusion élastique correspond au maximum dans la voie $^{16}\text{O}(n, \alpha)$ et vice-versa pour les composantes réelles et imaginaires de la matrice U .

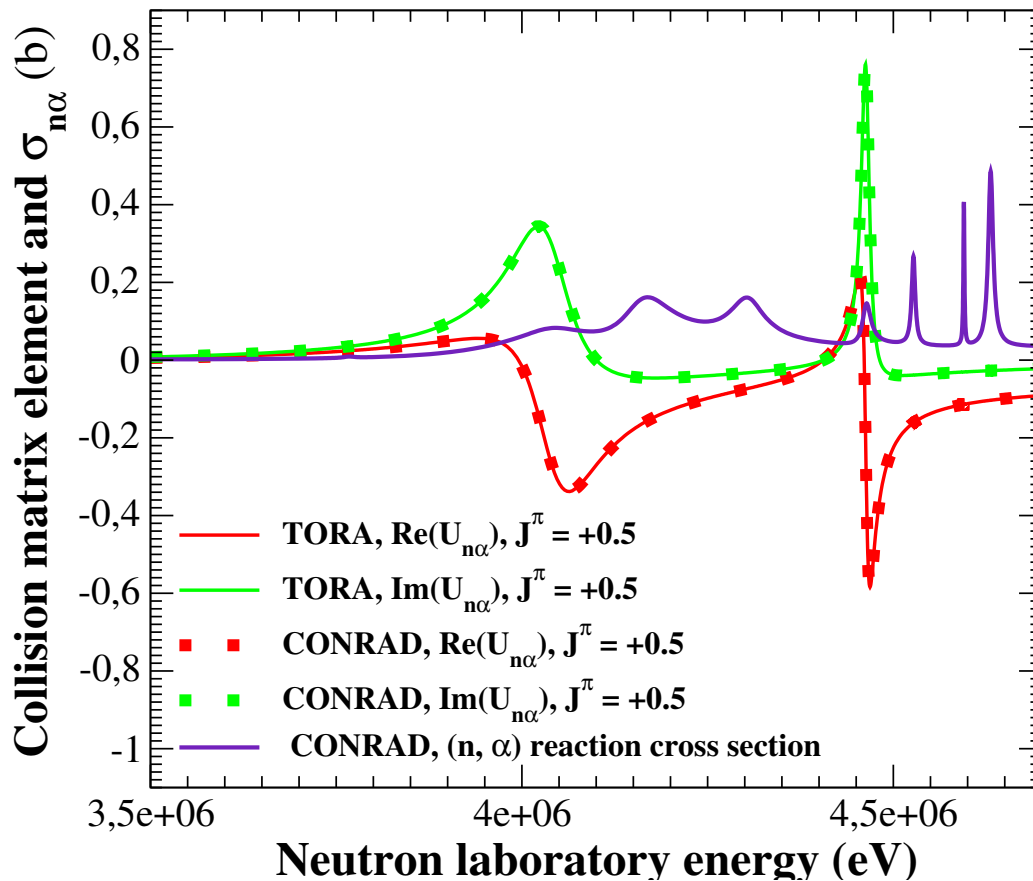


FIGURE IV.2.6 – Les éléments de la matrice des collisions de la voie $^{16}\text{O}(n, \alpha)$ sous l'approximation Reich-Moore (agrandissement au niveau de trois résonances positives de $J^\pi = 1/2^+$). Comparaison des résultats du code CONRAD et du module TORA. Les énergies sont exprimées dans le référentiel du laboratoire du neutron. La section efficace $^{16}\text{O}(n, \alpha)$ est ajoutée pour mieux montrer le comportement des éléments de la matrice U par rapport à cette dernière.

IV.3 Calcul des sections efficaces

Le module TORA a la capacité de calculer des sections efficaces intégrées à partir des paramètres de résonances en approximation Reich-Moore ou en matrice R exacte. Il calcule également les sections efficaces différentielles soit en calculant les

coefficients de Legendre à partir de la matrice des collisions U suivant le formalisme de Blatt et Biedenharn [35] soit à partir des coefficients des polynômes de Legendre fournis par l'utilisateur. Le calcul des sections efficaces s'effectue soit dans le système composé du CM (calcul par défaut), soit dans le système du laboratoire du projectile (resp. éjectile). Dans les paragraphes qui suivent, il sera présenté la validation du calcul de sections efficaces en Reich-Moore par TORA.

IV.3.1 Calcul des sections efficaces intégrées

Ce paragraphe concerne la validation du calcul des sections efficaces intégrées de TORA. Cela implique les sections efficaces neutroniques ou des particules chargées (diffusion élastique, réactions, de capture radiative et finalement de la section efficace totale). Les sections efficaces présentées ici sont calculées dans le référentiel unifié du CM et dans le référentiel du laboratoire du projectile (resp. éjectile).

IV.3.1.1 Section efficace neutronique de diffusion élastique

La section efficace partielle relative à la diffusion élastique dans le module TORA pour un J^π donné est calculée pour chaque voie c suivant la relation

$$\sigma_{cc}^{J^\pi} = \frac{\pi}{k_c^2} g_c \left| \delta_{cc} - U_{cc}^{J^\pi} \right|^2 \quad (\text{IV.3.1})$$

La section efficace de diffusion élastique (el) est sommée sur toutes les voies d'entrée et les voies de sortie possibles correspondant au même couple de particule qu'en voie d'entrée

$$\sigma_{el}^{J^\pi} = \sum_c \sum_{c'} \sigma_{cc'}^{J^\pi} \quad (\text{IV.3.2})$$

La double somme sur les voies c et c' est justifiée par le fait que pour les cas où le spin de la voie s prend plusieurs valeurs, nous avons plusieurs voies de diffusion élastique en entrée comme en sortie. La section efficace de diffusion élastique totale pour tous J^π du système composé est obtenue de la manière suivante

$$\sigma_{el} = \sum_{J^\pi} \sigma_{el}^{J^\pi} \quad (\text{IV.3.3})$$

Dans les relations (IV.3.1), (IV.3.2) et (IV.3.3), nous avons laissé de côté la dépendance en énergie du laboratoire (E_{Lab}) ou du référentiel unifié du CM (E_{CM}) uniquement dans le souci de clarté du texte. Les expressions (IV.3.1), (IV.3.2) et (IV.3.3) sont en effet valables dans le référentiel unifié du CM comme dans le référentiel du laboratoire du projectile. La Fig. IV.3.1 montre respectivement les résultats du calcul du module TORA comparés à ceux du code CONRAD et ceux du code NJOY pour la section efficace de diffusion élastique $^{16}\text{O}(n, n)^{16}\text{O}$ à 0 K dans le référentiel du laboratoire. Sur la Fig. IV.3.2, les calculs de TORA sont comparés à ceux du code NJOY pour la section efficace de diffusion élastique $^{23}\text{Na}(n, n)^{23}\text{Na}$,

également à 0 K. Les calculs pour l' ^{16}O ont été réalisés (par CONRAD et par TORA) sur des paramètres de résonance extraits du fichier JEFF33T3 évalué par L. C. Leal [95]. Un rayon unique recommandé par L. C. Leal, $a_c = 4,15$ fm a été utilisé pour le calcul des facteurs P_ℓ , S_ℓ et φ_ℓ . La reconstruction de la section efficace $^{16}\text{O}(n, n)^{16}\text{O}$ par NJOY a été directement réalisée sur le fichier JEFF33T3. Les résultats de TORA, du code CONRAD et du code NJOY pour la section efficace $^{16}\text{O}(n, n)^{16}\text{O}$ sont en bonne adéquation.

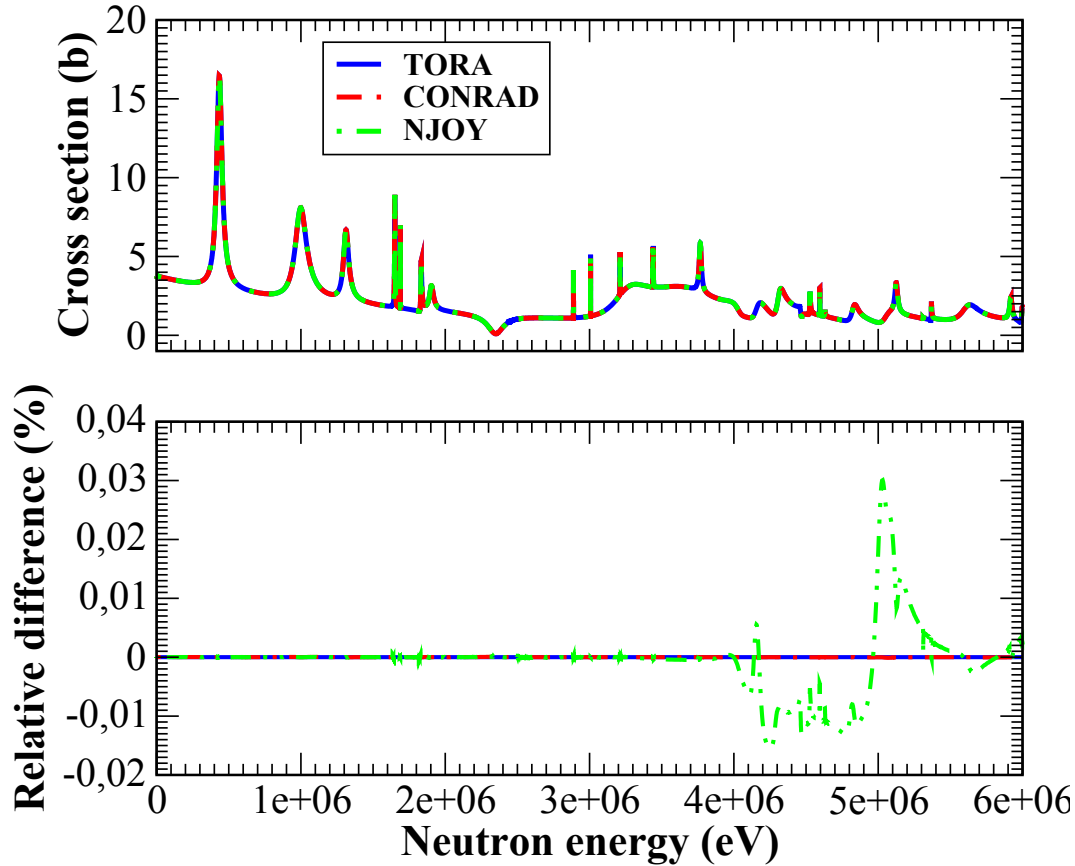


FIGURE IV.3.1 – Section efficace de la réaction $^{16}\text{O}(n, n)^{16}\text{O}$ calculée par TORA. Comparaison avec les sections efficaces issues des codes CONRAD et NJOY. Les énergies du neutron se trouve dans le système du laboratoire. Nous donnons la différence relative comme $\frac{\text{TORA}-\text{CONRAD}}{\text{TORA}} \times 100$ (pour TORA vs CONRAD) et $\frac{\text{TORA}-\text{NJOY}}{\text{TORA}} \times 100$ (pour TORA vs NJOY). Les différences relatives prennent pour référence le calcul de TORA.

Un regard sur les différences relatives pour la Fig. IV.3.1 montre que le calcul de TORA est très proche de celui de CONRAD. Par contre la comparaison à NJOY montre de légers écarts (jusqu'à 0,03 %) au dessus du seuil d'émission de la particule α ($S_\alpha \approx 2,35$ MeV sur l'échelle neutronique dans le référentiel du laboratoire).

Le calcul par TORA de la section efficace $^{23}\text{Na}(n, n)^{23}\text{Na}$ a été effectué sur des paramètres de résonances extraits du fichier évalué JEFF-3.3. Les calculs montrés sur la Fig. IV.3.2 ont été réalisés pour les énergies du laboratoire du neutron allant jusqu'à 459.3 keV (seuil d'ouverture du premier niveau inélastique). Dans cette plage d'énergies, le rayon de voie recommandé par le fichier JEFF-3.3 qui a été utilisé pour le calcul des facteurs P_ℓ , S_ℓ est $a_c = 4,287394$ fm. Pour les facteurs φ_ℓ , le fichier JEFF-3.3 recommande un rayon de diffusion $R' = 4,9$ fm. La reconstruction de la section efficace $^{23}\text{Na}(n, n)^{23}\text{Na}$ par NJOY a été directement effectuée sur le fichier JEFF-3.3. Ce fichier a été évaluée en approximation RM, ce qui permet la comparaison entre la section efficace reconstruite par NJOY et celle calculée en RM par TORA. Les résultats de cette comparaison sont montrés sur la Fig. IV.3.2.

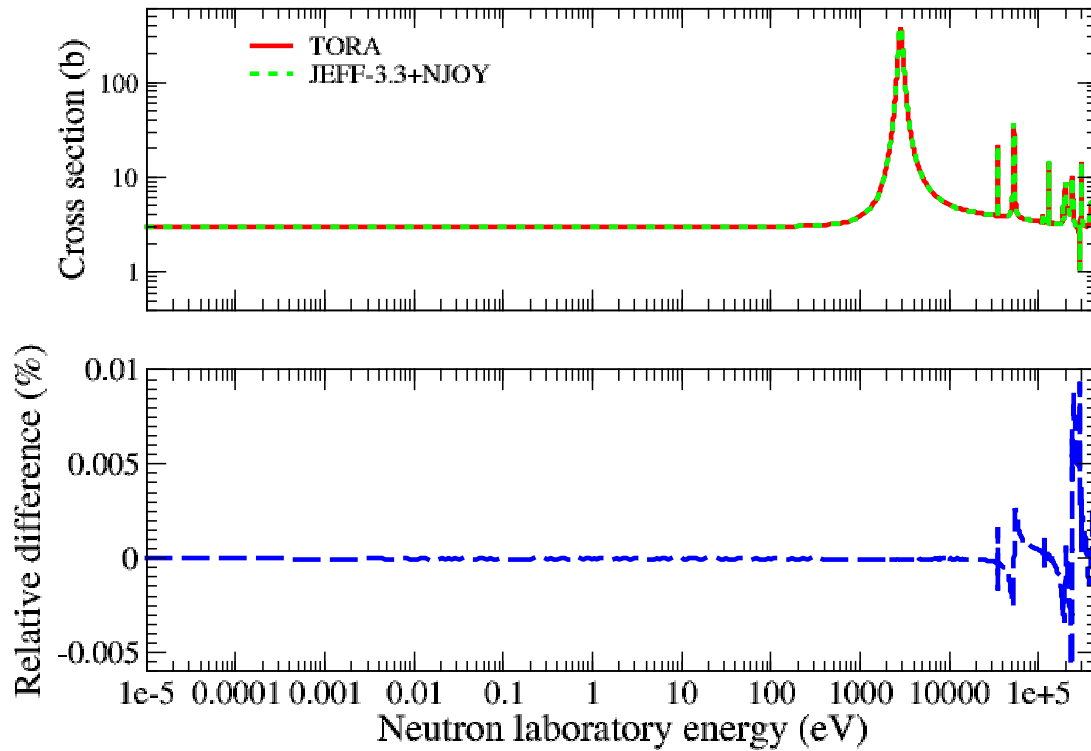


FIGURE IV.3.2 – Section efficace à 0 K de la réaction $^{23}\text{Na}(n, n)^{23}\text{Na}$ calculée à partir des paramètres de la bibliothèque JEFF-3.3. Comparaison avec la section efficace évaluée reconstruite par NJOY. Les énergies du neutron sont celles du référentiel du laboratoire. Les différences relatives prennent pour référence le calcul de TORA.

L'analyse des différences relatives montre une bonne adéquation entre la section efficace reconstruite par NJOY et celle calculée par TORA. Les écarts maximaux entre les deux sections efficaces sont de l'ordre de 10^{-2} %. Ils sont localisés sans surprise dans les résonances.

IV.3.1.2 Section efficace d'une réaction donnée

Nous commençons par rappeler ici que notre définition de la « réaction » est le processus d'absorption, différent de la capture radiative et de la fission, pour lequel la particule éjectée n'est pas de même nature que le projectile absorbé par la cible. Dans le module TORA, la section efficace d'une réaction de désexcitation du système composé de la voie c à la voie c' est obtenue dans le système du laboratoire de la manière suivante

$$\sigma_{cc'}^{J^\pi} = \frac{\pi}{k_c^2} g_c |U_{cc'}^{J^\pi}|^2 \quad (\text{IV.3.4})$$

La section efficace de la réaction sur toutes les voies d'entrée c et les voies de sortie c' est naturellement

$$\sigma_{\text{réac}}^{J^\pi} = \sum_c \sum_{c'} \sigma_{cc'}^{J^\pi} \quad (\text{IV.3.5})$$

La section efficace totale de la réaction sur tous les J^π du système composé est alors

$$\sigma_{\text{réac}} = \sum_{J^\pi} \sigma_{\text{réac}}^{J^\pi} \quad (\text{IV.3.6})$$

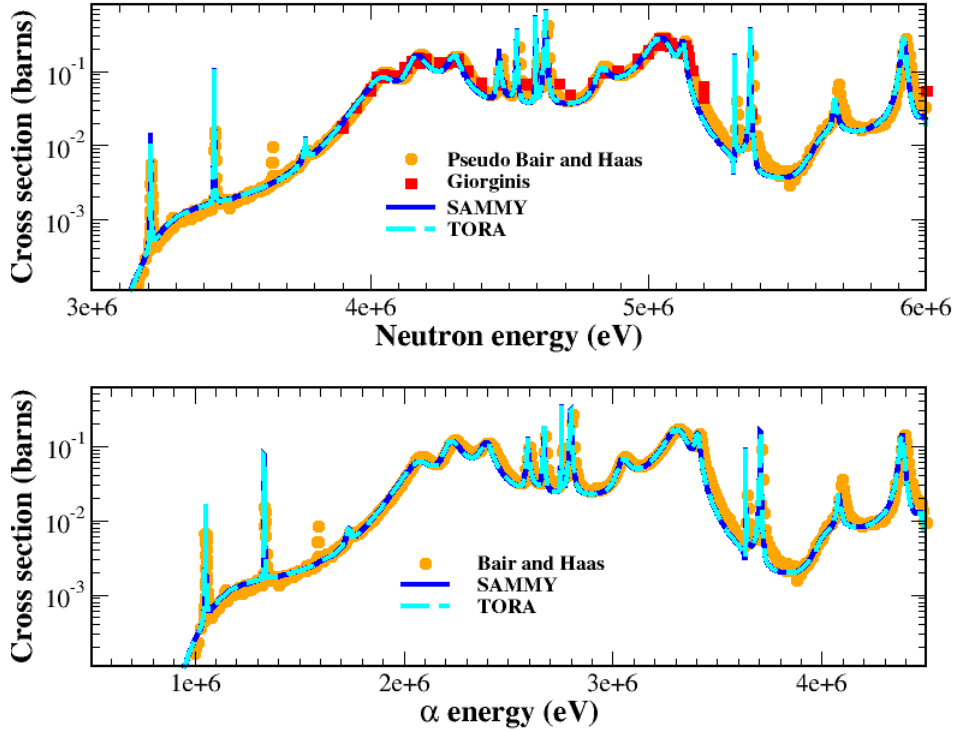


FIGURE IV.3.3 – Section efficace des réactions $^{16}\text{O}(n, \alpha)^{13}\text{C}$ et $^{13}\text{C}(\alpha, n)^{16}\text{O}$ calculée par le module TORA dans le référentiel du laboratoire. Comparaison avec les résultats des calculs issus du code SAMMY [62] et les données expérimentales de G. Giorginis [73] et de J. K. Bair et F. X. Haas [85].

Les Fig. IV.3.3 et Fig. IV.3.4 présentent les sections efficaces $^{16}\text{O}(n, \alpha)^{13}\text{C}$ et $^{13}\text{C}(\alpha, n)^{16}\text{O}$ calculées par le module TORA respectivement dans les référentiels du laboratoire (comparées à celles calculées par le code SAMMY et les sections efficaces expérimentales) et unifié du CM (comparées aux sections efficaces expérimentales dont un recalage des énergies a été effectué dans le système unifié).

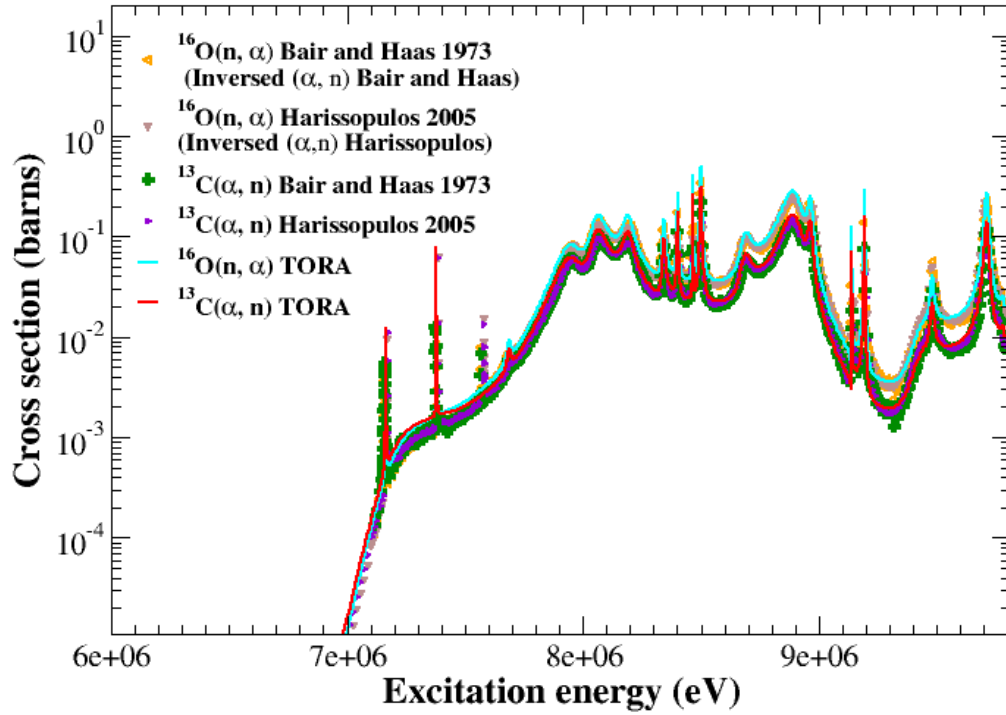


FIGURE IV.3.4 – Sections efficaces des réactions $^{16}\text{O}(n, \alpha)^{13}\text{C}$ et $^{13}\text{C}(\alpha, n)^{16}\text{O}$ calculées par le module TORA dans le référentiel du CM unifié. Comparaison aux données expérimentales de J. K. Bair et F. X. Haas [85] et de S. Harissopulos [86].

Dans le référentiel du laboratoire, la section efficace $^{16}\text{O}(n, \alpha)^{13}\text{C}$ est calculée avec des paramètres extraits du fichier JEFF33T3 et utilisés tels qu'évalués dans le référentiel neutronique. La section efficace $^{13}\text{C}(\alpha, n)^{16}\text{O}$, quant à elle, est calculée avec les paramètres du fichier JEFF33T3 convertis dans le référentiel du laboratoire de la particule α . La valeur du Q de la réaction dans le CM est déduite de $S_n = 4143890$ eV et $S_\alpha = 6359067$ eV. Le rayon de la voie $n+^{16}\text{O}$ est le même que celui utilisé pour calculer la section efficace de diffusion au paragraphe IV.3.1.1 ($a_c = 4, 15$ fm). Celui de la voie $\alpha + ^{13}\text{C}$ est également proposé dans le fichier JEFF33T3 ($a_c = 6, 6839$ fm). Dans le référentiel unifié du CM, les deux sections efficaces $^{16}\text{O}(n, \alpha)^{13}\text{C}$ et $^{13}\text{C}(\alpha, n)^{16}\text{O}$ sont simultanément calculées avec les paramètres communs extraits du fichier JEFF33T3 et convertis dans ce référentiel. Le système composé $^{17}\text{O}^*$ avec deux réactions réciproques ouvertes dans le RRR [$^{16}\text{O}(n, \alpha)^{13}\text{C}$ et $^{13}\text{C}(\alpha, n)^{16}\text{O}$] est ainsi parfaitement approprié pour

appliquer l'étude des sections efficaces dans le cadre du référentiel unifié du CM. Le principal avantage, qui repose sur la simultanéité et la cohérence de la modélisation, se remarque aisément en comparant les deux réactions sur les deux figures. Sur la Fig. IV.3.3, les résonances apparaissent à des énergies différentes et sont difficilement comparables, ce qui est plutôt normal étant donnée que les référentiels sont différents. Sur la Fig. IV.3.4, les résonances apparaissent au même endroit pour les deux réactions témoignant ainsi l'utilisation d'un jeu unique de paramètres de résonance pour leur modélisation.

IV.3.1.3 La section efficace totale

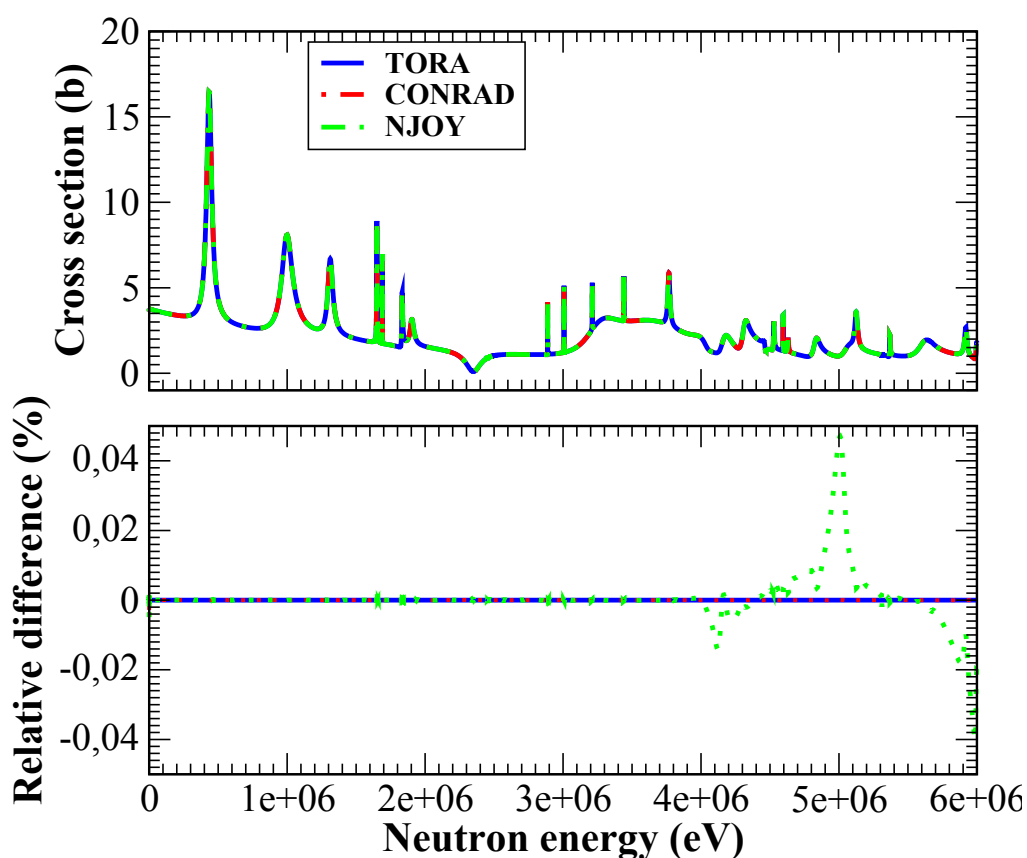


FIGURE IV.3.5 – Section efficace neutronique totale du système $(n + {}^{16}\text{O})$ calculée par TORA. Comparaison avec les sections efficaces des codes CONRAD et NJOY. Les différences relatives prennent pour référence le calcul de TORA.

La section efficace totale pour chaque J^π est calculée dans le référentiel du laboratoire ou unifié du CM pour une voie c en utilisant la relation

$$\sigma_{c,\text{tot}}^{J^\pi} = \frac{2\pi}{k_c^2} g_c \left[1 - \text{Re} \left(U_{cc}^{J^\pi} \right) \right] \quad (\text{IV.3.7})$$

La section efficace pour toutes les voies d'entrée c est obtenue de la manière suivante

$$\sigma_{\text{tot}}^{\text{J}^\pi} = \sum_c \sigma_{c,\text{tot}}^{\text{J}^\pi} \quad (\text{IV.3.8})$$

où nous omettons de mettre la dépendance en énergie pour les raisons évoquées aux paragraphes précédents. La section efficace pour tous les J^π du système composé est calculée ainsi

$$\sigma_{\text{tot}} = \sum_{\text{J}^\pi} \sigma_{\text{tot}}^{\text{J}^\pi} \quad (\text{IV.3.9})$$

Dans le cas Reich-Moore, nous n'avons pas la possibilité de comparer la section obtenue directement (Eq. (IV.3.7)) à la somme des sections efficaces partielles car les voies γ ne sont pas décrites explicitement. La Fig. IV.3.5 montre la section efficace totale calculée par le module TORA à 0 K. Elle est comparée à celles calculée par CONRAD et NJOY à 0 K. Ces sections efficaces sont dans le référentiel du laboratoire du neutron et ont été obtenues en utilisant les paramètres du fichier JEFF33T3 dans les mêmes conditions que celles décrites au paragraphe IV.3.1.1. Nous observons une bonne adéquation entre les trois sections efficaces. Comme pour le cas de la section efficace de diffusion élastique, les légers écarts observés sont entre le calcul de TORA et celui du code NJOY au dessus du seuil d'émission de la particule α . L'écart maximal est de l'ordre de 0,04%.

IV.3.1.4 La section efficace de capture

Les voies de désexcitation radiative étant non décrites explicitement en Reich-Moore, la section partielle de capture est obtenue en soustrayant toutes les sections partielles autres que la capture de la section efficace totale. Ainsi, dans le module TORA, la section efficace de capture pour une voie d'entrée c dans les systèmes du laboratoire ou du CM est donnée par

$$\sigma_{c\gamma}^{\text{J}^\pi} = \frac{\pi}{k_c^2} g_c \left\{ 2 \left[1 - \text{Re} \left(U_{cc}^{\text{J}^\pi} \right) \right] - \sum_{c' \neq \gamma} \left| \delta_{cc'} - U_{cc'}^{\text{J}^\pi} \right|^2 \right\} \quad (\text{IV.3.10})$$

La section efficace contenant les contributions de toutes les voies d'entrée c présentes est obtenue de la manière suivante

$$\sigma_\gamma^{\text{J}^\pi} = \sum_c \sigma_{c\gamma}^{\text{J}^\pi} \quad (\text{IV.3.11})$$

La section efficace de capture radiative qui comprend la contribution de tous les J^π du système composé est déduite

$$\sigma_\gamma = \sum_{\text{J}^\pi} \sigma_\gamma^{\text{J}^\pi} \quad (\text{IV.3.12})$$

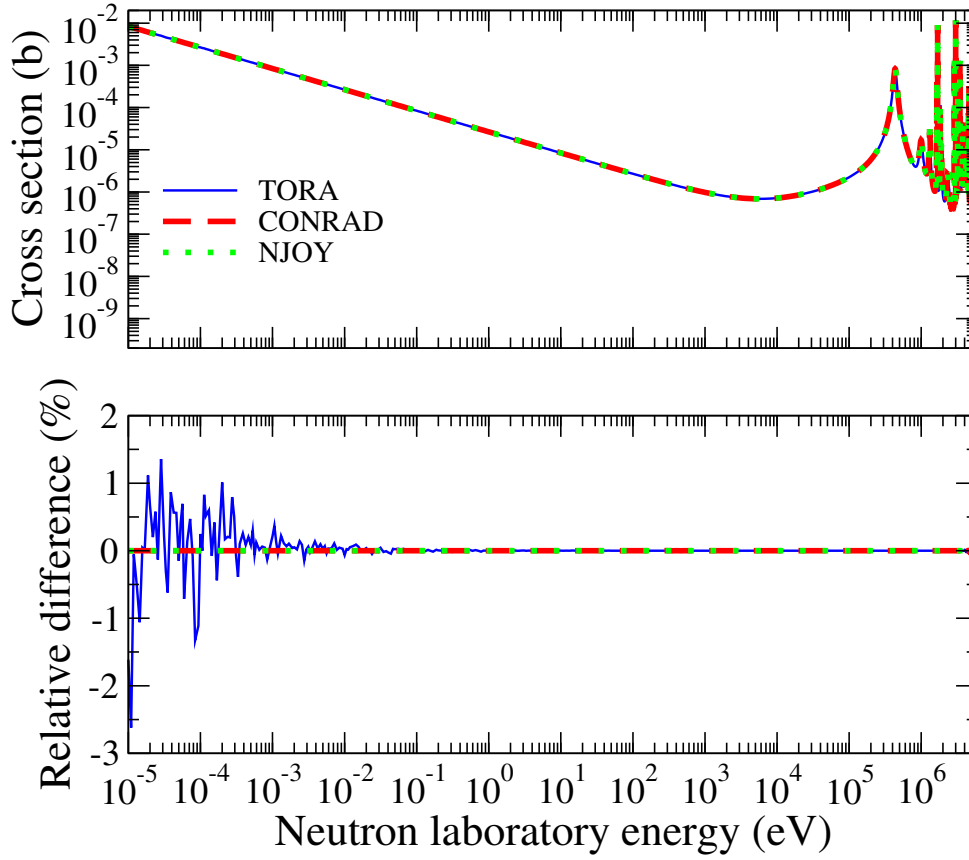


FIGURE IV.3.6 – Section efficace $^{16}\text{O}(n, \gamma)^{17}\text{O}$. Comparaison entre les résultats de calcul de TORA et des codes CONRAD et NJOY. Ici, les différences relatives prennent pour référence le calcul du code NJOY.

La Fig. IV.3.6 montre des résultats du calcul de la section efficace du module TORA $^{16}\text{O}(n, \gamma)^{17}\text{O}$ comparés aux sections efficaces calculées par CONRAD et NJOY à 0 K dans le référentiel du laboratoire du neutron. Ces sections efficaces sont obtenues avec les paramètres de JEFF33T3 utilisés dans les mêmes conditions qu'aux paragraphes IV.3.1.1 et IV.3.1.3. Le développement du module TORA a révélé un problème de fluctuations numériques sur la section efficace de capture calculée dans le formalisme Reich-Moore à basse énergie.

	TORA	CONRAD	NJOY
$\sigma_{\gamma}^{\text{th}}$ (b) à 0 K	1,6695e-04	1,6697e-04	1,6697e-04

TABLE IV.3.1 – Comparaison du résultat de calcul du module TORA et de ceux des codes CONRAD et NJOY pour la section efficace $^{16}\text{O}(n, \gamma)$ à l'énergie thermique ($E = 0,0253$ eV).

Ces fluctuations sont à l'origine des écarts que l'on observe sur la Fig. IV.3.6 entre TORA et les deux autres codes. Toutefois, elles n'ont pas d'impact pénalisant à l'énergie thermique (voir Tableau IV.3.1). Mis à part les écarts dus à ces fluctuations, les différences relatives montrées sur la Fig. IV.3.6 révèlent des profils similaires pour les calculs de TORA, CONRAD et NJOY.

La Fig. IV.3.7 présente les résultats du calcul de la section efficace $^{238}\text{U}(n, \gamma)^{239}\text{U}$ par le module TORA et comparée avec celle calculée par SAMMY à 0 K dans le référentiel du laboratoire du neutron. Les calculs sont effectués en utilisant les paramètres extraits de la bibliothèque JEFF-3.1. Le rayon de voie unique associé à ces paramètres et utilisé dans le calcul des facteurs P_ℓ , S_ℓ et φ_ℓ est $a_c = 9,45$ fm.

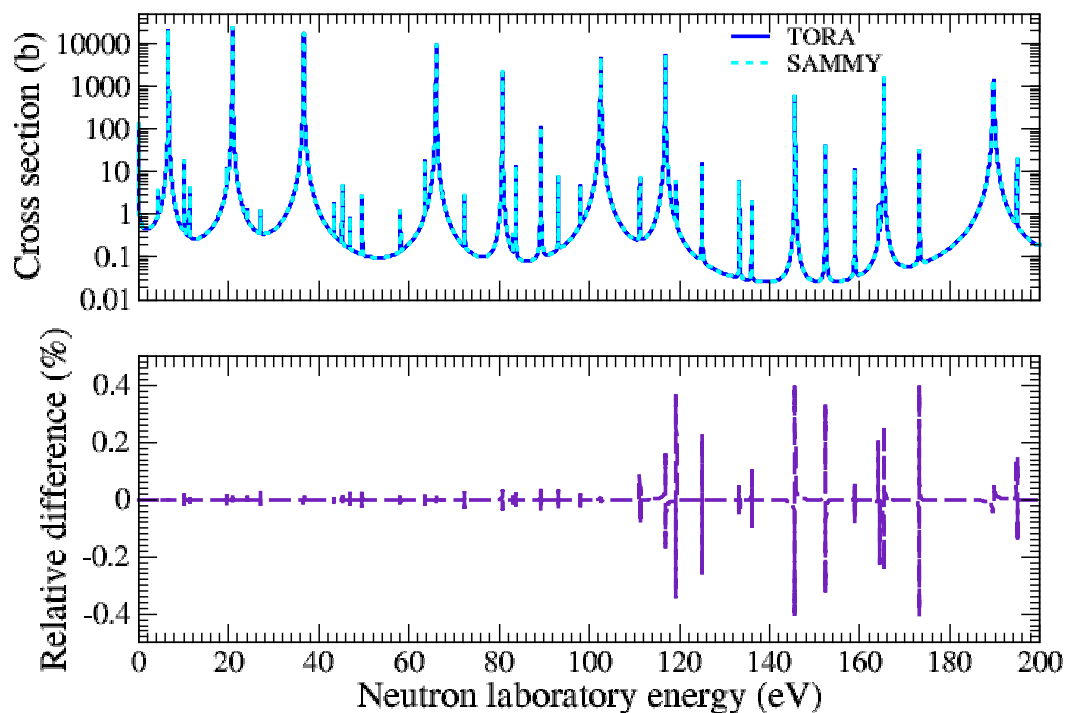


FIGURE IV.3.7 – Section efficace $^{238}\text{U}(n, \gamma)$ calculée par le module TORA. Comparaison avec les résultats de calcul du code SAMMY. Les différences relatives prennent pour référence le calcul de TORA.

Le problème de fluctuations numériques de la section efficace aux basses énergies ne s'observe pas pour le cas $^{238}\text{U}(n, \gamma)$ sûrement parce que la section efficace de capture est forte. De légers écarts, allant jusqu'à 0,4%, entre le calcul de TORA et du code SAMMY peuvent toutefois être relevés dans les résonances entre 120 et 200 eV.

IV.3.2 Calcul des sections efficaces différentielles en angle

Nous allons présenter dans ce paragraphe les méthodes de calcul des sections efficaces différentielles en angle implémentées dans le module TORA. Le calcul des sections efficaces est effectué à partir des paramètres de résonance en empruntant le formalisme de Blatt et Biedenharn [35]. Dans ce cadre, le module TORA prend en charge à la fois les sections efficaces angulaires de diffusion neutronique et particules chargées mais aussi celles des autres réactions partielles en angle. Les sections efficaces peuvent être également calculées à partir des coefficients des polynômes de Legendre.

IV.3.2.1 Traitement des particules neutres

Calcul de sections efficaces par le formalisme de Blatt et Biedenharn à partir des paramètres de résonance La section efficace neutronique différentielle de désexcitation d'un couple α de particules (projectile + cible) vers un couple α' de particules (éjectile + noyau résiduel) calculée sous le formalisme de Blatt et Biedenharn se présente ainsi

$$d\sigma_{\alpha\alpha'}(E) = \sum_L B_{L\alpha\alpha'}(E) P_L(\cos\theta_{CM}) d\Omega_{CM} \quad (IV.3.13)$$

Dans la relation (IV.3.13), P_L est le polynôme de Legendre de degré L . Ω_{CM} est l'angle solide dans le CM d'émission de l'éjectile appartenant au couple α' . $\cos\theta_{CM}$ est le cosinus de l'angle θ_{CM} de la direction dans laquelle est émis l'éjectile par rapport à la direction de la particule incidente. θ_{CM} est exprimé en radians dans le système du centre de masse. Si l'angle θ est fourni dans le système du laboratoire, la procédure de transformation vers le système du CM peut être trouvée dans la référence [28] et est bien détaillée dans la référence [62]. Pour exhaustivité, elle est reprise dans l'annexe C.

Les coefficients des polynômes de Legendre $B_{L\alpha\alpha'}(E)$ sont calculés en utilisant la matrice des collisions obtenue sur la base des paramètres de résonance (voir les sections IV.2.1.6 et IV.2.2.3). Ces coefficients se présentent de la manière suivante [62]

$$B_{L\alpha\alpha'}(E) = \frac{1}{4k_\alpha^2(E)} \sum_{J_1^\pi} \sum_{J_2^\pi} \sum_{c_1} \sum_{c'_1} \sum_{c_2} \sum_{c'_2} \frac{1}{(2i+1)(2I+1)} \\ \times G_{\{\ell_1 s_1 \ell'_1 s'_1 J_1\} \{\ell_2 s_2 \ell'_2 s'_2 J_2\} L} \left(\delta_{c_1 c'_1} - U_{c_1 c'_1} \right) \left(\delta_{c_2 c'_2} - U_{c_2 c'_2}^* \right) \quad (IV.3.14)$$

Dans la relation (IV.3.14), on effectue une double somme sur tous les J^π du système composé, une double somme sur les voies d'entrée c et une double somme sur les voies de sorties c' . $\delta_{c_1 c'_1}$ et $\delta_{c_2 c'_2}$ sont les symboles habituels de Kronecker.

Le calcul des termes dans (IV.3.14) est fastidieux et est pleinement documenté dans le manuel SAMMY ([62] , page 35). Pour exhaustivité, le détail des équations est remis dans l'annexe A. Néanmoins, nous insistons sur le fait que dans TORA cette partie a fait l'objet d'une réécriture complète et d'une validation exhaustive.

Il est important de préciser que, jusqu'ici, le système de référence (Lab ou CM) de l'angle θ (et de l'angle solide Ω) détermine le système de référence des sections efficaces $d\sigma(E)$; lesquelles sont toujours calculées dans le référentiel du CM mais peuvent être présentées dans l'un ou l'autre. Dans le module TORA, l'énergie de travail peut être aussi choisie soit dans le référentiel du laboratoire soit dans le référentiel du CM unifié

1. Système du laboratoire : $E \longrightarrow E_{\text{Lab}}$
2. Système du CM unifié : $E \longrightarrow E_{\text{CM}}$

Ainsi, par rapport au système de référence de l'énergie d'excitation dans le système composé, on récupère soit la section efficace $d\sigma(E_{\text{Lab}})$ soit la section efficace $d\sigma(E_{\text{CM}})$. Le Tableau IV.3.2 résume les différentes combinaisons d'observables

Options	Angle référentiel Lab	Angle référentiel CM
Energie référentiel Lab	$d\sigma_{(E_{\text{Lab}}, \theta_{\text{Lab}})}$	$d\sigma_{(E_{\text{Lab}}, \theta_{\text{CM}})}$
Energie référentiel CM unifié	$d\sigma_{(E_{\text{CM}}, \theta_{\text{Lab}})}$	$d\sigma_{(E_{\text{CM}}, \theta_{\text{CM}})}$

TABLE IV.3.2 – Différentes options de présentation des sections efficaces différentielles angulaires par le module TORA.

Nous nous sommes posé la question sur les choix des expérimentateurs par rapport aux différentes options. Le classement suivant les options du Tableau IV.3.2 des données expérimentales angulaires recueillies de la base EXFOR et présentées dans le chapitre III nous donne une vue sur ces choix. Les résultats du classement présentés dans Tableau IV.3.3 montrent que le choix qui domine repose sur un référentiel du CM vis-à-vis de l'angle et un référentiel du laboratoire vis-à-vis de l'énergie. La Fig. IV.3.8 montre la section efficace de diffusion élastique $^{16}\text{O}(n, n)$ différentielle en angle dans le référentiel du laboratoire calculée par TORA et comparée à celle calculée par CONRAD. Les paramètres de résonance utilisés par TORA et CONRAD sont ceux extraits du fichier JEFF33T3 présentés aux paragraphes précédents.

Options	Angle référentiel Lab	Angle référentiel CM
Energie référentiel Lab	Drigo et <i>al.</i> [78] (N°EXFOR : 20751002)	Okazaki [75] (N°EXFOR : 11392003) ; Johnson et Fowler [79](N°EXFOR : 114190023) ; Fowler et Cohn [77](N°EXFOR : 11401003, 11401002) ; Fowler et Johnson [80](N°EXFOR : 10028002) ; Kinney et Perey [81] (N°EXFOR : 10276002)
Energie référentiel CM unifié	-	-

TABLE IV.3.3 – Les choix des expérimentateurs détectés au regard des données se trouvant dans la base EXFOR par rapport aux différentes options du Tableau IV.3.2.

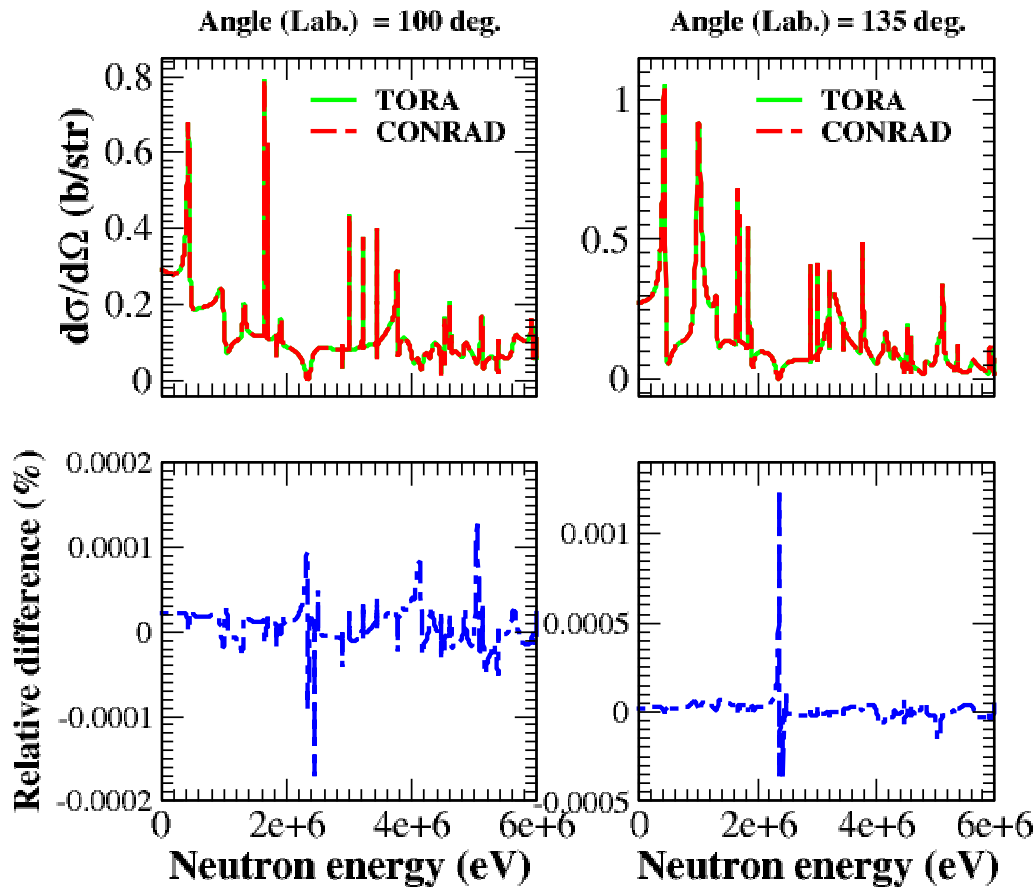


FIGURE IV.3.8 – Section efficace de la réaction $^{16}\text{O}(n, n)^{16}\text{O}$ calculée par TORA sur base des paramètres de résonances. Comparaisons aux résultats de calcul du code CONRAD. Les différences relatives prennent pour référence le calcul de TORA.

Les sections efficaces présentées sur cette figure sont calculées pour les angles 100 et 135 degrés. La comparaison au calcul de CONRAD montre des écarts relatifs faibles (de l'ordre de $10^{-3}\%$ pour les écarts les plus importants). L'écart se creuse au niveau de la fenêtre ("window") à 2,35 MeV et deux explications sont possibles, la première étant que cette fenêtre coïncide avec l'ouverture d'une nouvelle voie (l'émission de la particule α) et la seconde pouvant être le fait que la section efficace est très faible à ce niveau et donc sensible à de faibles problèmes purement numériques.

Le calcul de sections efficaces sur base de coefficients de Legendre Les paramètres tabulés pour le calcul des sections efficaces différentielles peuvent se présenter aussi sous forme de coefficients des polynômes de Legendre pour les données expérimentales comme pour les données évaluées. Le module TORA calcule la section efficace suivant la relation IV.3.13 où les coefficients $B_{L\alpha\alpha'}(E)$ ont été extraits par exemple directement des données expérimentales. Le calcul peut être effectué à n'importe quel angle grâce aux polynômes de Legendre $P_L(\cos\theta_{CM})$. La section efficace peut ensuite être convertie suivant la relation C.20 (annexe C) pour une représentation dans le système du laboratoire.

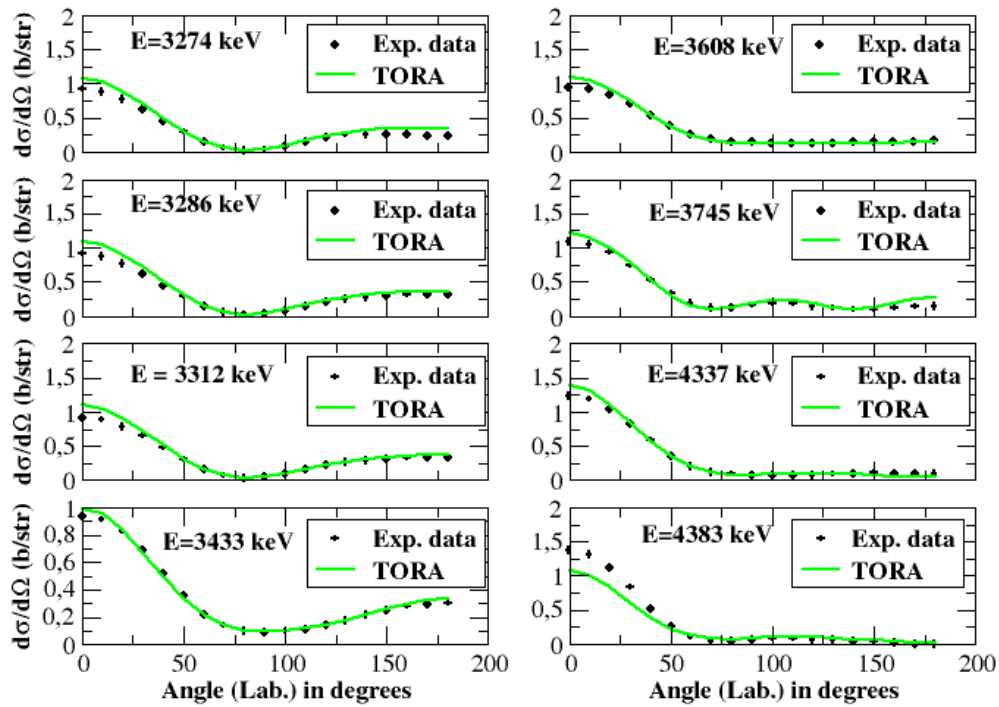


FIGURE IV.3.9 – Section efficace de la réaction $^{16}\text{O}(n, n)^{16}\text{O}$ calculée par TORA à partir des coefficients des polynômes de Legendre expérimentaux de Lister et Sayers (1966) [74]. Comparaison à la section efficace théorique $^{16}\text{O}(n, n)^{16}\text{O}$ différentielle en angle calculée par TORA à partir des paramètres de résonances extraits du fichier JEFF33T3.

La Fig. IV.3.9 montre la section efficace différentielle en angle calculée par TORA à partir des coefficients des polynômes de Legendre expérimentaux de Lister et Sayers [74]. Cette section efficace est comparée à celle calculée par TORA en utilisant les paramètres de résonances extraits du fichier JEFF33T3. La section efficace théorique est calculée sur les mêmes angles et les mêmes énergies que la section efficace reconstruite à partir des données expérimentales. Les sections efficaces obtenues à partir des coefficients des polynômes de Legendre expérimentaux sont présentées sur les courbes en pointillé (couleur noire) et les sections efficaces calculées théoriquement sous le formalisme de Blatt et Biedenharn à partir des paramètres de résonances sont présentées sur les courbes pleines (couleur verte). Ces sections efficaces sont calculées pour les angles du référentiel du laboratoire allant de 0 à 180 degrés. Une comparaison à l'œil relève les écarts les plus importants aux angles extrêmes (autour de 0° et vers 180°). Pour le reste, les sections efficaces issues des données expérimentales et celles issues du calcul théorique montrent des profils similaires.

IV.3.2.2 Traitement des particules chargées

L'expression qui se dégage du formalisme de Blatt et Biedenharn pour la section efficace différentielle en angle d'un processus dans lequel le projectile et/ou l'éjectile est une particule chargée comprend trois parties : une partie résonnante, une partie comptant pour la diffusion purement coulombienne et une partie d'interférence entre la partie coulombienne et la partie résonnante. La section efficace est calculée ainsi [62]

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma_{\alpha\alpha'}}{d\Omega_{CM}} &= \sum_L B_{L\alpha\alpha'}(E) P_L(\cos\theta_{CM}) + \frac{\pi}{k_\alpha^2} |C_\alpha(\theta_{CM})|^2 \delta_{\alpha\alpha'} \\ &+ \frac{\sqrt{4\pi}}{k_\alpha^2} \sum_{J^\pi} \sum_c g_c \operatorname{Re} \left[-i \left(\frac{e^{2i\omega_{\ell\alpha}} - U_{cc}}{2} \right) C_\alpha^* P_\ell(\cos\theta_{CM}) \right] \delta_{\alpha\alpha'} \end{aligned} \quad (\text{IV.3.15})$$

$\omega_{\ell\alpha}$ est le facteur de décalage de phase coulombien calculé suivant la relation (I.4.150) et g_c est le facteur de spin établi par la relation I.4.153. La partie résonnante est le fruit de la somme sur tous les degrés L des polynômes de Legendre du produit entre les coefficient $B_{L\alpha\alpha'}(E)$ et les polynômes de Legendre $P_L(\cos\theta)$. Les coefficients des polynômes de Legendre $B_{L\alpha\alpha'}(E)$ pour les particules chargées diffèrent de ceux des neutrons uniquement par la présence du terme de diffusion coulombienne $e^{2i\omega_{\ell\alpha}}$. Ils sont calculés suivant l'expression

$$\begin{aligned} B_{L\alpha\alpha'} &= \frac{1}{4k_\alpha^2} \sum_{J_1^\pi} \sum_{J_2^\pi} \sum_{c_1} \sum_{c'_1} \sum_{c_2} \sum_{c'_2} \frac{1}{(2i+1)(2I+1)} \times G_{\{\ell_1 s_1 \ell'_1 s'_1 J_1\} \{\ell_2 s_2 \ell'_2 s'_2 J_2\} L} \\ &\times \operatorname{Re} \left[\left(e^{2i\omega_{\ell\alpha}} \delta_{c_1 c'_1} - U_{c_1 c'_1} \right) \left(e^{-2i\omega_{\ell\alpha}} \delta_{c_2 c'_2} - U_{c_2 c'_2}^* \right) \right] \end{aligned} \quad (\text{IV.3.16})$$

Le coefficient $G_{\{\ell_1 s_1 \ell'_1 s'_1 J_1\} \{\ell_2 s_2 \ell'_2 s'_2 J_2\}}$ est calculé par la relation A.1.

Le coefficient de diffusion purement coulombienne qui apparaît dans le second et le troisième terme est ainsi calculé [62, 1]

$$C_\alpha = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \eta_\alpha \left(\frac{1}{\sin \theta_{CM}} \right)^2 \left(\frac{\theta_{CM}}{2} \right) e^{-2i\eta_\alpha \ln \left[\sin \left(\frac{\theta_{CM}}{2} \right) \right]} \quad (\text{IV.3.17})$$

η_α est le paramètre de Coulomb donné par la relation I.4.148. On constate immédiatement de cette formule que le calcul de C_α à 0° n'est pas défini et par voie de conséquence, le calcul de la section efficace intégrée sur les angles pour une particule chargée tend vers l'infini. Les considérations pour les changements de référentiel ($CM \rightleftharpoons LAB$) explicités au paragraphe précédent (paragraphe IV.3.2.1) pour la section efficace différentielle angulaire restent valables pour le traitement des projectiles chargés.

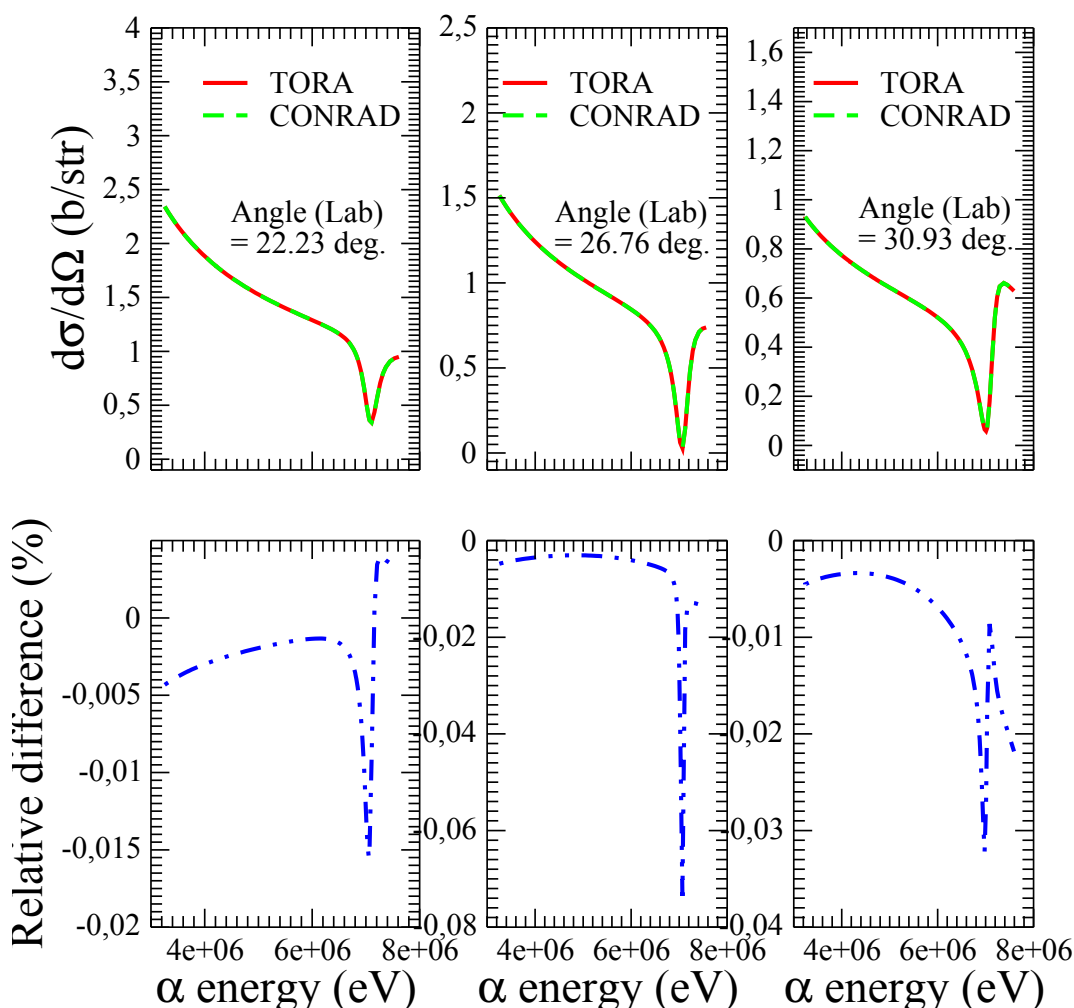


FIGURE IV.3.10 – Section efficace différentielle angulaire calculée sur la base des paramètres de résonance du système ($^3\text{He} + ^4\text{He}$) par TORA. Comparaison aux résultats du code CONRAD. Les différences relatives prennent pour référence le calcul de TORA.

La Fig. IV.3.10 montre les résultats du calcul de la section efficace différentielle angulaire ${}^3\text{He}(\alpha, \alpha){}^3\text{He}$ calculée par TORA dans le référentiel du laboratoire avec les paramètres de résonance présentés au paragraphe III.4.2. Les résultats sont comparés avec celle calculée par le code CONRAD. Les calculs des deux codes sont effectués sur une grille et les angles extraits de données expérimentales de A. C. L. Barnard et *al.* [87]. Les différences relatives montrées sur la Fig. IV.3.10 révèlent des profils proches entre le calcul de TORA et celui de CONRAD. Les plus grands écarts sont de l'ordre de 10^{-2} %. Sans surprise, l'écart maximal s'observe à l'endroit où le profil de la section efficace présente un extremum (ici un minimum, la courbe se creuse dû à la présence d'une résonance destructive). Les calculs sont effectués pour les conditions aux limites $B_c = -\ell$.

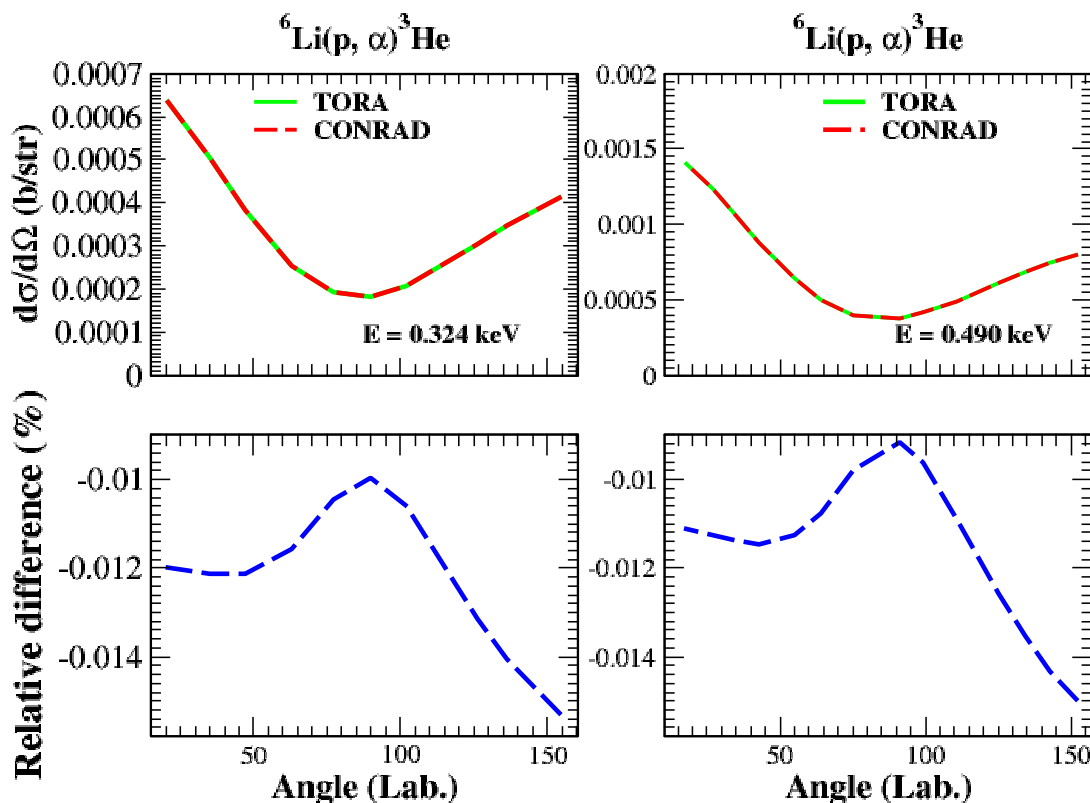


FIGURE IV.3.11 – Section efficace différentielle angulaire calculée sur la base des paramètres de résonances du système $(p + {}^6\text{Li})$ par TORA. Comparaison aux résultats du code CONRAD. Les différences relatives prennent pour référence le calcul de TORA.

La Fig. IV.3.11 montre les résultats du calcul de la section efficace différentielle angulaire ${}^6\text{Li}(p, \alpha){}^3\text{He}$ calculée par TORA dans le référentiel du laboratoire avec les paramètres de résonance présentés au paragraphe III.4.2. Les résultats sont

comparés avec celle calculée par le code CONRAD. Les calculs des deux codes sont effectués sur une grille et les angles extraits de données expérimentales de A. J. Elwyn et *al.* [91]. La comparaison du calcul de TORA et de CONRAD sur la Fig. IV.3.11 montre des écarts faibles (de l'ordre de $10^{-2}\%$). Les écarts maximaux sont localisés à l'angle de 100 degrés sans doute parce que la section efficace calculée pour cette valeur est la plus faible. Comme pour la voie ($^3\text{He} + ^4\text{He}$), les calculs sont réalisés pour les conditions aux limites $B_c = -\ell$.

La Fig. IV.3.12 présente le calcul de la section efficace différentielle angulaire $^6\text{Li}(p, p)^6\text{Li}$ calculée par TORA dans le référentiel du laboratoire avec les paramètres de résonance présentés au paragraphe III.4.2. Les résultats sont comparés avec la section efficace calculée par le code SAMMY. Les calculs des deux codes sont effectués sur une grille et les angles extraits de données expérimentales de J. A. McCray [90].

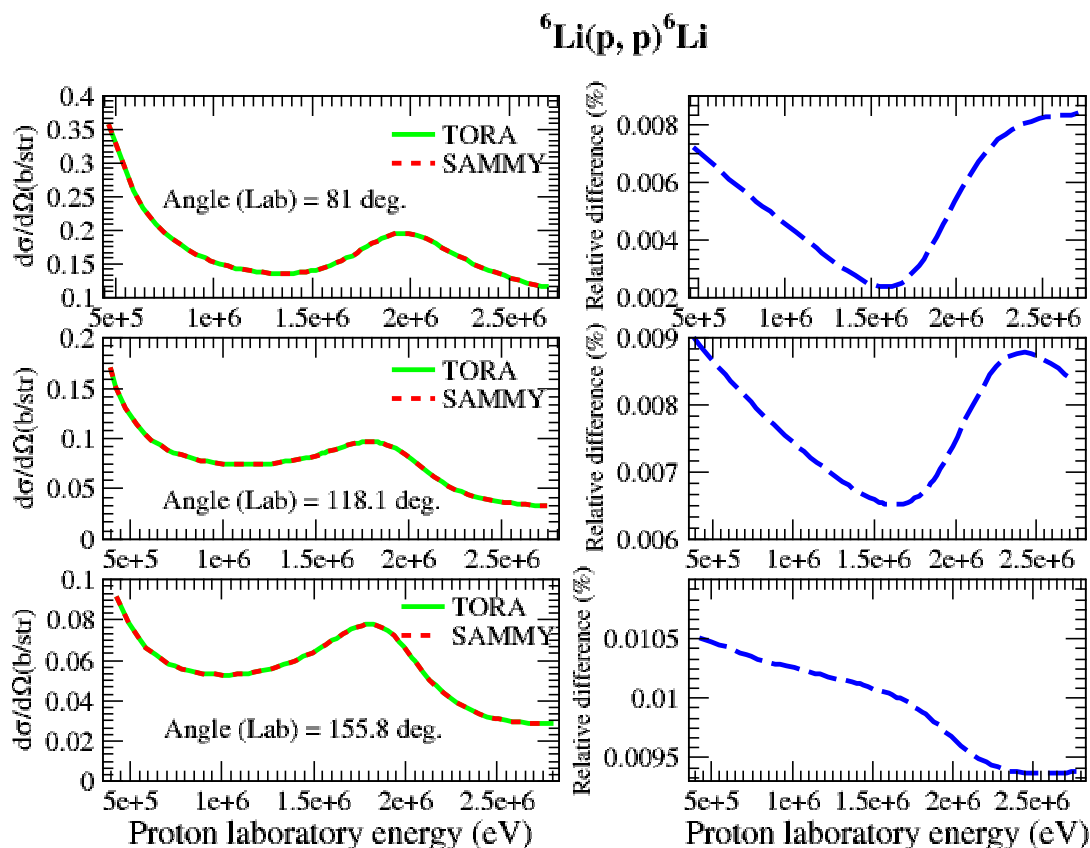


FIGURE IV.3.12 – Section efficace différentielle angulaire calculée sur la base des paramètres de résonances du système $(p + ^6\text{Li})$ par TORA. Comparaison aux résultats du code SAMMY. Les différences relatives prennent pour référence le calcul de TORA.

Les différences relatives montrées sur la Fig. IV.3.12 révèlent une bonne adéquation entre les calculs de TORA et du code SAMMY pour la voie ${}^6\text{Li}(p, p){}^6\text{Li}$. Les écarts maximaux sont de l'ordre $10^{-2}\%$. Les comparaisons avec SAMMY montrées sur la Fig. IV.3.12 ont été réalisées en prenant les conditions aux limites $B_c = S_c$.

IV.4 Conclusion sur le chapitre

Le présent chapitre donne une description exhaustive des formalismes de calcul des sections efficaces nouvellement implémentés dans le module TORA (*TOols for Reactions Analysis*) et les résultats de la validation de ce dernier. La construction de ce module a été pensée dans l'objectif de réaliser des calculs des sections efficaces dans un référentiel commun du CM du système composé excité pour toutes les réactions impliquant un même noyau composé. Cette approche diffère des méthodes historiques d'évaluation des sections efficaces neutroniques qui s'appuient sur le référentiel du laboratoire lié au projectile.

Dans ce chapitre, les calculs des sections efficaces réalisés dans le cadre de la validation du module pour les deux systèmes de référence (LAB ou CM) ont été présentés pour les systèmes composés ${}^{17}\text{O}^*$, ${}^7\text{Be}^*$, ${}^{24}\text{Na}^*$, et ${}^{239}\text{U}^*$.

Bien que la tâche de ré-écriture d'un module de calcul des sections efficaces à partir pratiquement d'une page blanche puisse paraître de faible valeur ajoutée, hormis une conception originelle dans le CM du système composé, la confrontation des résultats avec ceux de ses prédécesseurs SAMMY-8 et CONRAD, a permis ponctuellement de pointer quelques anomalies. Un exemple de ces anomalies est la fluctuation numérique de la section efficace de capture observée à basse énergie (visible sur Fig. IV.3.6). Dans le cas de la section efficace ${}^{16}\text{O}(n, \gamma)$, elle n'a pas d'impact important sur la valeur de la section à l'énergie thermique comme montré dans le Tableau IV.3.1.

L'applicabilité de la nouvelle approche du système de référence unifié a été démontrée par un calcul cohérent et simultané des sections efficaces des réactions ${}^{16}\text{O}(n, \alpha){}^{13}\text{C}$ et ${}^{13}\text{C}(\alpha, n){}^{16}\text{O}$ qui partagent le même noyau composé ${}^{17}\text{O}^*$ (Fig. IV.3.4).

De ce travail de validation des sections efficaces dans des systèmes de référence variés, il ressort de l'exercice de confrontation entre différents systèmes de référence des données expérimentales différentielles de la base de données EXFOR que les expérimentateurs préfèrent la tabulation des données dans le référentiel du CM pour les angles et dans le référentiel du laboratoire pour l'énergie du projectile (voir Tableau IV.3.3).

Chapitre V

Premiers apports du code

V.1 Introduction

La finalité de notre travail réside dans la démonstration de la validité de notre méthode de calcul impliquant le centre de masse du référentiel unifié avec comme perspective un réajustement des paramètres de résonance du système composé $^{17}\text{O}^*$ sur la base expérimentale décrite au chapitre III à la différence près que les résultats seront exprimés sous forme d'amplitudes réduites avec comme échelle en énergie, l'énergie d'excitation du système. Le choix du système $^{17}\text{O}^*$ a été par ailleurs longuement explicité. Ce travail profite de manière très avantageuse de la disponibilité des paramètres récemment évalués par L. C. Leal [38, 95]. C'est pour cette raison d'ailleurs que nous ne parlerons que de ré-analyse de données au cours de notre démonstration. Le caractère récent de l'évaluation de L. C. Leal présente pour nous un double avantage : nous disposons d'une part d'un jeu de paramètres *a priori* de qualité et d'autre part de ce même jeu comme référence pour la normalisation des mesures.

L'objectif de ce chapitre est de présenter les démarches en amont du travail d'ajustement proprement dit. Un travail d'ajustement consiste à reproduire par le calcul l'observable mesurée dans des conditions expérimentales spécifiques. Cela passe par une recherche bibliographique autour de la mesure analysée afin de préciser le contexte de la mesure (longueur de la base de vol, nature de la cible de production des neutrons, du modérateur des neutrons, de l'échantillon étudié, du détecteur comptant les événements, de la température, etc.). Ces conditions expérimentales caractérisent notamment la résolution en énergie de l'expérience et le niveau d'effet Doppler. C'est leur impact que nous allons évaluer dans la première partie de ce chapitre. Nous rappelons que le module TORA est raccordé au système de fonctionnalités CONRAD qui place en situation expérimentale les sections efficaces nucléaires calculées de TORA par convolution avec les fonctions d'élargissements Doppler et résolution énergétique. Après cette vérification, nous définirons la procédure à suivre pour permettre un ajustement de qualité en

s'assurant du respect de la signification physique des paramètres et détaillerons en particulier le traitement des niveaux extérieurs au domaine énergétique d'analyse en déployant une méthode originale.

V.2 Mise en situation expérimentale de la section efficace nucléaire

V.2.1 Effet Doppler

En situation expérimentale, les noyaux de la cible vus par le projectile dans le système du laboratoire ne sont pas au repos. Cela provient de l'agitation thermique due à la température à laquelle est faite l'expérience (généralement la température ambiante). Ce phénomène bien connu est décrit sous la dénomination d'*effet Doppler* et la section efficace observée dans cette situation doit être élargie par rapport à celle observée à la température $T = 0$ K. A travers le modèle simple du gaz libre, la section efficace élargie par effet Doppler est calculée ainsi

$$\sigma(E) \approx \frac{1}{\Delta\pi} \int_{-\infty}^{\infty} S(E, E') \sigma(E') dE' \quad (\text{V.2.1})$$

où

$$\Delta = \sqrt{\frac{4Ek_B T m_n}{M}} \quad (\text{V.2.2})$$

Δ , E , k_B , T , m_n et M sont respectivement la largeur Doppler, l'énergie du neutron, la constante de Boltzmann, la température de l'échantillon, la masse du noyau de la cible au repos et la masse du neutron. La fonction $S(E, E')$ est appelée fonction de transfert d'énergie. Elle est donnée par l'expression

$$S(E, E') = e^{-\left(\frac{E'-E}{\Delta}\right)^2} \sqrt{\frac{E'}{E}} \quad (\text{V.2.3})$$

avec l'énergie E' , l'énergie transférée au noyau cible. La convolution de la section efficace du noyau au repos par $S(E, E')$ retourne la valeur de la section efficace mesurée à la température T . Dans cette analyse, nous avons vérifié l'impact de l'effet Doppler sur le calcul de section efficace. Pour illustrer notre propos, nous comparons (voir la Fig. V.2.1) les sections efficaces neutroniques de l'oxygène 16 à 0 K et 293.6 K pour deux résonances étroites à une énergie représentative de notre analyse (4,5 MeV). Très peu d'impact constaté [les différences relatives entre les deux sections efficaces sont faibles ($\sim 1\%$)]. Nous reviendrons sur ce point dans la rubrique suivante.

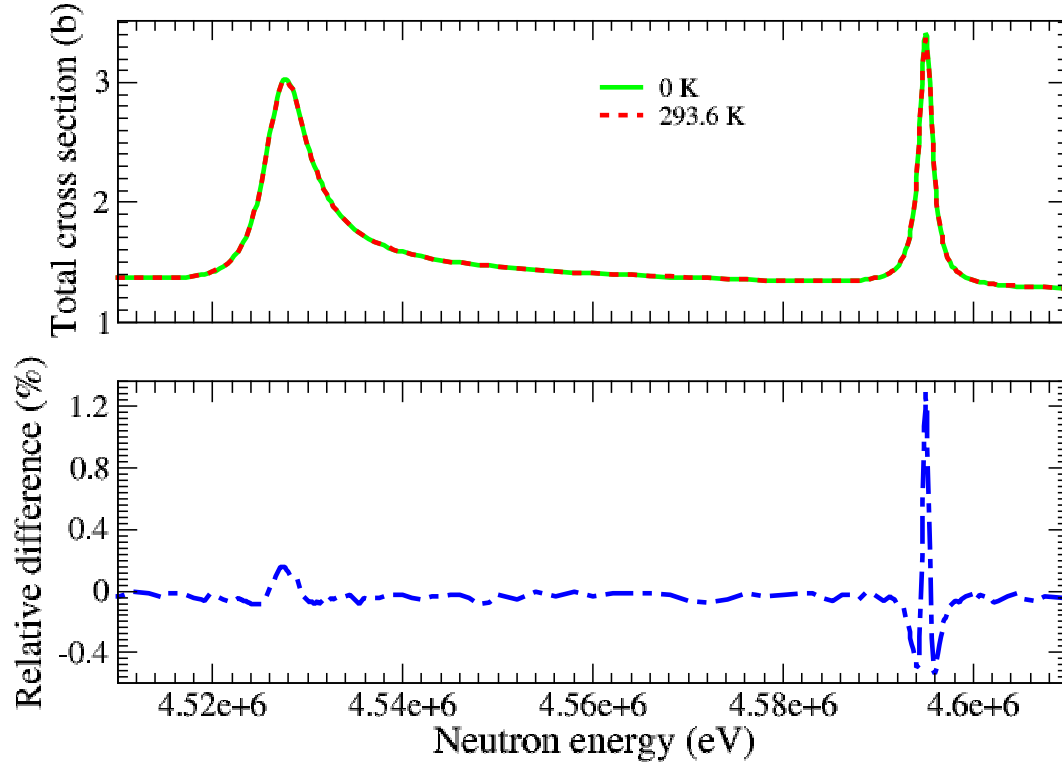


FIGURE V.2.1 – Influence de l'effet Doppler pour deux résonances étroites dans la mesure de la section efficace neutronique totale de l' ^{16}O .

V.2.2 Fonction de résolution en énergie

La résolution en énergie d'une expérience correspond à l'incertitude finale sur le temps de vol (TOF) de détection de l'événement mesuré. La fonction de résolution est constituée des contributions des convolutions des composantes de toutes les sources d'incertitudes. Les fonctions analytiques de résolution choisies peuvent être différentes d'un code à l'autre et peuvent être dédiées à une installation expérimentale existante. Pour mieux illustrer le concept, nous allons faire une comparaison entre la fonction de résolution de l'accélérateur linéaire du laboratoire national d'Oak Ridge ORELA (*Oak Ridge Electron Linear Accelerator*) implémentée dans le code SAMMY-8 [62] et la fonction de résolution de l'accélérateur GELINA de JRC (*Joint Research Centre*) à Geel implémentée dans le code REFIT. Cette fonction de résolution est largement commentée dans la thèse de G. Noguère [98].

• Fonction de résolution de SAMMY-8/ORELA

La fonction de résolution associée à l'accélérateur ORELA est implémentée dans le code SAMMY-8 à travers quatre composantes

1. La composante associée à la largeur de la bouffée d'électrons (en anglais *burst*) : cette composante est une fonction de forme carrée en temps ;
2. a) La composante associée à la cible (Tantale) produisant les neutrons par réaction (γ, n) : sa forme paramétrique a été modélisée suivant une procédure de Monte Carlo suite à une recommandation par F. G. Perey [62] ;
 b) La composante associée au modérateur (H_2O) : sa contribution à la fonction de résolution totale se traduit par fonction en χ^2 à $(2m+1)$ degrés de liberté. La valeur par défaut de m est 4. La valeur du libre parcours moyen des neutrons dans le modérateur est dépendante de l'énergie. Les paramètres font suite à un calcul Monte Carlo par COCEVA [99] ;
3. La composante associée au détecteur : cette contribution est fournie pour les mesures de transmission dont deux types de détecteur utilisés à ORELA sont décrits : un détecteur à proton de recul (NE110) et un détecteur à verre au lithium. A chaque type de détecteur est associée une fonction analytique dont la convolution contribue à la fonction de résolution totale ;
4. La composante associée au codage en temps des événements (en anglais *channel*) : la contribution de cette composante est une fonction de forme rectangulaire.

- **Fonction de résolution de REFIT/GELINA**

La fonction de résolution de l'accélérateur GELINA implémentée dans le code REFIT [100] a été largement étudiée par M. Moxon qui l'a décomposée en cinq contributions

1. La composante associée à la largeur de la bouffée d'électrons : cette contribution choisie de forme trapézoïdale ;
2. a) La composante associée à la cible (cible rotative d'Uranium) produisant les neutrons par réactions (γ, n) et (γ, f) : sa contribution est approximée par une fonction analytique phénoménologique composée de deux exponentielles ;
 b) La composante associée au modérateur (H_2O) : cette contribution est estimée par une fonction en χ^2 à six degrés de liberté ;
3. La composante associée à l'angle de base de vol (angle entre la trajectoire de vol et la normale au modérateur) si nécessaire : le profil de sa contribution est estimé par une fonction analytique ;
4. La composante associée au détecteur (verre au lithium) : sa contribution analytique est modélisée par une fonction. La contribution est disponible uniquement pour les mesures de transmission ;

5. La composante associée au codage en temps des événements : cette contribution est estimée par une fonction de forme carrée.

Pour récapituler, les fonctions d'ORELA et de GELINA cherchent à reproduire les mêmes phénomènes identifiés. On note la composante de l'angle de vol présente pour GEEL et probablement consécutive à l'exhaustivité en matière de proposition de base de vol à Geel.

V.2.3 Cumul des effets Doppler et Résolution

Le cumul des deux effets (effet Doppler et résolution en énergie) a été estimé dans le cas de la mesure de transmission de RPI (III.3.1.1) afin de quantifier leur impact dans notre analyse.

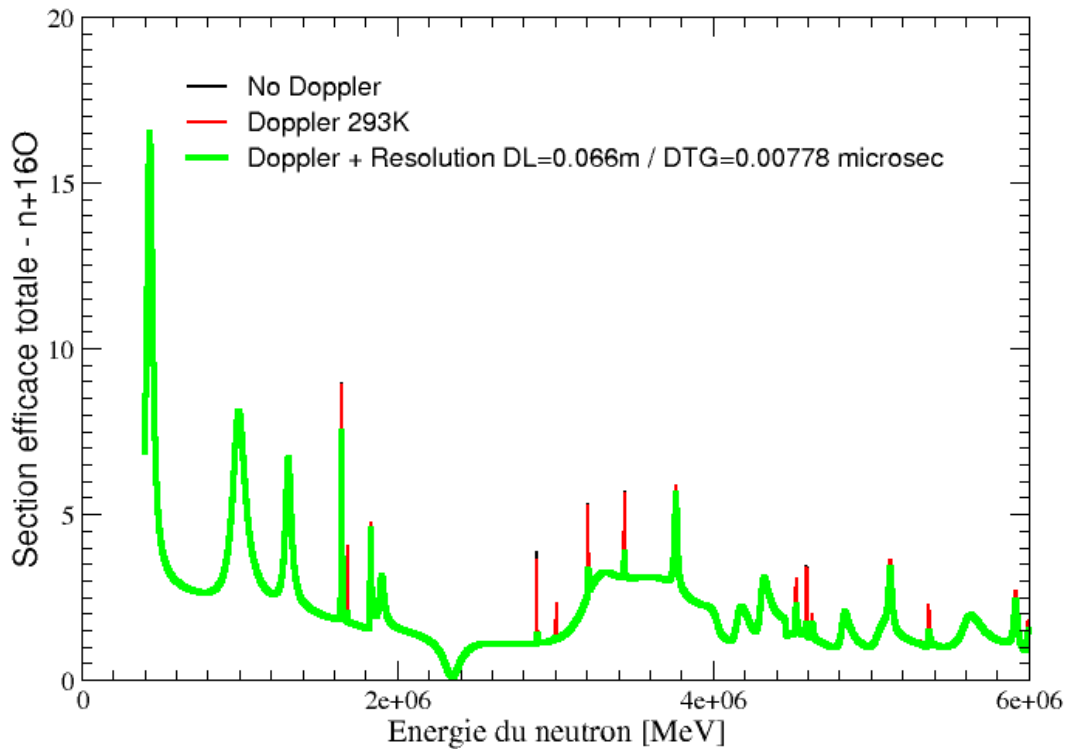


FIGURE V.2.2 – Influence de l'effet Doppler et de la résolution dans la mesure de la section efficace neutronique totale de l' ^{16}O .

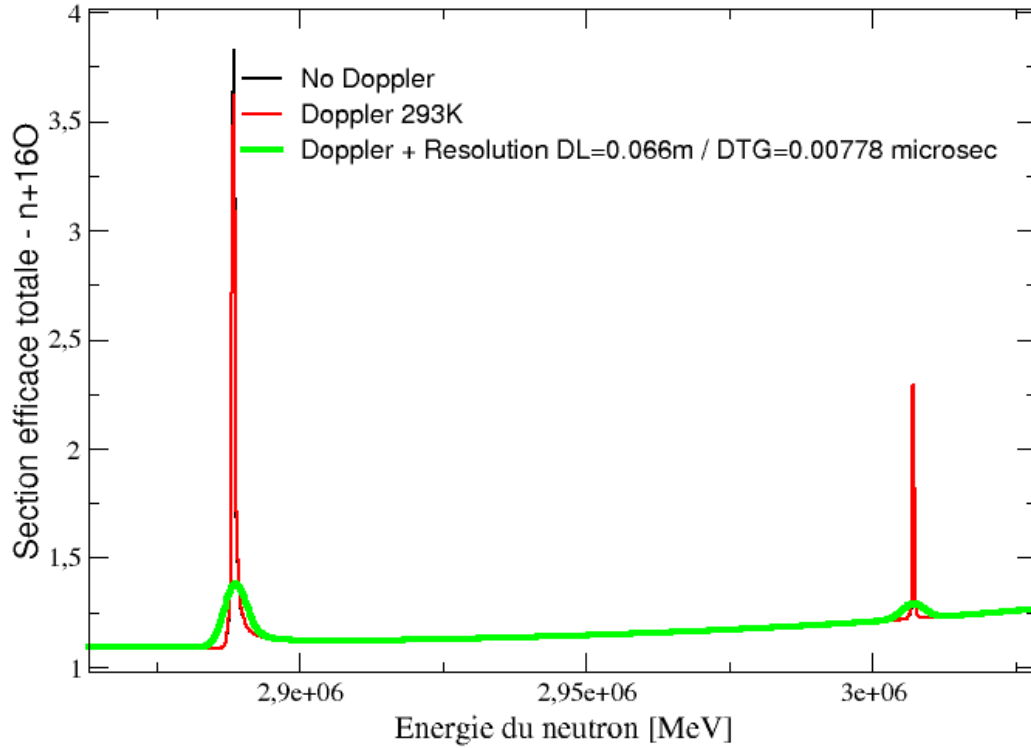


FIGURE V.2.3 – Influence de l’effet Doppler et de la résolution dans la mesure de la section efficace neutronique totale de l’ ^{16}O . Agrandissement sur l’intervalle [2,8 - 3,5 MeV] pour détailler l’impact attendu sur ces deux résonances.

Pour cela, nous avons réalisé un calcul SAMMY (V8) à 0 K, 293 K avec ou sans résolution en énergie. La fonction de résolution choisie emprunte la voie standard de convolution de composantes séparées. Dans le cas de la mesure de RPI, la largeur de la bouffée électronique était de 7 ns, la longueur de la base de vol approximativement de 250 m, l’épaisseur du détecteur (EJ-301- scintillateur à proton de recul) de 0,84 cm et sa résolution temporelle de 3 ns. La variance de la cible de Ta (Bare Bounce Target [11]) a été estimée sur les valeurs simulées par C. Coceva pour ORELA avec 1 MeV de neutron incident, une variance de 0.16364 cm^2 . À partir de ces hypothèses, une incertitude temporelle gaussienne $\Delta t_G = 0,00778 \text{ ns}$ et une incertitude de position $\Delta_L = 0,066 \text{ m}$ au sens du manuel SAMMY (ref.[62], page 141) ont été appliquées à la section efficace nucléaire. Le graphique V.2.2 présente la comparaison des trois calculs sur l’ensemble du domaine énergétique du neutron [0-6 MeV]. On relève des différences sur toutes résonances fines. Sur le graphe V.2.3 élargi [2,8 - 3,5 MeV] à deux résonances fines, on observe bien que l’impact de l’effet Doppler reste faible tandis que l’impact de la fonction de résolution est significatif. Le tableau suivant fourni par SAMMY résume bien la situation :

E_n (keV)	Doppler (FWHM ¹ en keV)	Résolution (FWHM en keV)	$R \otimes \Delta$ (FWHM en keV)
401	0,0841	0,2617	0,27
4700	0,2881	8,93	8,93
9000	0,3987	23,47	27,47

TABLE V.2.1 – Contribution de l’effet Doppler et de la résolution en énergie à la largeur à mi-hauteur (FWHM).

Il ressort du tableau ci-dessus que toute résonance de FWHM naturelle < 9 keV à 4,7 MeV requière pour son analyse d’être convoluée par la fonction de résolution correspondante. Pour des raisons de calendrier et de lenteur de l’ajustement pour l’outil chaîné (TORA + CONRAD), nous nous limiterons à des calculs sans Doppler (Δ) et sans fonction de résolution (R). Néanmoins, nous recommandons la reprise des calculs dans un ajustement final avec un élargissement $R \otimes \Delta$.

V.3 Traitement des niveaux extérieurs au domaine d’analyse

La matrice R est idéalement construite sur une infinité de pôles, E_λ , solutions de l’équation de Schrödinger. Dans le cadre de la matrice R réduite à la seule réaction de diffusion neutronique, l’élément de la matrice R dans la voie c énoncé en approximation Reich-Moore (RM) s’écrit

$$R_{nc} = \sum_{\lambda=1}^{\infty} \frac{\gamma_{\lambda_{nc}} \gamma_{\lambda_{nc}}}{E_\lambda - E - i \frac{\Gamma_{\lambda\gamma}}{2}} \quad (\text{V.3.1})$$

Dans la pratique, la matrice R est calculée sur le domaine d’énergie restreint à la mesure/analyse et la somme (V.3.1) est donc réduite à l’intervalle I qui couvre ce domaine. Les pôles situés en dehors du domaine I sont qualifiés de niveaux externes. Ces niveaux se classent en deux catégories :

1. Les niveaux liés (ou résonances négatives puisque leur énergie est négative par rapport au zéro de l’échelle en énergie de la particule incidente) qui correspondent aux niveaux d’énergie d’excitation situés en dessous du seuil d’émission de la particule (projectile ou éjectile) ;
2. Les niveaux du domaine énergétique supérieur au domaine I d’analyse.

La Fig. V.3.1 fournit une illustration des domaines énergétiques situés de part et d’autre du domaine d’analyse I . En-dessous du domaine I , on comptabilise les

1. FWHM : largeur à mi-hauteur (de l’anglais : *Full Width at Half Maximum*).

résonances proches et lointaines liées (ou résonances proches et lointaines d'énergie négative) et au-dessus du domaine I, les résonances proches et lointaines d'énergie positive (ou résonances proches et lointaines positives).

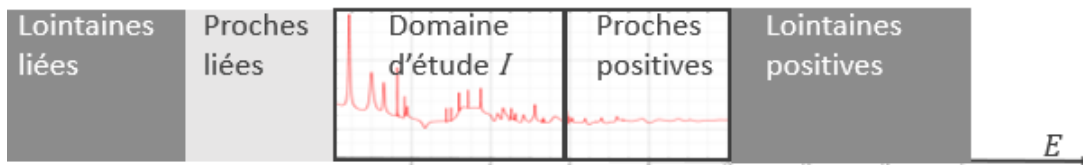


FIGURE V.3.1 – Illustration des domaines énergétiques situés de part et d'autre du domaine d'analyse I intervenant dans le calcul de la matrice R.

Les niveaux externes exercent leur influence par recouvrement sur le domaine I. Les niveaux au-delà du domaine des résonances résolues permettent de comptabiliser essentiellement l'effet des niveaux de plus haute énergie excités directement sans formation d'un noyau composé mais dont la "queue" recouvre le domaine des résonances résolues. Les niveaux d'énergie négative, quant à eux, exercent une forte influence sur le domaine thermique juste au dessus du seuil d'émission du projectile. Sachant que la précision sur la section efficace thermique (à 0,0253 eV) est couramment recherchée à quelques pour cents, l'importance de la détermination correcte des paramètres des niveaux négatifs est primordiale. Dans le but de mieux prédire l'apport des résonances externes et par voie de conséquence de donner une signification moins ambiguë aux paramètres des résonances externes et internes, plusieurs méthodes ont été utilisées historiquement par les auteurs pour la recherche de paramètres reproduisant au mieux les données expérimentales. Nous allons ici passer en revue quelques unes de ces méthodes. Pour les comprendre, nous nous appuyerons sur une formule développée de la fonction R comme exprimée par J.E. Lynn [101] (matrice R réduite aux voies neutrons) qui se décline ainsi

$$R_{nc} = \sum_{\lambda \in I} \frac{\gamma_{\lambda_{nc}} \lambda_{nc}}{E_{\lambda} - E} + R_c^{\infty}(E) + R_c^{\text{ext,loc}}(E) + i\pi s_c^{\text{loc}}(E) \quad (\text{V.3.2})$$

Le premier terme représente la contribution des résonances internes à l'intervalle I (i.e. les résonances observées). Le second terme compte, quant à lui, pour les résonances très éloignées qui sont responsables de la variation séculaire de la section efficace de diffusion élastique potentielle (variation de longue portée). Le troisième terme compte pour les résonances externes voisines au domaine I. Le dernier terme, imaginaire, qualifie une absorption et peut être attribué aux excitations directes autres qu'élastique.

V.3.1 La méthode de duplication des résonances internes

Proposée par H. Derrien [102] pour les noyaux lourds, la méthode consiste à dupliquer/transposer éventuellement plusieurs fois les résonances résolues de

l'intervalle I de part et d'autre de cet intervalle pour modéliser la contribution moyenne des résonances non observées extérieures au domaine I. Les résonances d'énergies inférieures à l'intervalle I jouent le rôle des résonances externes négatives et celles au-delà de l'intervalle I des résonances externes positives. Ce qui permet d'estimer la contribution de ces résonances externes sur l'intervalle I. Le nombre de ces résonances externes est alors réduit en les remplaçant, de part et d'autre de l'intervalle I, par un petit nombre de résonances choisies de manière à reproduire la même contribution que celle précédemment estimée. Cette méthode a été largement plébiscitée par L.C. Leal et adaptée à l'étude des noyaux légers (ex : l'évaluation de l' ^{16}O [38]).

V.3.2 La méthode analytique de paires de résonances externes

La méthode proposée par F. Fröhner et O. Bouland [37] consiste à simuler les niveaux externes par une résonance précalculée fictive très large de chaque côté de l'intervalle I dont les "queues" reproduisent statistiquement pour chaque voie c la contribution des vrais paramètres des résonances externes. Dans cette approche, l'élément de matrice R est décomposé ainsi

$$R_{cc'}(E) = R_{cc'}^0(E) + \sum_{\lambda \in I} \frac{\gamma_c \gamma_{c'}}{E - E_\lambda - \frac{i\Gamma_{\lambda\gamma}}{2}} \quad (\text{V.3.3})$$

où

$$R_{cc'}^0(E) = \left[R_c^\infty(E) + \frac{\gamma^2}{E_- - E - i\frac{\Gamma_\gamma}{2}} + \frac{\gamma^2}{E_+ - E - i\frac{\Gamma_\gamma}{2}} \right] \quad (\text{V.3.4})$$

Les paramètres précalculés pour la relation (V.3.4) sont ainsi

$$\begin{aligned} E_+ &\simeq \bar{E} + \frac{\sqrt{3}I}{2} \\ E_- &\simeq \bar{E} - \frac{\sqrt{3}I}{2} \\ \Gamma_{n+} &\simeq \frac{3}{2}IS_\ell \sqrt{\frac{|E_+|}{1\text{eV}}} \\ \Gamma_{n-} &\simeq \frac{3}{2}IS_\ell \sqrt{\frac{|E_-|}{1\text{eV}}} \\ \Gamma_\gamma &\simeq \bar{\Gamma}_\gamma \end{aligned} \quad (\text{V.3.5})$$

où $I, \bar{E}, \bar{\Gamma}_\gamma$ sont respectivement l'intervalle énergétique contenant les résonances observées, l'énergie au point milieu de l'intervalle I et la largeur radiative moyenne. On note que E dans les équations (V.3.3) et (V.3.4) est l'énergie du projectile. S_ℓ est la fonction force neutronique obtenue par analyse statistique des résonances du

RRR ou extraite de l'analyse par modèle optique des sections efficaces moyennes. Par définition, on a

$$S_\ell = \frac{\langle \Gamma_n^\ell \rangle}{D_\ell} \quad (\text{V.3.6})$$

Pour une bonne reproduction de la section efficace mesurée à l'énergie thermique, laquelle est connue généralement assez précisément, la référence [37] suggère d'ajouter une (ou deux si deux spins de voie) résonance fine de type s en-dessous du seuil d'émission tout en gardant le même rayon de voie pour tous les ℓ pour le calcul des facteurs de pénétrabilité $P_\ell(E)$, les facteurs de décalage de niveaux $S_\ell(E)$ et les facteurs de diffusion sur sphère dure $\varphi_\ell(E)$. Dans cette approche, les paramètres historiques R_c^∞ et rayon effectif (R'_c ; remplaçant a_c pour le calcul des φ_c) sont laissés de côté pour une plus grande simplicité sachant que la contribution de R_c^∞ est endossée par le jeu de résonances externes et donc fixée à zéro. L'utilisation d'un rayon effectif R'_c n'a plus raison d'être sachant qu'à basse énergie $R'_c = a_c (1 - R_c^\infty)$.

V.3.3 La méthode du rayon effectif (R') constant ou variable en énergie

V.3.3.1 Méthode du rayon effectif R' constant

La majeure partie de l'effet des résonances externes peut être absorbée par le paramètre de déphasage de la sphère dure (φ_c) et par un ajustement supplémentaire des paramètres de résonances (γ_c). La modification de φ_c est équivalente à l'utilisation d'un rayon effectif (dit R') pour le calcul de φ_c . L'équation I.5.6 pour la diffusion élastique potentielle se réduit alors à basse énergie à la diffusion élastique potentielle asymptotique

$$\sigma_c^{\text{pot}} = \frac{4\pi}{k^2} g_c \sin^2 \varphi_c \rightarrow 4\pi g_c R_c'^2 \quad (\text{V.3.7})$$

La technique d'un rayon effectif constant avec l'énergie, différent de a_c lequel reste utilisé dans les calculs des pénétrabilités $P_c(k_c a_c)$ et du décalage des niveaux $S_c(k_c a_c)$, a été intensément utilisée pour l'analyse des résonances par de nombreux auteurs depuis sa préconisation notamment par M. A. Preston en 1962 [103]. Cette approximation admissible pour l'analyse des noyaux lourds de RRR limité en énergie (e.g. système ($n + {}^{235}\text{U}$) : 0-2,5 keV et système ($n + {}^{241}\text{Am}$) : 0-150 eV) avec essentiellement des résonances $\ell = 0$ ne peut pas fonctionner pour les noyaux légers de RRR vaste et de ℓ variés (e.g. système ($n + {}^{16}\text{O}$) : 0-6 MeV) comme le suggère la forte dépendance en énergie des niveaux externes (Eq. (V.3.2)).

Une application par G. Noguère aux données neutroniques du système ($n + {}^{241}\text{Am}$) [104] a montré que le concept de rayon effectif constant avec l'énergie ne fonctionne strictement que pour un domaine RRR étroit et les résonances s .

V.3.3.2 Simulation de la composante $R^\infty(E)$ par un rayon effectif variable en énergie

La méthode du rayon effectif variable avec l'énergie a été appliquée par P. Archier pour l'évaluation des sections efficaces neutroniques du sodium. Cette évaluation a été réalisée dans le cadre de son travail de thèse [6]. L'expression de la matrice R considérée comprenait la contribution des résonances internes, la contribution des résonances externes proches n'appartenant pas à l'intervalle I et la contribution des résonances très éloignées.

$$R_{cc'} = R_c^\infty + \sum_{\lambda \in I} \frac{\gamma_{\lambda c} \gamma_{\lambda c'}}{E_\lambda - E - i \frac{\Gamma_{\lambda \gamma}}{2}} + \sum_{\lambda \notin I} \frac{\gamma_{\lambda c} \gamma_{\lambda c'}}{E_\lambda - E - i \frac{\Gamma_{\lambda \gamma}}{2}} \quad (V.3.8)$$

La contribution des résonances externes est ensuite approximée par un rayon effectif R' extrapolé à partir du modèle optique. Le rayon effectif asymptotique à basse énergie est obtenu suivant la relation connue

$$\sigma^{\text{pot}} \cong 4\pi R'^2 \quad (V.3.9)$$

P. Archier a montré qu'à haute énergie, la valeur de R' n'est plus constante et décroît. Il a alors choisi d'adjoindre à la valeur de R' constante (R'_{const}) une fonctionnelle $f_R(E)$ en énergie de manière à obtenir un rayon effectif $R'(E)$ variable en énergie

$$R'(E) = R'_{\text{const}} f_R(E) \quad (V.3.10)$$

où $f_R(E)$ est de forme polynomiale

$$f_R(E) = \sum_{i=0}^N a_i E^i \quad (V.3.11)$$

Les comparaisons effectuées au cours de son travail ont montré que l'utilisation du rayon effectif variable en énergie permettait d'obtenir des résultats d'ajustement largement meilleurs par comparaison avec ceux provenant d'un rayon effectif constant.

V.3.3.3 Conclusion sur notre revue de la littérature

Notre conclusion est parfaitement cohérente avec les travaux de G. Noguère sur le sujet, lesquels sont réunis dans son manuscrit de HDR [104]. En résumant ses travaux, nous pouvons aussi énoncer le "*Théorème*" suivant :

Si R' (éventuellement fonction de l) et sa dépendance en énergie sont correctement extraits du modèle optique, on peut alors choisir $a_c(\ell, E) = R'(\ell, E)$ sans qu'une composante $R_c^\infty(E)$ soit nécessaire.

V.4 Approche spécifique à ce travail pour le traitement des résonances externes

Pour notre objectif, nous avons choisi une démarche plus générale qui permet d'explicitier parmi le panel de phénomènes physiques présents dans la région des résonances externes, ceux ayant une incidence significative dans le domaine d'analyse. Pour cela, nous avons fait appel au code TALYS, présenté au paragraphe III.2.4, dont la force repose justement sur un calcul de modèle optique phénoménologique qui inclut explicitement toutes les composantes physiques répertoriées pour le calcul de la section efficace. En partant des discussions du paragraphe V.3 et en insistant sur le fait que F. Fröhner et O. Bouland [37] ainsi que G. Noguère [104] soutiennent l'utilisation d'un rayon effectif égal au rayon de voie dans le calcul des facteurs de pénétrabilité comme pour les facteurs de déphasage sur sphère dure et les facteurs de décalage énergétique, nous avons suivi la démarche suivante :

1. Choix d'un jeu de paramètres de résonance a priori extraits de l'évaluation de L. C. Leal [38] duquel nous avons supprimé les résonances externes (positives et négatives) ;
2. Modélisation des contributions externes par un rayon unique (le mot "unique" signifie ici qu'un même rayon est utilisé pour calculer les facteurs de pénétrabilité, de décalage énergétique et de déphasage) variable avec l'énergie et extrait de la section efficace de diffusion élastique potentielle fournie par un calcul TALYS. L'utilisation d'un rayon fonction de l'énergie est justifiée puisque le système composé $^{17}\text{O}^*$ présente un domaine RRR étendu (de 0 à 6 MeV en énergie du neutron incident). Dans le but de modéliser correctement les composantes partielles à la section efficace totale élastique potentielle, nous avons décidé de faire varier également le rayon avec le moment quantique orbital ℓ ;
3. Utilisation d'une résonance liée (ou négative) s pour reproduire au mieux la section efficace mesurée à l'énergie thermique et ce, conformément à l'idée de F. Fröhner et O. Bouland [37] pour reproduire la contribution des niveaux liés les plus proches.

V.4.1 Utilisation d'un calcul TALYS pour simuler dans le calcul matrice R la contribution de la réaction élastique directe (section efficace élastique potentielle)

V.4.1.1 Première tentative infructueuse d'ajustement de mesures avec des rayons constants en énergie mais fonction du moment orbital ℓ pour le système en interaction ($n + {}^{16}\text{O}$)

Par observation du comportement des facteurs de pénétrabilité des ondes partielles, lesquelles contribuent à la section efficace totale de diffusion élastique potentielle, nous pouvons vérifier que les ondes s sont bien celles qui dominent à basse énergie. Au fur et à mesure que l'énergie augmente, les autres contributions prennent de l'importance. De plus, en comparant la section efficace totale de diffusion élastique potentielle de TALYS à celle calculée (Eq. I.5.6) par TORA en utilisant le rayon recommandé par L. C. Leal [38] ($a_0 = 4, 15$) fm, nous avons remarqué que le calcul s'approchait mieux logiquement de la section efficace prédite par TALYS en prenant comme rayon la valeur associée à la contribution de basse énergie des ondes s et issue de TALYS². La valeur de cette dernière est de $a_0 = 5, 1144$ fm. La valeur des autres rayons non fournie par TALYS a été recherchée par un ajustement (valeurs a priori de $a_\ell = 4, 15$ fm pour $\ell > 0$) reposant seulement sur la section efficace totale élastique potentielle proposée par TALYS. Nous avons constaté que cette initiative permettait de reproduire correctement la section efficace uniquement jusqu'à l'énergie d'excitation de $E_x = 7, 9$ MeV ($E_n = 4, 25$ MeV). Au delà, cette section efficace variant assez rapidement en énergie, il est devenu impossible de la modéliser au moyen de rayons énergétiquement constants. C'est la même problématique qui a été rapportée par P. Archier [6] pour le système ($n + {}^{23}\text{Na}$).

V.4.1.2 Seconde tentative infructueuse : ajustement de rayons dépendant de l'énergie et du moment orbital ℓ par ajustement simple de la section efficace totale élastique potentielle

Au regard des résultats plutôt imparfaits obtenus lors de nos efforts d'extraction de rayons constants en énergie (section V.4.1.1), il est apparu évident que seuls des rayons variables en énergie pourraient nous permettre de reproduire correctement la section efficace totale élastique potentielle. Pour le nouvel ajustement, nous avons proposé et travaillé à partir d'une formule polynomiale pour les rayons (a_ℓ) tel que

$$a_\ell(E_x) = \sum_i C_{\ell i} (E_x - E_{\text{seuil}})^i \quad (\text{V.4.1})$$

2. La méthode SPRT [105] (S comme fonction force S_0 , P comme fonction force S_1 , R comme rayon effectif R' et T comme coefficient de transmission au sens Hauser-Feshbach [2]) implementée dans le code TALYS donne directement la valeur du rayon R' extrait du calcul de la diffusion élastique potentielle asymptotique.)

où i prend des valeurs de 0 à 3. L'expression (V.4.1) est donc réduite à un polynôme de degré 3. E_{seuil} représente l'énergie "seuil" d'ouverture des pénétrabilités P_ℓ .

ℓ	$E_{\text{seuil}}(\text{MeV})$
0	4,143885
1	4,614225
2	6,025245
3	9,317625
4	14,491395

TABLE V.4.2 – Energies "seuils" calculées à partir des valeurs des facteurs de pénétrabilité normalisées.

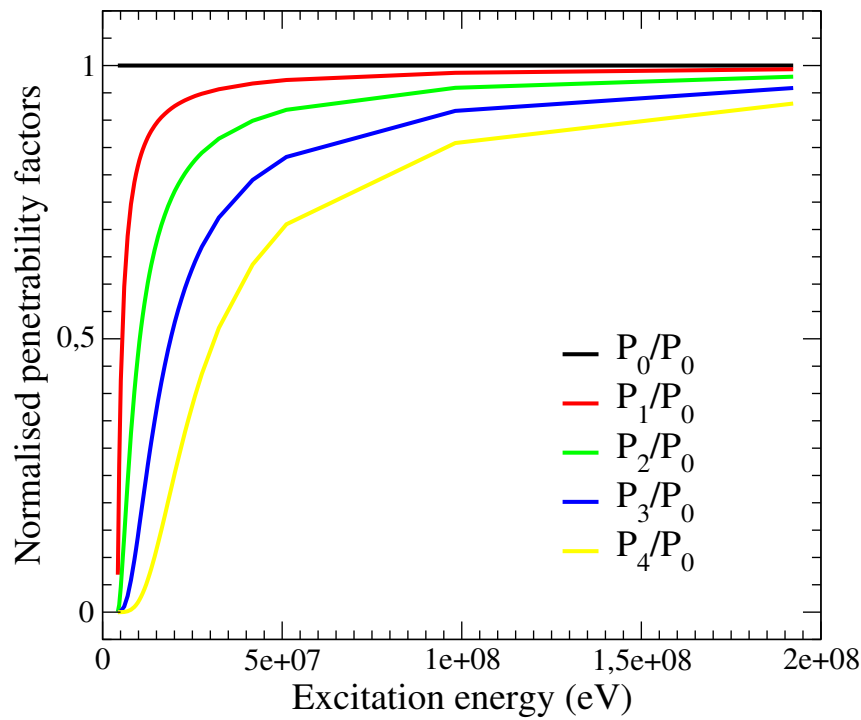


FIGURE V.4.1 – Evolution des valeurs normalisées des facteurs de pénétrabilité P_ℓ en fonction de l'énergie.

Cette énergie était choisie de telle manière que la valeur normalisée $\frac{P_\ell}{P_0}$ soit significative (choisie ici arbitrairement à 0.1). La quantité E_{seuil} a été rajoutée pour une meilleure sensibilité des coefficients dans l'ajustement et un travail possible soit en énergie neutron soit en énergie d'excitation. La figure V.4.1 illustre l'évolution des valeurs normalisées $\frac{P_\ell}{P_0}$ avec l'énergie. Sur la base du critère $\frac{P_\ell}{P_0} > 0.1$, les valeurs des énergies E_{seuil} retenues sont énoncées dans le Tableau V.4.2 .

Le travail d'ajustement consistait à rechercher les valeurs des constantes $C_{\ell i}$ permettant de bien reproduire la section efficace de TALYS. Bien que cette démarche semblait porteuse de fruits jusqu'aux énergies moyennes du domaine d'analyse, nous nous sommes heurté à un handicap majeur : l'obtention de valeurs de rayon négatives sans signification physique qui bloquaient automatiquement le calcul théorique. La Fig. V.4.2 illustre un ajustement inachevé par l'obtention d'un rayon négatif d'une onde partielle.

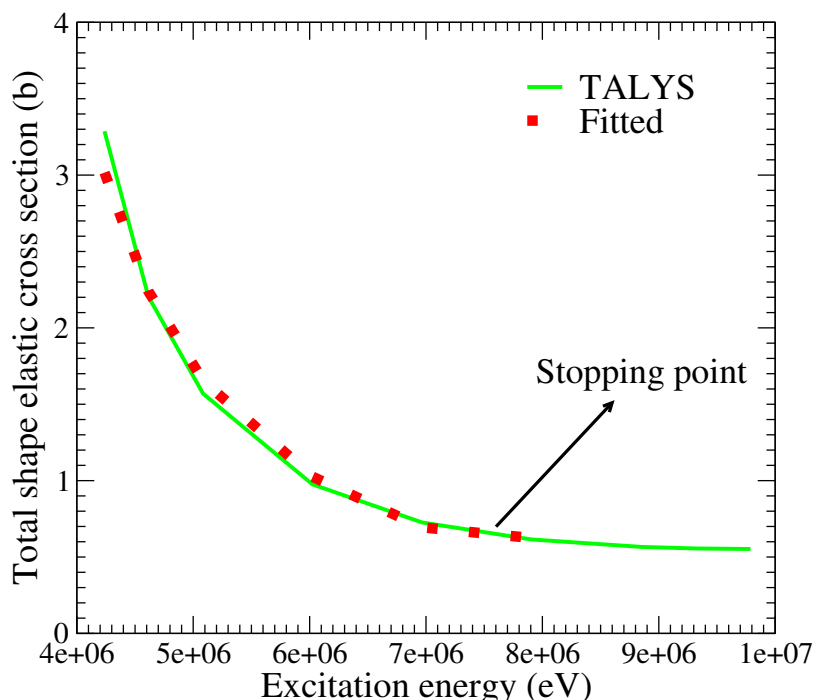


FIGURE V.4.2 – Tentative d'ajustement de la section efficace totale de diffusion élastique potentielle calculée par le code TALYS. Le « stopping point » représente le point d'arrêt à partir duquel le calcul théorique est arrêté suite à l'obtention de valeurs de rayon négatives, ce qui a rendu impossible l'ajustement sur la seule base de la section efficace totale de diffusion élastique potentielle.

V.4.1.3 Troisième tentative : ajustement fructueux de rayons dépendant de l'énergie et du moment orbital ℓ par ajustement sur l'ensemble des sections efficaces partielles élastiques potentielles.

L'échec constaté lors de la seconde tentative était dû à la difficulté de garder un équilibre adéquat, lors de la procédure d'ajustement, entre les différentes contributions partielles associées à chaque nombre quantique orbital ℓ . Pour résoudre le problème, nous avons décidé d'ajuster non pas la section efficace totale de diffusion élastique potentielle mais ses contributions partielles. Pour cela, nous avons récupéré les éléments de la matrice S calculés par TALYS. A partir de ces éléments, la section

efficace totale peut être recalculée de la manière suivante [104]

$$\sigma_{\text{tot}} = \frac{2\pi}{k^2} \sum_c g_{J\ell}(2\ell + 1) \{1 - \text{Re}[S_c(E)]\} \quad (\text{V.4.2})$$

et la section efficace totale de diffusion élastique potentielle (ou shape elastic) est obtenue ainsi

$$\sigma_s = \frac{\pi}{k^2} \sum_c g_{J\ell}(2\ell + 1) |1 - S_c(E)|^2 \quad (\text{V.4.3})$$

Le facteur statistique de spin $g_{J\ell}$ est défini par

$$g_{J\ell} = \frac{2J + 1}{(2i + 1)(2I + 1)(2\ell + 1)} \quad (\text{V.4.4})$$

A partir des équations V.4.2 et V.4.3, nous sommes en mesure d'isoler les composantes partielles en ℓ en regroupant tous les J formant un même ℓ . Nous rappelons qu'il est utile de vérifier que la somme des contributions partielles en terme de moment orbital ℓ permet bien de retrouver la section efficace totale fournie directement par le calcul TALYS. Pour plus de détails sur le calcul par modèle optique, se reporter au paragraphe I.3.1 du chapitre I et pour le code TALYS se reporter au paragraphe III.2.4 du chapitre III.

La Figure V.4.3 présente graphiquement le résultat de l'ajustement par CONRAD des coefficients de la formule polynomiale (Eq. V.4.5) pour le calcul des $a_\ell(E)$ intervenant dans la reconstruction des sections efficaces partielles de diffusion élastique potentielle par TORA, sur la base des sections partielles de TALYS calculées à partir des éléments de la matrice S pour la voie ($n + {}^{16}\text{O}$). Les valeurs des coefficients $C_{\ell i}$ ajustés sont reportées dans le Tableau V.4.3. De la Fig. V.4.3, nous visualisons aisément le domaine de sensibilité des différentes contributions partielles en fonction de la valeur du ℓ . Pour notre domaine d'étude de (0-6) MeV d'énergie neutron relatif au système ${}^{17}\text{O}^*$, l'importance des valeurs de ℓ supérieures à 3 sera négligeable pour la voie neutron.

$$a_\ell(E_x) = C_{\ell 0} + C_{\ell 1}(E_x - E_{\text{seuil}}) + C_{\ell 2}(E_x - E_{\text{seuil}})^2 + C_{\ell 3}(E_x - E_{\text{seuil}})^3 \quad (\text{V.4.5})$$

ℓ	$C_{\ell 0}$	$C_{\ell 1}$	$C_{\ell 2}$	$C_{\ell 3}$
0	5,250859113e+00	-1,570232439e+00	2,075784298e-01	-1,081434980e-02
1	3,149964157e+00	-1,330830312e-01	-1,397298024e-02	2,128051994e-03
2	4,724794027e+00	-8,284020947e-02	-2,670883705e-02	3,399362697e-03
3	4,486029024e+00	1,647055948e-02	-3,306350272e-03	-1,067967399e-03
4	4,283710109e+00	-1,033372072e-02	1,703753605e-03	-5,461092182e-05

TABLE V.4.3 – Valeurs a posteriori des coefficients $C_{\ell i}$ servant à calculer les rayons a_ℓ en fonction de l'énergie d'excitation.

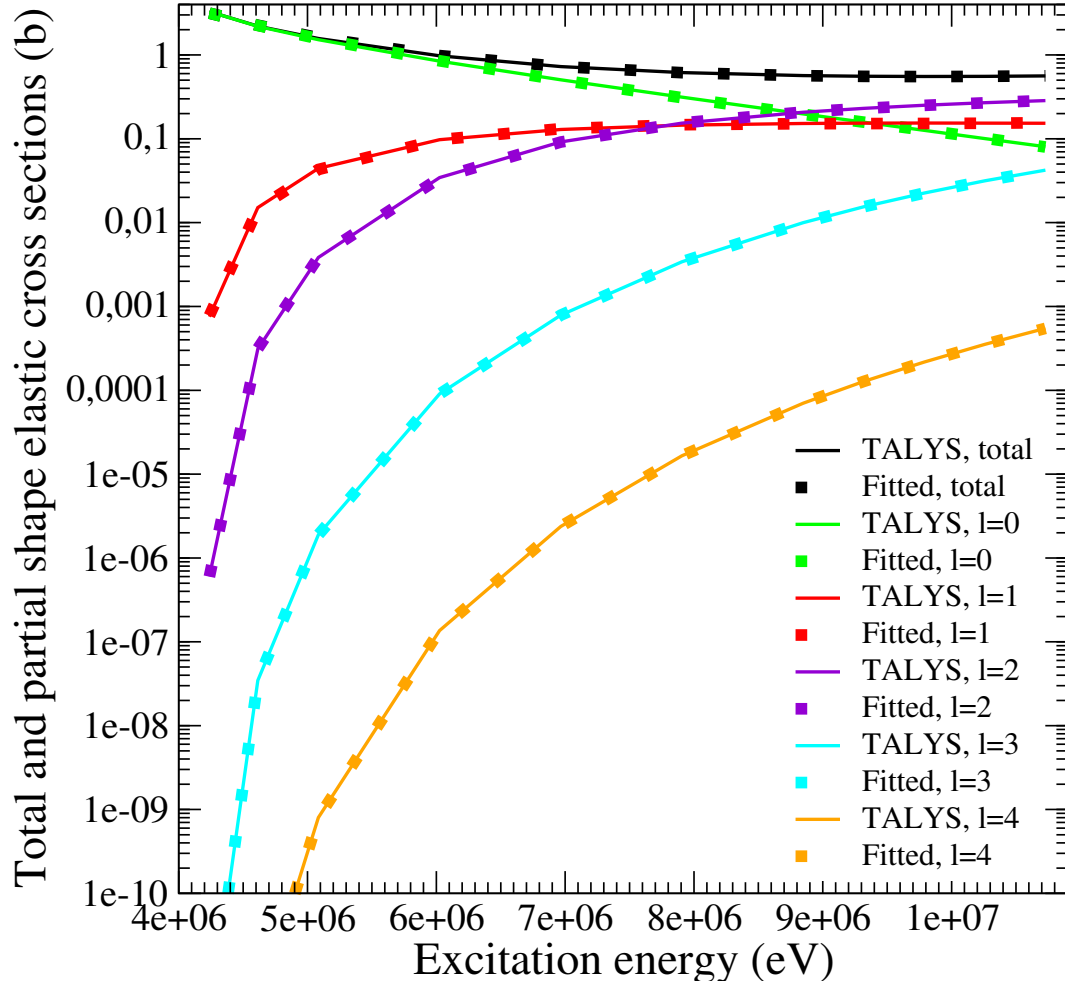


FIGURE V.4.3 – Sections efficaces partielles et totale de diffusion élastique potentielle en fonction de l'énergie d'excitation (MeV). La section totale de diffusion élastique potentielle (carrés pleins noirs) reconstruite à partir de la somme des sections efficaces partielles après ajustement des coefficients, respecte bien la section efficace totale (courbe en noir) fournie directement par TALYS.

V.5 Importance de la non inversion de données dans un ajustement

Nous avons décrit au paragraphe II.2.4 du chapitre II le problème historique de l'inversion des mesures des sections efficaces des réactions réciproques pour un ajustement des paramètres dans la base expérimentale correspondant au système du laboratoire du projectile. Bien que les propriétés physiques de la matrice de collision U (unitarité et symétrie) puissent justifier pour les évaluateurs, en l'absence de possibilité de travail direct avec les données réciproques, la pratique de l'inversion de données, nous avons jugé qu'il existe un risque de modéliser la réaction nucléaire « en voie directe » de façon imparfaite lors d'un ajustement paramétrique à partir d'une information expérimentale obtenue sur la base de sa réaction réciproque inversée.

La question de la modélisation par la matrice R des réactions directes, semi-directes et noyau composé est partie prenante de l'inversion des données puisque pour les réactions semi-directes la modélisation est non explicite tandis qu'elle est seulement explicite pour la réaction de diffusion élastique directe. La réaction de capture directe est par exemple dans un calcul SAMMY rajoutée comme un bruit de fond tabulé. Bien sûr, à basse énergie d'excitation (RRR), si les réactions de type noyau composé restent prépondérantes (en dehors de la réaction de diffusion élastique directe), la question de l'importance de la mauvaise modélisation des autres réactions devient caduque. Pour quantifier l'erreur possible apportée par l'inversion des données, nous avons procédé à une série de tests dans le cadre du CM du système composé en traitant simultanément voies « directe » et réciproque ou voies « directe » et réciproque inversée.

Le système choisi logiquement pour cette série de tests est celui de l' ^{17}O au travers des réactions $^{16}\text{O}(n, \alpha)^{13}\text{C}$ et $^{13}\text{C}(\alpha, n)^{16}\text{O}$ pour les raisons évoquées au chapitre II (paragraphe II.3). En regardant les graphes du-dessous de la Fig.V.5.1, nous pouvons visualiser rapidement les différences relatives purement de calcul obtenues par TORA d'une part entre voies « directe » et réciproque inversée (Pseudo (n, α)) et d'autre part entre voies réciproque et « directe » inversée (Pseudo (α, n)). Il ressort que les profils des différences relatives sont très proches dans les deux cas et que les différences sont extrêmement faibles en ordre de grandeur (10^{-13}). Ces comparaisons purement théoriques peuvent être complétées par des comparaisons expérience/théorie à partir des paramètres de résonance proposés par L.C. Leal [38]. Les Figures V.5.2 (a) et V.5.2 (b) comparent chacune le résultat d'un calcul théorique avec la mesure correspondante respectivement pour les voies « directe » $^{16}\text{O}(n, \alpha)^{13}\text{C}$ et réciproque $^{13}\text{C}(\alpha, n)^{16}\text{O}$. Les différences sont cette fois exprimées en terme de résidu (i.e; χ^2 individuel). Les profils des χ^2 sont à nouveau très similaires dans les deux cas en notant que les différences résiduelles au niveau

des résonances sont très substantiellement dues à l'imperfection du calcul reconstruit suite à l'absence présentement de prise en compte des conditions expérimentales de l'expérience de J. K. Bair et F. X. Haas [85].

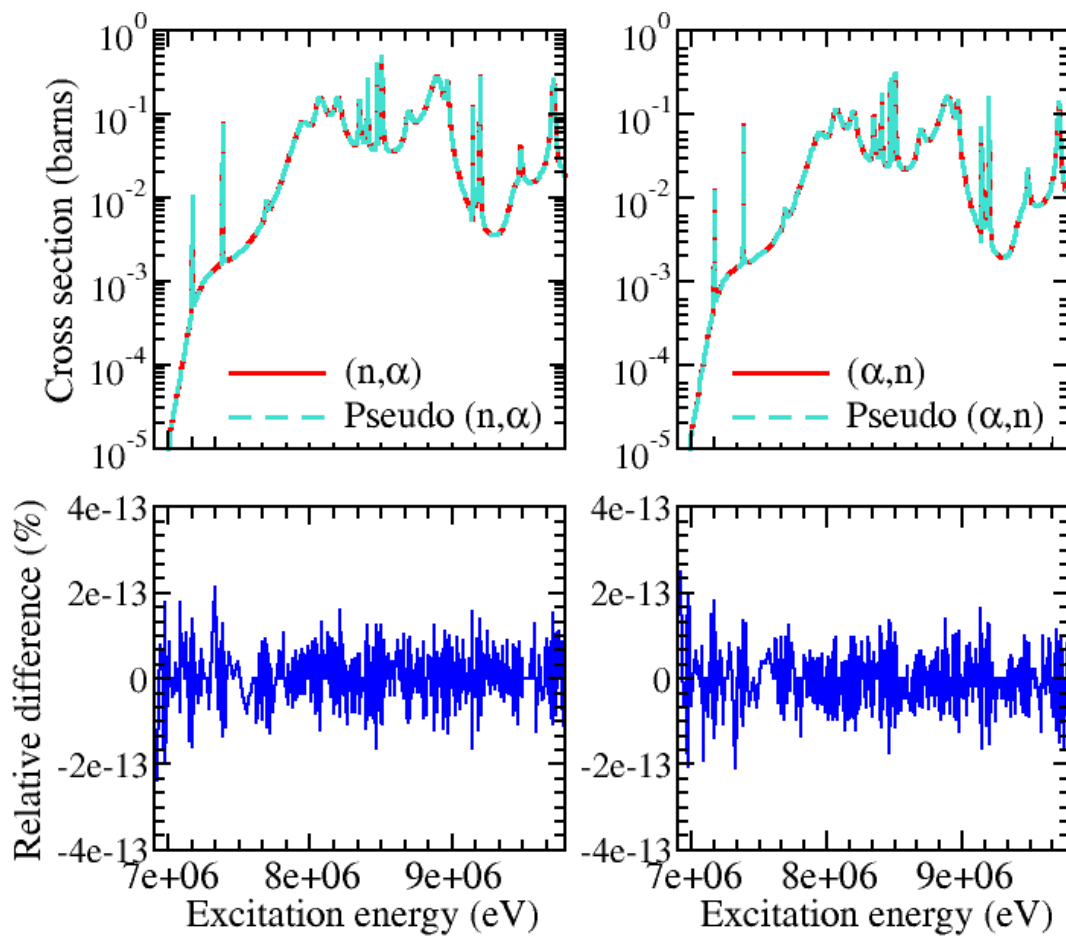
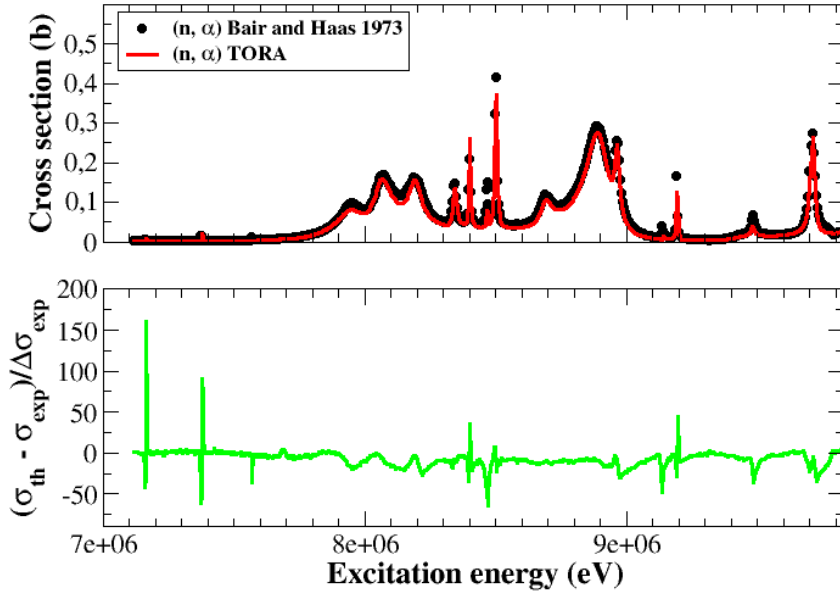
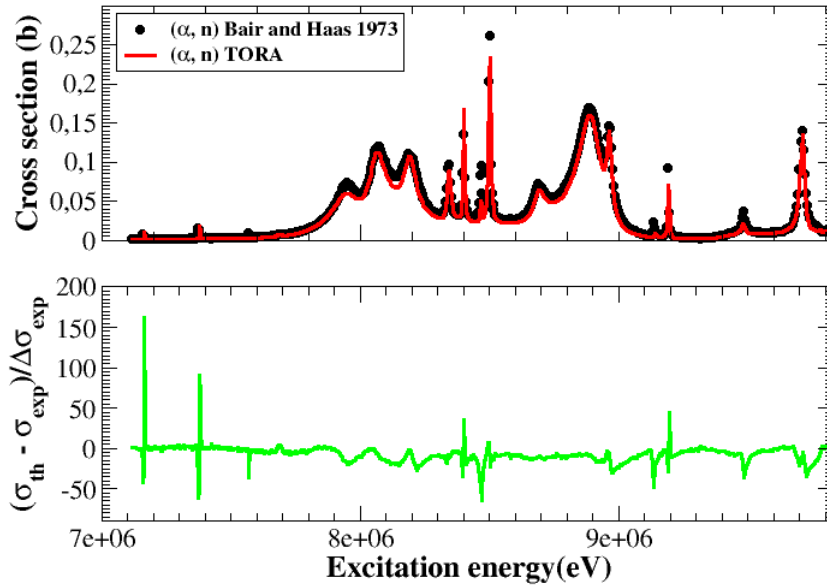


FIGURE V.5.1 – Comparaison pour les sections efficaces $^{16}\text{O}(n, \alpha)^{13}\text{C}$ (graphes de gauche) et $^{13}\text{C}(\alpha, n)^{16}\text{O}$ (graphes de droite) de calculs TORA « directs » ((n, α) -graphes de gauche ; (α, n) -graphes de droite) et inversés (Pseudo (n, α) -graphes de gauche ; Pseudo (α, n) -graphes de droite). Les différences relatives calculées, en pourcent, représentent le rapport $[(\text{Pseudo calcul} - \text{calcul « direct »}) / \text{Pseudo calcul}]$.



(a)



(b)

FIGURE V.5.2 – Comparaison pour les sections efficaces $^{16}\text{O}(n, \alpha)^{13}\text{C}$ (graphe double haut) et $^{13}\text{C}(\alpha, n)^{16}\text{O}$ (graphe double bas) du calcul TORA avec respectivement la mesure de J. K. Bair et F. X. Haas [85] ou son inverse. Les graphes du-dessous représentent les résidus (i.e; χ^2 individuels) calculés comme le rapport [(expérience - calcul) / incertitude expérimentale].

V.6 Calcul matrice R exacte

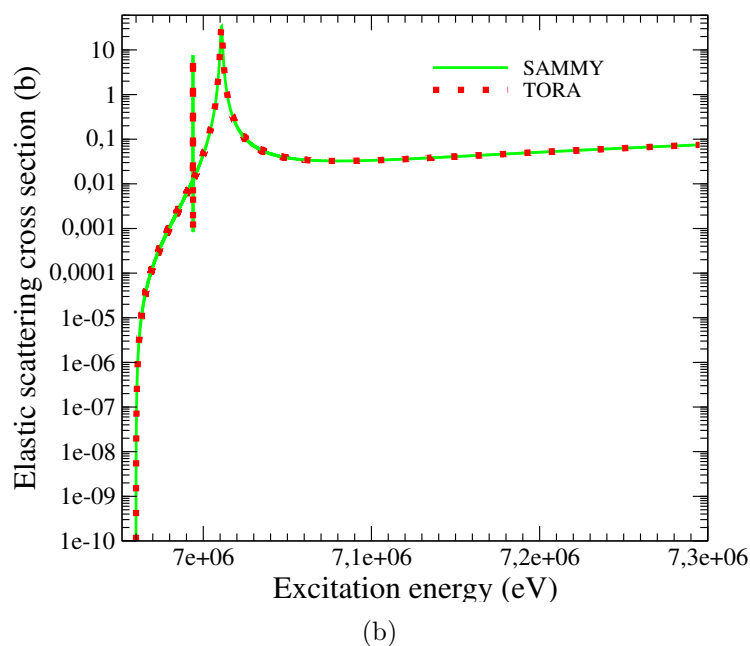
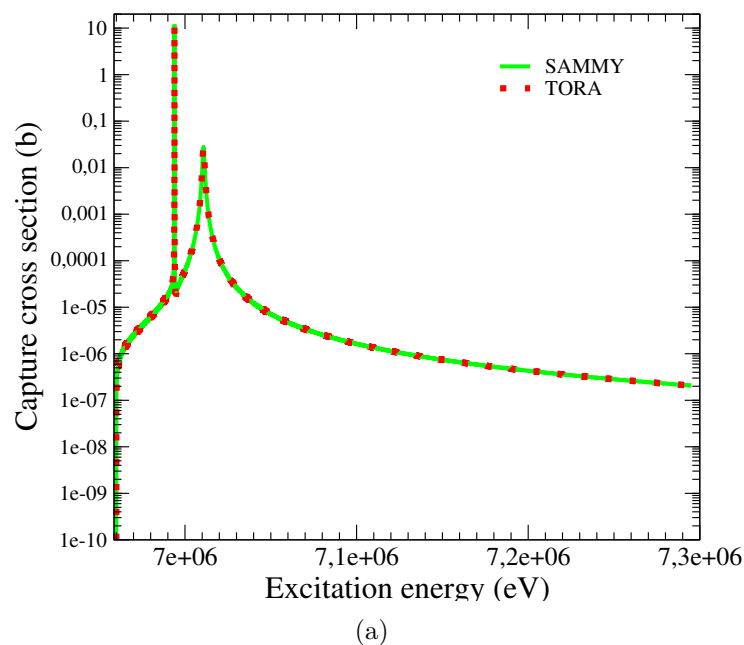


FIGURE V.6.1 – Section efficace de capture (en a) et de diffusion neutronique (en b) par le ^{23}Na en matrice R exacte calculée par TORA et SAMMY. Ces sections efficaces sont calculées pour deux résonances de largeurs individuelles de désexcitation radiatives mesurées par Hori et *al* [92] en fonction de l'énergie d'excitation dans le système $^{24}\text{Na}^*$. Les largeurs neutroniques sont extraites du fichier de la bibliothèque JEFF-3.1.

Nous avons effectué, dans le cadre du calcul matrice R exacte, l'étude des systèmes ($n + {}^{23}\text{Na}$) et ($n + {}^{238}\text{U}$). Comme présenté dans le chapitre III, ces systèmes ont été choisis sur base de la disponibilité des données des voies individuelles de désexcitation radiative. Le but de l'étude est d'analyser les modifications apportées par l'approximation Reich-Moore. C'est une reprise de celle qui a été réalisée en 2005 par O. Bouland [96]. En plus des données expérimentales de Hori et *al* [92] pour le système ($n + {}^{23}\text{Na}$) et de Price et *al* [94] pour le système ($n + {}^{238}\text{U}$), les données relatives à la voie neutron ont été extraites de la bibliothèque évaluée JEFF-3.1 dans le travail de O. Bouland. Afin de vérifier l'évolution du fichier JEFF, nous donnons aussi les résultats de la dernière évaluation officielle (JEFF-3.3). La première partie de ce paragraphe présente la validation du module TORA en matrice R exacte par rapport à la référence SAMMY. La seconde partie présentera les résultats de l'étude.

V.6.1 Validation numérique du calcul TORA en matrice R

En guise de validation du calcul matrice R du module TORA, nous confrontons les résultats, centrés sur la résonance à 53 keV d'énergie neutron du système ($n + {}^{23}\text{Na}$), du code SAMMY à ceux que nous obtenons en utilisant le module TORA. La Figure V.6.1 montrent les comparaisons des deux codes respectivement pour les sections efficaces de capture neutronique (en a) et de diffusion élastique (en b). L'analyse rapide de la Figure V.6.1 montre une adéquation très satisfaisante entre les résultats TORA et ceux fournis par le code SAMMY.

V.6.2 Estimation de l'imprécision apportée par l'approximation Reich-Moore sur un noyau cible moyennement léger (${}^{23}\text{Na}$)

V.6.2.1 Différences entre le fichier JEFF-3.1 et le nouveau fichier JEFF-3.3

Le fichier JEFF-3.1 (2010) se différencie principalement du fichier JEFF-3.3 (2017) d'une part, par l'évolution du formalisme (de l'approximation MLBW [28] à l'approximation Reich-Moore) et d'autre part, le choix des rayons de voies et du nombre de résonances évaluées. Les rayons de voies étant différents, les largeurs neutroniques sont aussi modifiées et donc difficiles à comparer en terme de largeurs. Concernant le rayon de voie, JEFF-3.1 recommande un rayon unique de valeur 5.2 fm pour le calcul des facteurs de pénétrabilité, de décalage en énergie et de déphasage sur sphère dure. Le fichier JEFF-3.3, quant à lui, recommande deux rayons différents, un rayon de voie (a_c) pour le calcul des facteurs de pénétrabilité et de décalage en énergie et un rayon de diffusion (R') pour le calcul des facteurs de déphasage sur sphère dure. Les valeurs de ces deux rayons sont respectivement

de 4.287 fm (formule ENDF [28]) et de 4.9 fm. Le fichier JEFF-3.1 contient 20 résonances réparties en 3 types : 4 résonances « s », 15 résonances « p » et 1 résonance « d ».

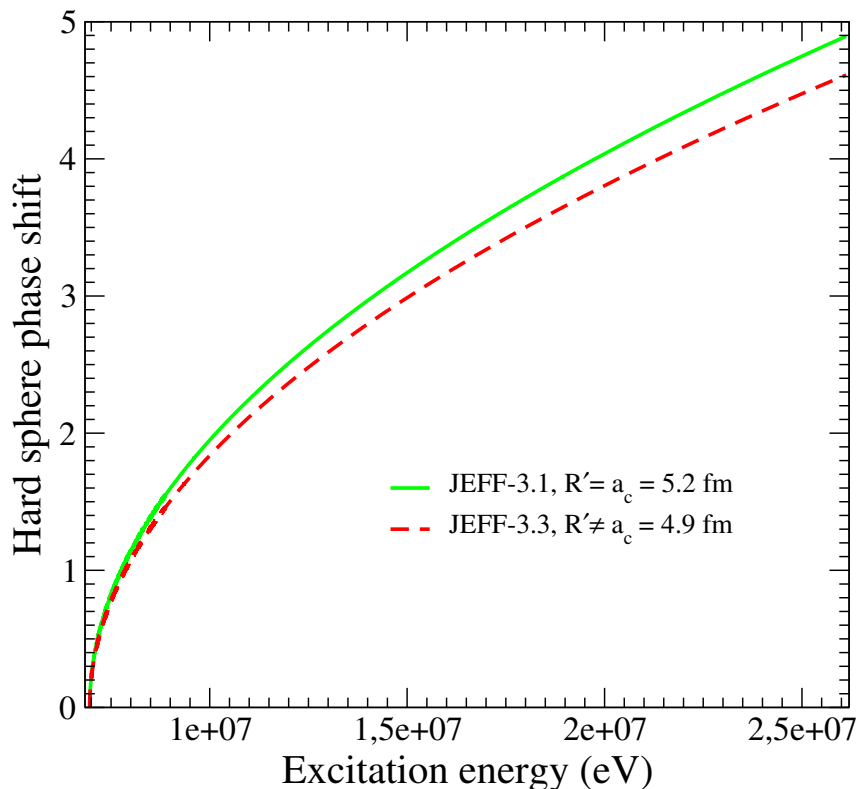


FIGURE V.6.2 – Facteurs de déphasage sur sphère dure (φ) pour le moment orbital $\ell = 0$ calculés par TORA en utilisant les rayons de voie recommandés par JEFF-3.1 (courbe verte pleine) et JEFF-3.3 (courbe rouge en pointillé).

Dans le fichier JEFF-3.3, on y trouve 90 résonances : 9 résonances « s », 36 résonances « p » et 45 résonances « d ». Les valeurs des largeurs neutroniques attribuées aux deux résonances de même J^π de l'étude sont données dans le tableau suivant sous forme d'amplitude réduite pour pouvoir être comparées plus directement.

E_r	JEFF-3.1 ($\sqrt{eV}$)	JEFF-3.3 ($\sqrt{eV}$)
35,38 keV	5,61	11,19
53,04 keV	191,46	242,45

TABLE V.6.4 – Valeurs des amplitudes neutroniques (γ_n) des résonances de même $J^\pi = 2^-$ à $E_r = 35,38$ keV et $E_r = 53,04$ keV pour les fichiers JEFF-3.1 (2010) et JEFF-3.3 (2017).

Nous remarquons également une différence légère de calage en énergie entre les deux versions. Au regard des choix effectués dans JEFF-3.3 par rapport à JEFF-3.1, on peut en déduire une volonté d'abaisser la section efficace de diffusion potentielle (rayon de diffusion qui faiblit dans JEFF-3.3 par rapport au rayon unique de JEFF-3.1) et de privilégier une section efficace résonnante forte (γ_n dans JEFF-3.3 représentant plus du double de celui tabulé dans JEFF-3.1 pour la résonance étroite -Tab. V.6.4). La Fig. V.6.2, qui compare les facteurs de déphasage sur sphère dure pour le moment orbital $\ell = 0$, dont dépend fortement la section efficace de diffusion potentielle à basse énergie, témoigne bien du choix de JEFF-3.3 de section efficace de diffusion potentielle atténuée par rapport à JEFF-3.1.

V.6.2.2 Etudes de l'imprécision apportée par le calcul Reich-Moore (fichier JEFF-3.3)

Dans ce paragraphe, nous présentons l'analyse des comparaisons pour les sections efficaces de capture et de diffusion neutronique par le noyau ^{23}Na calculées soit en matrice R exacte, soit sous l'approximation Reich-Moore. Les tests sont effectués sur la base du fichier JEFF-3.3. Les profils des sections efficaces partielles obtenues sont similaires dans les deux cas.

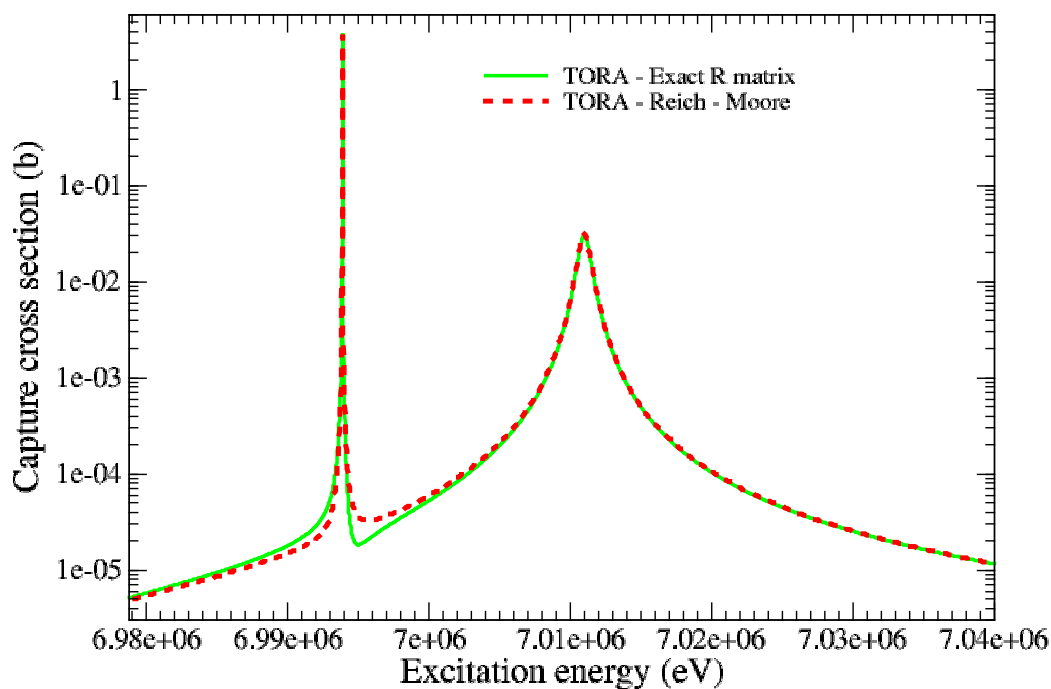


FIGURE V.6.3 – Section efficace de capture neutronique du ^{23}Na en fonction de l'énergie d'excitation du système composé $^{24}\text{Na}^*$. Comparaison entre les sections calculées par TORA en matrice R exacte (courbe en vert continue) et sous l'approximation Reich-Moore (courbe rouge en pointillé). Les amplitudes réduites de la voie neutron sont converties à partir des largeurs des résonances extraites du fichier JEFF-3.3.

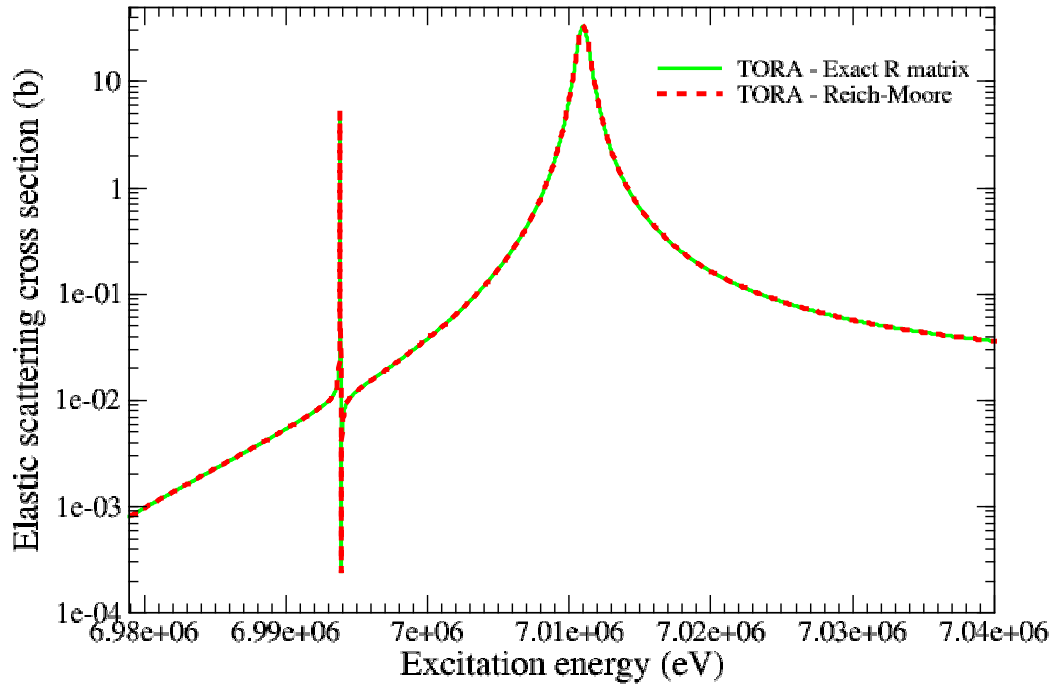
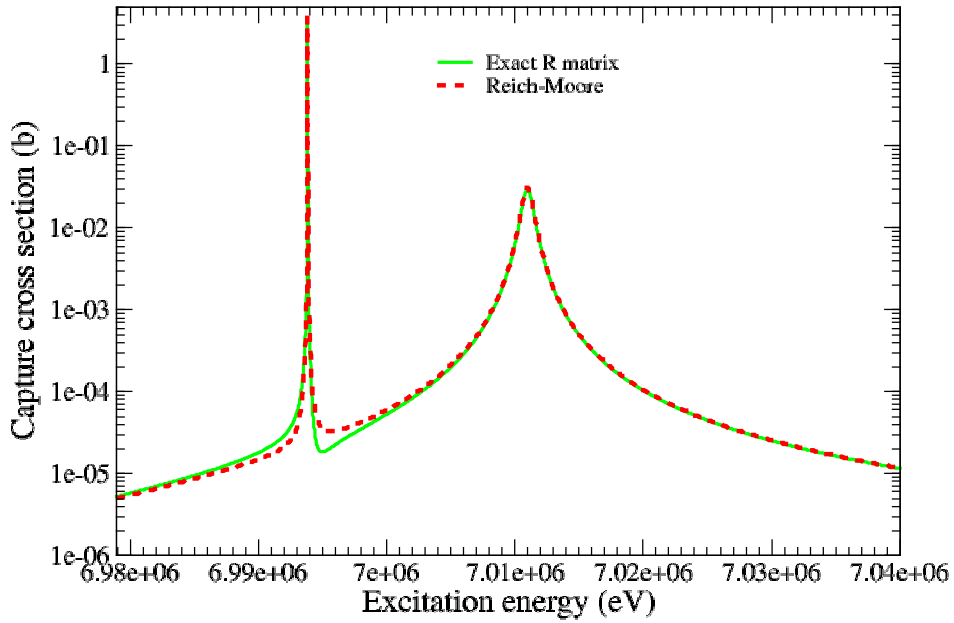


FIGURE V.6.4 – Légendes similaires à la Figure V.6.3 mais pour la diffusion neutronique.

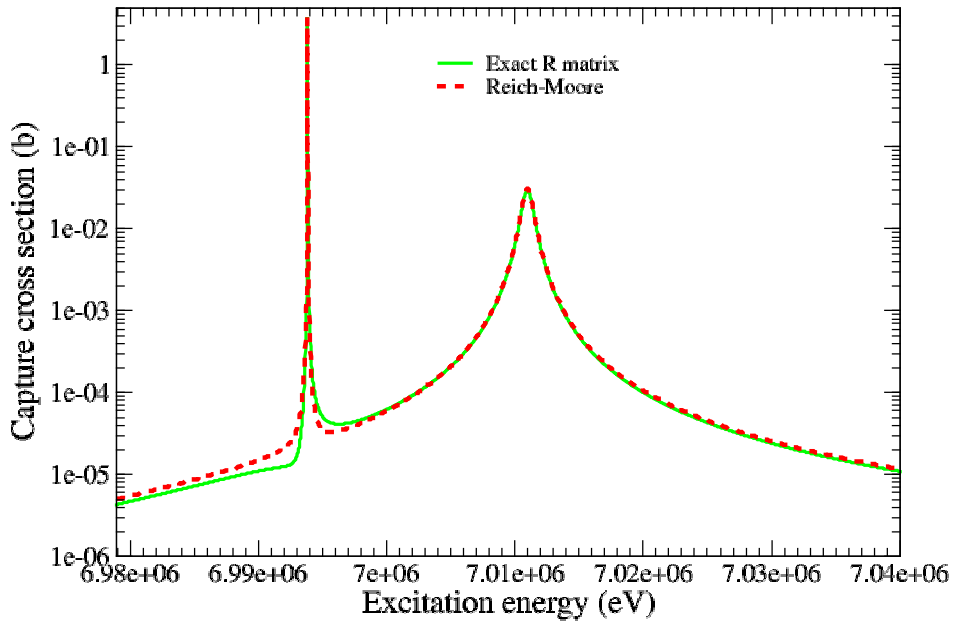
La section efficace de capture (Fig. V.6.3) calculée en matrice R exacte présente une petite différence pour l'aile droite de la résonance étroite par rapport à la section efficace calculée en approximation Reich-Moore. Aucune différence n'apparaît dans la section efficace de diffusion élastique qui présente pour les deux résonances un profil identique entre les deux calculs (Fig. V.6.4).

La section efficace de diffusion élastique est naturellement moins sensible aux effets de l'approximation étant donné que cette dernière porte sur les voies de désexcitation radiatives uniquement. Néanmoins, elle pourrait être impactée lors d'un ajustement de la section efficace totale pour les noyaux dont la réaction de capture est significative par rapport aux réactions concurrentes.

La section efficace de capture est sensible à la méconnaissance du signe des amplitudes des voies de désexcitation radiative individuelles. Deux tests (en Fig. V.6.5) ont été réalisés pour mesurer son impact : a) en imposant les signes négatifs pour l'une des résonances b) en distribuant les signes aléatoirement pour chaque résonance (21 voies Γ_{γ_i} de signes - et + alternativement). On constate qu'en modifiant les signes, nous modifions les interférences puisque les deux résonances sont de spin-parité identiques (2^-).



(a)



(b)

FIGURE V.6.5 – Sections efficaces de capture neutronique du ^{23}Na calculées par TORA en matrice R exacte obtenues en testant l'impact des signes des largeurs des voies de désexcitation radiative individuelles (valeurs numériques reportées dans le tableau III.3.1, chapitre II). Sur le graphe (a) les signes sont distribués aléatoirement (ici, des signes + et - alternativement) pour chaque résonance. Sur le graphe (b) les signes sont choisis positifs sur une des résonances et négatifs sur l'autre.

V.6.3 Imprécision apportée par l'approximation Reich-Moore pour un noyau cible lourd (^{238}U)

Nous calculons ici la section efficace de capture neutronique pour l' ^{238}U par méthode hybride (Reich-Moore+ Matrice R) dite « pseudo-matrice R ». Dans cette méthode, l'élément de la matrice R est obtenu ainsi

$$R_{cc'} = \sum_{\lambda} \frac{\gamma_c \gamma_{c'}}{E_{\lambda} - E - i\gamma_{\lambda\gamma_{\text{tot}}'}} \quad (\text{V.6.1})$$

Avec $\lambda\gamma_{\text{tot}'}$ représentant la portion de la somme des voies de désexcitation individuelles non mesurées. Dans la formule V.6.1, c' contient aussi bien la voie neutron que les voies de désexcitation γ individuelles connues.

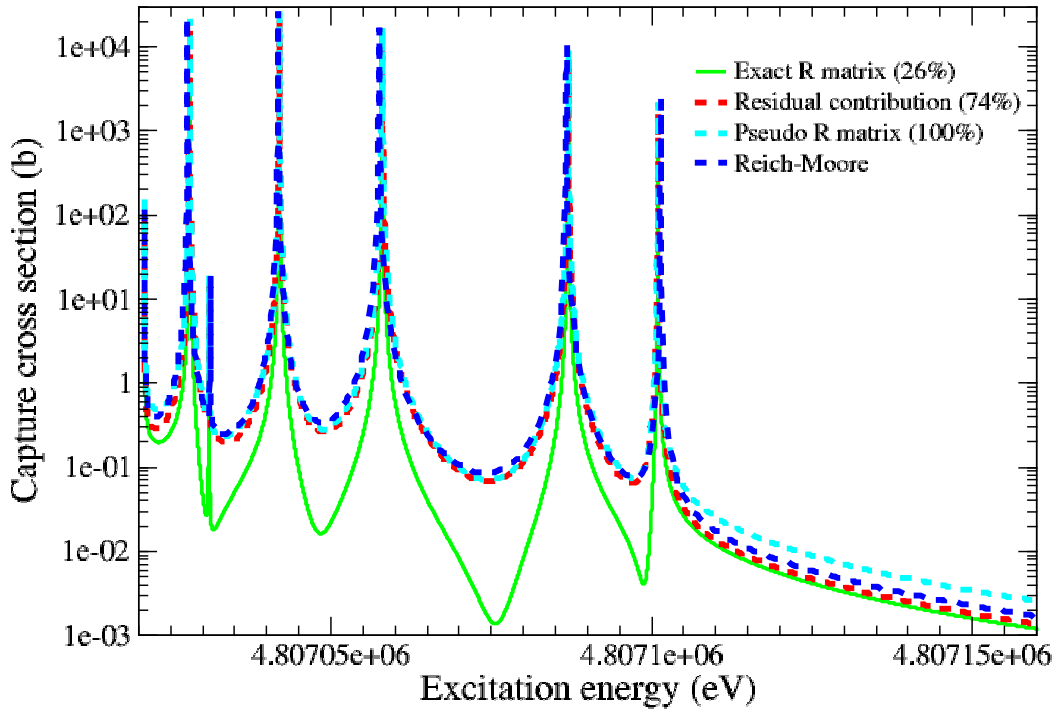


FIGURE V.6.6 – Section efficace de capture neutronique de l' ^{238}U . Comparaison entre les sections calculées par TORA en pseudo-matrice R et en Reich-Moore. Les amplitudes réduites de la voie neutron sont converties à partir des largeurs des résonances extraites du fichier de la bibliothèque JEFF-3.1 tandis que les largeurs des voies de désexcitation radiatives individuelles sont fournies par Price et *al* [94] (voir Tableau III.3.2, chap. III).

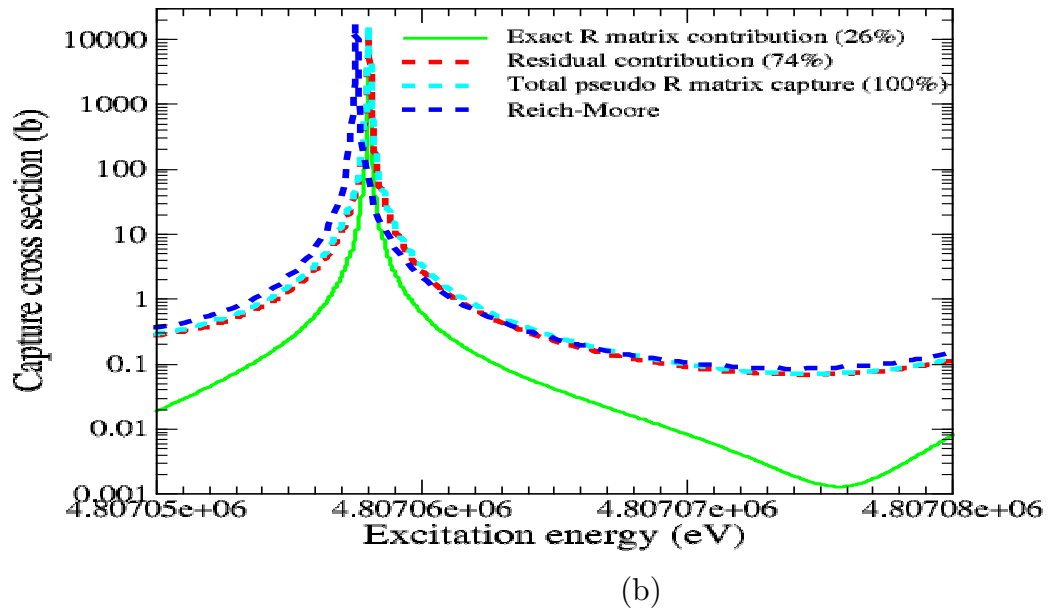
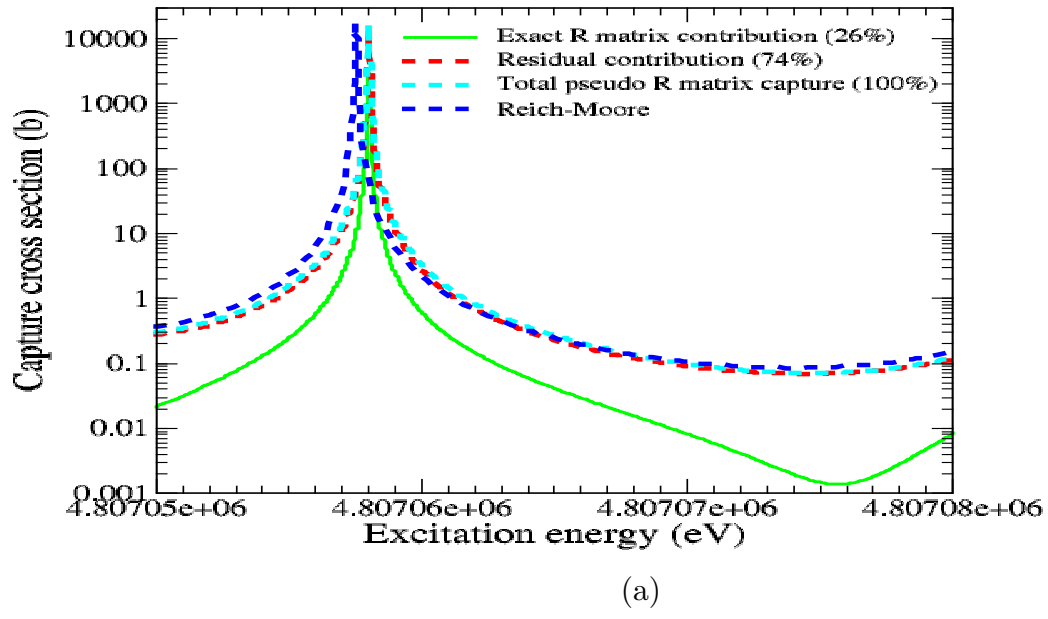


FIGURE V.6.7 – Sections efficaces de capture neutronique de l' ^{238}U calculées par TORA en pseudo-matrice R et sous l'approximation Reich-Moore. Les amplitudes réduites de la voie neutron sont traduites des largeurs des résonances extraites du fichier de la bibliothèque JEFF-3.1. Le graphe (a) concerne les résultats obtenus pour le test I. Le graphe (b) pour le test II.

La section efficace pseudo-matrice R, $\sigma_{\gamma,\text{pseudoR}}$, est obtenue en calculant en même temps la section efficace de capture partielle matrice R $\sigma_{\gamma,\text{EXPL}}$ pour les

voies individuelles connues (procédure du paragraphe IV.3.1.2 qui aboutit à la formule IV.3.6) et la section efficace de capture partielle RM $\sigma_{\gamma,\mathbf{NEXPL}}$ pour les voies individuelles non décrites (procédure du paragraphe IV.3.1.4 qui aboutit à la formule IV.3.12). L'indice **EXPL** compte pour explicite et **NEXPL** pour non explicite. Nous précisons ici que c contient exclusivement la voie neutron pour les formules IV.3.6 et IV.3.12. c' contient uniquement les voies individuelles de désexcitation radiatives pour la formule IV.3.6 (matrice R) et aussi bien la voie neutron que les voies individuelles de désexcitation radiatives pour la formule IV.3.12 (RM). La section efficace de capture pseudo-matrice R (capture totale) est obtenue en faisant la somme de deux contributions puisque la partie matrice R ne donne pas directement la section efficace de capture

$$\sigma_{\gamma,\mathbf{pseudoR}} = \sigma_{\gamma,\mathbf{EXPL}} + \sigma_{\gamma,\mathbf{NEXPL}} \quad (\text{V.6.2})$$

Nous rappelons que les calculs sont effectués sur seulement 6 résonances contenant chacune 23 voies de désexcitation radiatives (voir tableau III.3.2, chapitre II). Cinq des six résonances sont de $J^\pi = \frac{1}{2}^+$ et la sixième est de $J^\pi = \frac{3}{2}^-$. Ces résonances couvrent une plage allant de 6,7 à 81 eV en énergies neutron.

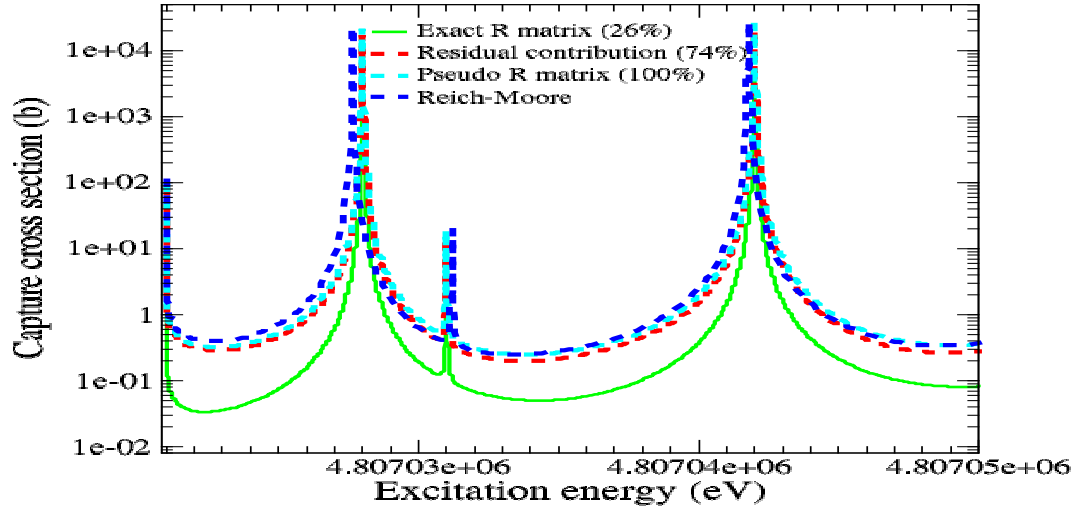
Le résultat est constitué d'une contribution matrice R exacte des largeurs de désexcitation radiatives individuelles ($\sum_i \Gamma_{\gamma i} < 26\% \Gamma_{\gamma \text{tot}}$) décrites par l'expérience et pour le reste par une largeur de capture totale résiduelle ($\gamma_{\lambda\gamma \text{tot}}$ équivalente à 74% de la décroissance).

D'une façon générale (Fig. V.6.6), la contribution du résiduel (74%) domine largement celle des largeurs individuelles (26%) entre les résonances mais les deux contributions asymptotiques sont équivalentes. Le profil de la section efficace de capture totale est sans surprise aligné sur la contribution du résiduel dans les résonances. Néanmoins, le calcul de la contribution des voies de désexcitation individuelles nécessite d'étudier l'effet du choix du signe de ces dernières.

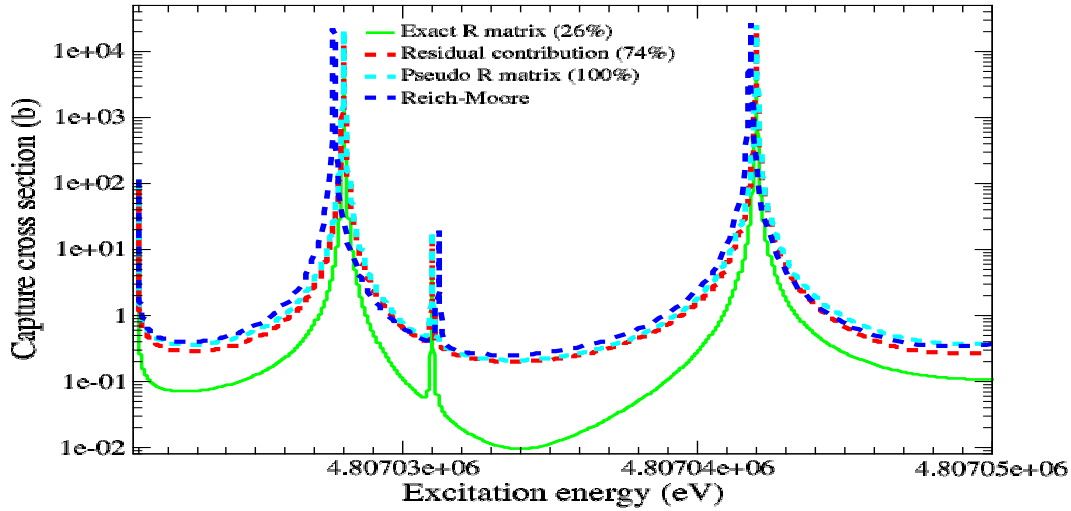
Nous définissons les tests suivant :

- test I : signes des amplitudes des voies de désexcitation radiatives individuelles telles que définis par Price et *al* [94] (voir Tableau III.3.2 dans le chap. III, signes expérimentaux essentiellement > 0) ;
- test II : signes des amplitudes des voies de désexcitation radiatives individuelles tous imposés positifs (rappel : 5 résonances du fichier expérimental avaient une amplitude négative) ;
- test III : signes des amplitudes des voies de désexcitation radiatives individuelles imposés positifs pour trois résonances et négatifs pour trois autres, et cela de manière alternative (une résonance avec signes positifs suivie d'une résonance avec signes négatifs et ainsi de suite) ;

- test IV : signes des amplitudes des voies de désexcitation radiatives individuelles imposés pour toutes les résonances alternativement positifs et négatifs au sein d’une même résonance (simulant une distribution aléatoire).



(a)



(b)

FIGURE V.6.8 – Idem V.6.7 mais sur l’intervalle réduit aux énergies d’excitation entre 4807020 et 4807080 eV. Le graphe (a) montre les résultats obtenus pour le test III et (b) montre les résultats obtenus pour le test IV.

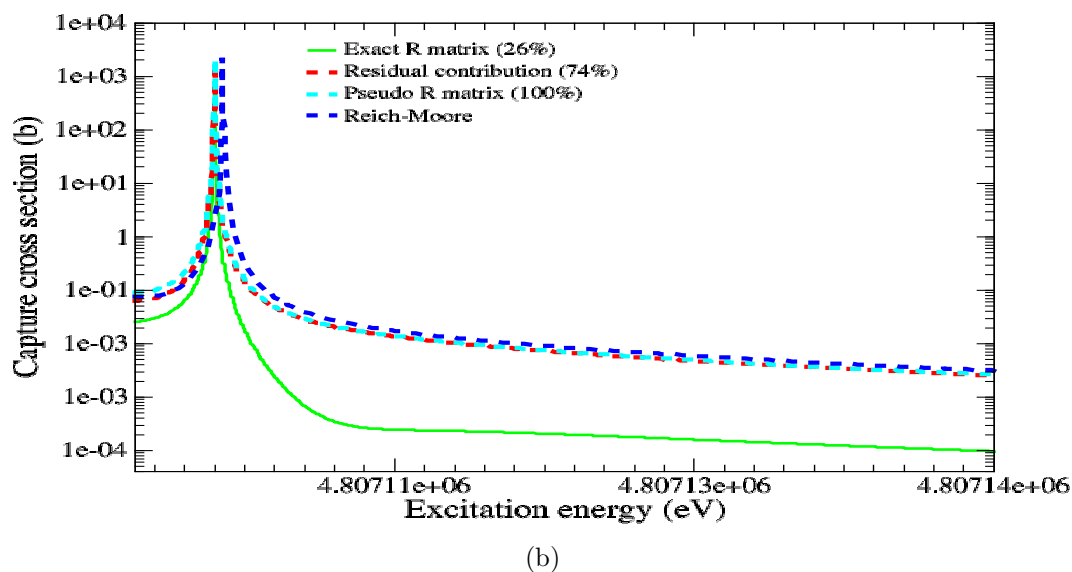
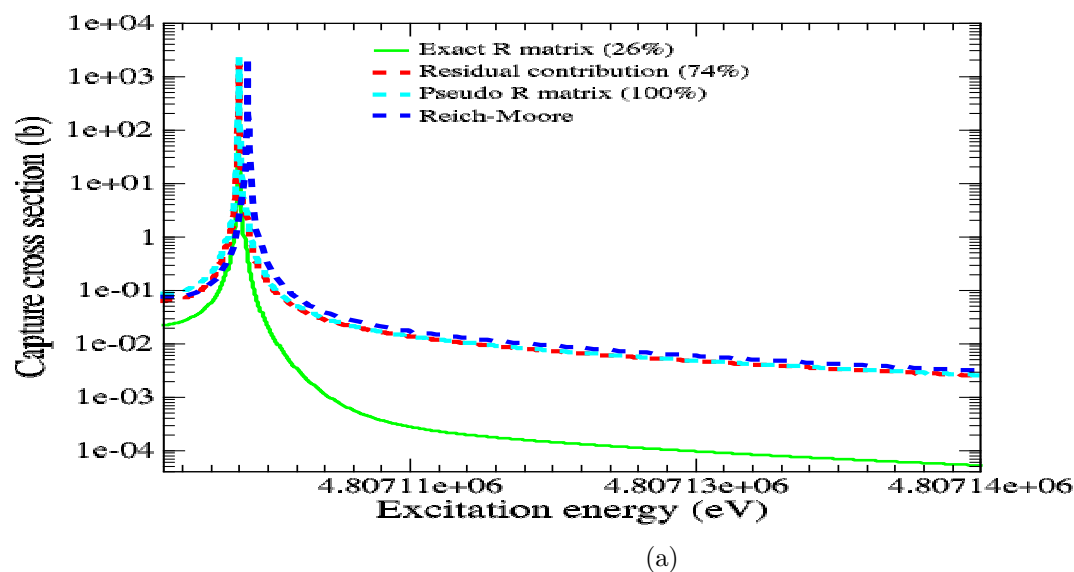
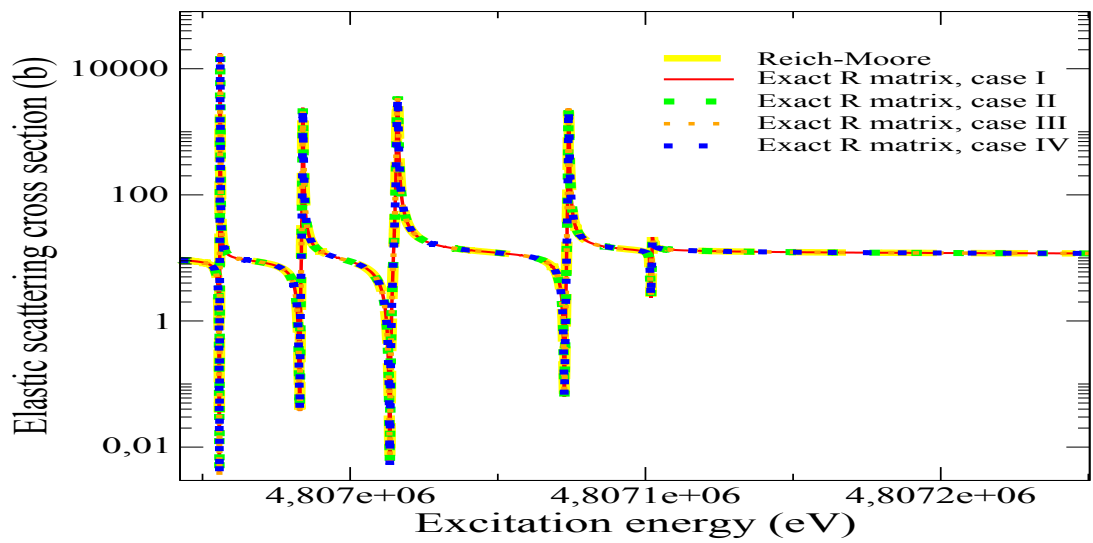
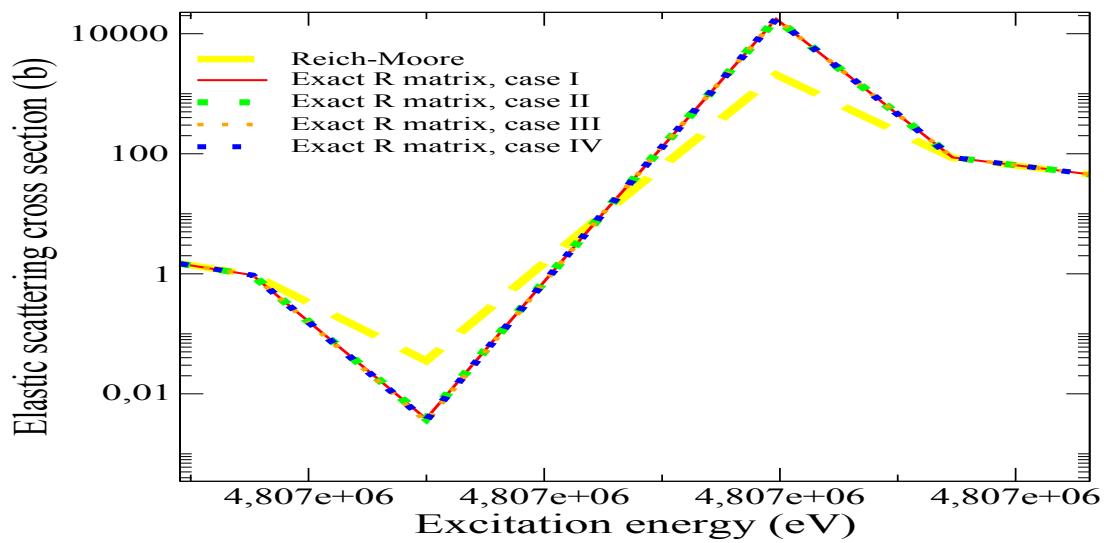


FIGURE V.6.9 – Idem V.6.7 mais sur l'intervalle réduit aux énergies d'excitation entre 4807097 et 4807140 eV. Le graphe (a) montre les résultats obtenus pour le test III et (b) montre les résultats obtenus pour le test IV.



(a)



(b)

FIGURE V.6.10 – Sections efficaces de diffusion neutronique de l' ^{238}U calculées par TORA en pseudo-matrice R comparée au calcul Reich-Moore (couleur jaune). Les cas I à IV correspondent respectivement aux calculs effectués suivant les descriptions des tests I à IV. Le graphe (b) est un agrandissement du graphe (a) au niveau de la première résonance.

La Fig. V.6.7 présente les résultats des tests I [graphe (a)] et II [graphe (b)]. Les deux alternatives montrent des profils similaires et un léger décalage au niveau du pic de la résonance par rapport au calcul Reich-Moore. Les résultats obtenus pour les tests III [graphe (a)] et IV [graphe (b)] sont affichés d'une façon plus détaillée pour l'intervalle des énergies d'excitation de 4807020 à 4807080 eV (Fig. V.6.8) et de 4807097 à 4807140 eV (Fig. V.6.9). Les deux choix de jeux de signes montrent des profils différents de la contribution des voies de désexcitation radiative individuelles (Exact R matrix ($\Gamma_\gamma \equiv 26\%$)) entre les résonances (fig. V.6.8) et loin des résonances (fig. V.6.9). La valeur des signes joue clairement sur les interférences entre résonances avec une valeur minimale abaissée dans le cas du test IV [fig. V.6.8, graphe (b)]. La contribution des voies de désexcitation individuelles devenant très faible loin des résonances dans les deux cas, le profil de la section de capture totale reste constamment aligné sur celui de la contribution du résiduel. Le profil de la section efficace de capture obtenue par approximation Reich-Moore est quant à lui très proche de celui de la contribution du résiduel. On constate que le calcul RM rejoint les deux calculs pseudo-matrice R. Effet attendu, puisque la distribution plutôt aléatoire des signes correspond à l'hypothèse RM.

Nous avons également effectué un calcul pseudo-matrice R de la section efficace de diffusion élastique pour l' ^{238}U . La Fig. V.6.10 présente les résultats du calcul de la section efficace de diffusion élastique pour les 4 tests et par Reich-Moore. Ce dernier est effectué en choisissant $\Gamma_{\gamma\text{tot}} = \sum_i \Gamma_{\gamma i}$. Nous observons que le changement de signe, quel qu'il soit, n'a pas d'impact sur la section efficace de diffusion élastique. Toutefois, le calcul Reich-Moore et le calcul pseudo-matrice R présentent des différences significatives [voir graphe (b)] sur la première résonance de l' ^{238}U (6,7 eV en énergie neutron). Ceci est conforme au cas d'un noyau lourd capturant.

Nature du calcul	Partie décrite : matrice R exacte (en b)	Capture totale : pseudo-matrice R (en b)
I	1.224	2.84
Bouland (2005), cas I	-	3.07
II	1.243	2.86
III	0.366	1.98
Bouland (2005), cas III	-	1.88
IV	0.161	1.78

TABLE V.6.5 – Section efficace de capture neutronique par l' ^{238}U à l'énergie thermique. Pour toutes les options (test I à IV), la contribution résiduelle ($\sigma_{\gamma,\text{NEXPL}}$) reste inchangée et égale à 1.619 b. Les valeurs obtenues (en gras) par O. Bouland [96] pour les options I et IV sont ajoutées en guise de référence.

Les valeurs de la section efficace de capture neutronique par l' ^{238}U à l'énergie thermique sont présentées dans le Tableau V.6.5 pour les calculs pseudo-matrice R. Pour mémoire, nous donnons la valeur obtenue à cette énergie en Reich-Moore, laquelle est de 2.16 b. L'impact du calcul pseudo-matrice R est notable sur la valeur thermique.

V.6.4 Conclusion générale sur les comparaisons Reich-Moore et matrice R (ou pseudo-matrice R)

Les résultats du calcul matrice R exacte pour les sections efficaces neutroniques du ^{23}Na montrent qu'il est aisé de réaliser des calculs sans approximations à condition de disposer de l'information expérimentale suffisante sur les voies de désexcitation radiative individuelles (γ_{γ_i}). Pour la question du calcul aux énergies des pôles (E_λ) de valeur infinie, la procédure matrice R exacte dans TORA élimine tout simplement les points concernés sur la grille en énergie. Nous voudrions aussi attirer l'attention sur le temps de calcul qui, en guise d'exemple, est de 222 fois supérieur à celui du calcul RM sur une grille en énergie identique (calcul de la section efficace de capture de ^{23}Na). La sensibilité à l'approximation Reich-Moore est infiniment plus marquée pour la section efficace de capture que pour la section efficace de diffusion élastique dans le contexte $\sigma_\gamma \ll \sigma_s$. Dans le cas où la somme totale des voies de désexcitation radiative individuelles ne couvre pas la largeur totale de désexcitation radiative évaluée pour la résonance, un calcul hybride dit "pseudo-matrice R", dans lequel la contribution des voies individuelles est traitée par calcul matrice R tandis que la contribution des voies individuelles manquantes est ajoutée sous la forme classique Reich-Moore, est réalisable. La comparaison hybride / Reich-Moore montre peu de différences comme le montre l'application sur le calcul de la section efficace de capture neutronique par l' ^{238}U . Par contre, les résultats montrés dans ce paragraphe confirment l'importance de connaître le signe des amplitudes pour une modélisation fiable en matrice R spécialement si l'on dispose d'une information expérimentale pour un grand nombre de résonances (cas de l' ^{238}U). Nos conclusions sont en adéquation avec celles de O. Bouland [96] pour la section efficace à l'énergie thermique. En effet, à la lumière du Tableau V.6.5, on constate que la valeur de la section efficace obtenue par calcul pseudo-matrice R est plus élevée que celle obtenue par calcul Reich-Moore ($\approx + 32\%$ en utilisant le fichier expérimental ou, de manière équivalente, $\approx + 33\%$ en prenant les amplitudes γ_{γ_i} toutes positives). Par contre, la valeur de la section efficace obtenue par calcul hybride en alternant les signes des amplitudes γ_{γ_i} est en-dessous de celle obtenue par calcul Reich-Moore ($\approx 17\%$ de moins). Toutefois, ces valeurs numériques obtenues en matrice R sont différentes de celles rapportées par O. Bouland [96] (+7% cas I et -5% cas III). Une investigation sur la cause de ces différences est à réaliser.

V.7 Conclusion sur le chapitre

Le passage au cours de cette thèse du référentiel de la particule incidente à celui du CM du système composé en se référant au niveau fondamental de ce dernier, permet une unicité de la solution dans l'ajustement à partir de la base expérimentale la plus vaste possible. Cette unicité permet, mais aussi impose, de repenser les causes pouvant mener lors d'un ajustement classique à l'obtention de paramètres, sinon non physique, réceptacles de réactions multiples. C'est ainsi que nous avons été conduits à reconsidérer l'importance d'une bonne représentation des conditions expérimentales (Doppler et résolution en énergie). Grâce à notre démarche unifiée, nous avons évalué l'impact que pouvait avoir l'inversion de données. En ce qui concerne le domaine en énergie des réactions du NC (domaine RRR), cet impact reste faible. Néanmoins, à plus haute énergie d'excitation, la question serait à reconsidérer surtout en terme de signification physique des paramètres évalués.

Dans notre volonté d'une recherche de qualité, l'importance d'une correcte modélisation des niveaux externes est fondamentale. Nous constatons qu'en ce qui concerne la valeur de la section efficace thermique, expérimentalement bien connue ($\pm 1\%$), une mauvaise estimation des états liés comme un choix du Reich-Moore à la place de la matrice R, a dans les deux cas un impact significatif. Ces deux sources d'imprécision conduisent à une erreur significative sur l'estimation des paramètres de la première résonance et des rayons de diffusion.

Conclusion

Ce sujet de thèse dont la proposition était de promouvoir un changement substantiel de philosophie dans l'évaluation des sections efficaces neutroniques, a trouvé écho dans notre communauté scientifique. En effet, notre idée justifiée par une volonté de réduction encore plus significative des incertitudes sur les données nucléaires, s'est aussi matérialisée indépendamment dans les autres laboratoires qui développent des outils concurrents d'analyses de mesures expérimentales et d'évaluation des paramètres de modèles pour décrire les grandeurs observées. Cet « air du temps » reflète bien qu'une nouvelle ère commence en matière de données nucléaires avec une précision et une universalité permettant un socle commun entre les différents pans de la physique (neutronique, astrophysique et structure de la matière). L'échange et la comparaison entre ces derniers des paramètres fondamentaux, qui devraient devenir systématiques au cours de la prochaine décade, soulèvent la question des formats choisis pour le stockage des informations et de la compatibilité entre outils de calculs. Un exemple de format est le format ENDF [28] qui est déterminant pour la physique des réacteurs depuis 50 ans. Il est à la fois le gardien de toute la science de l'évaluation et son plus grand ennemi avec la recherche du compromis entre sauvegarde maximale de l'information et minimisation du volume de stockage. Le stockage des données sous un format spécifique devrait disparaître dans la nouvelle génération de codes de calcul de réacteurs et ainsi faire disparaître la première source historique d'imprécision qui est la convolution des données originelles.

En se plaçant dans le référentiel du centre de masse avec origine de l'énergie d'excitation comme niveau fondamental du noyau correspondant au système composé, ce travail de thèse permet un rattachement aux calculs de structure nucléaire mais aussi aux informations extraites des spectroscopies photoniques et particules chargées. Cette méthode est particulièrement bien adaptée à l'évaluation des noyaux légers qui présentent une densité d'états faible et donc un nombre limité d'états liés dont les caractéristiques nucléaires peuvent être connues. Dans cette thèse, nous avons limité notre travail essentiellement au domaine des résonances résolues en énergie (RRR) et démontré la méthode pour l'analyse des mesures microscopiques relatives à l'oxygène 17. Une question rémanente dans toute évaluation est le choix des niveaux extérieurs au domaine d'énergie d'analyse. Ces niveaux ont des contributions à longue portée qui s'étendent dans le

domaine d'analyse (zone intérieure) avec la conséquence qu'une méconnaissance de leurs caractéristiques nucléaires génère une méconnaissance de celles des niveaux intérieurs. Ce travail donne une clé pour résoudre ce problème en fournissant une solution à la fois pour les niveaux d'énergie inférieure au domaine RRR (niveaux liés) et pour les niveaux supérieurs (continuum). La connaissance sur les niveaux liés est empruntée à la base d'astrophysique/ structure nucléaire tandis que celle du continuum est extraite de calculs statistiques (calcul par modèle optique).

L'approche suivie au cours de ce travail permet d'espérer dans un futur proche, en multipliant les types d'informations expérimentales alimentant l'ajustement et la définition d'un jeu unique consensuel de paramètres, un bond d'envergure sur la précision des sections efficaces évaluées. Le contenu physique des paramètres de résonance en ressortira renforcé si l'on n'en oublie pas d'étudier les sources d'imprécision secondaires que sont notamment : le traitement des niveaux extérieurs au domaine d'analyse et l'utilisation de l'approximation Reich Moore au lieu de la matrice R exacte. Nous avons démontré que cette dernière a au moins un impact significatif sur la valeur de la section efficace de capture au point thermique sachant que cette dernière est souvent connue au pourcent. On conçoit alors le poids de l'approximation RM et de la modélisation correcte des états liés sur la signification physique des paramètres puisque ces deux sources d'imprécision jouent toutes les deux sur la valeur calculée au point thermique. Au travers de l'approche mise au point dans ce travail de thèse, nous devrons donc maintenant nous concentrer sur les sources d'incertitudes peu ou prou considérées jusqu'à présent.

Perspectives

Au cours de ce travail de thèse, nous avons accordé une attention particulière à la question du traitement des états liés. Lors de la comparaison entre la base d'astrophysique [16] et la base de la physique des réacteurs [38], nous avons constaté des différences sur le type d'information communiqué (voir chap II). De notre point de vue, nous recommandons une approche permettant de concilier les deux bases d'information : l'absence totale de voie neutron pour les états liés observée dans le fichier d'astrophysique ne permettant pas de bien reproduire la section efficace mesurée à l'énergie thermique, nous rejoignons l'idée de F. Fröhner et O. Bouland [37] qui suggèrent la présence d'une voie neutron sur l'état lié s le plus proche de S_n . Toutefois, la pénétrabilité étant nulle en dessous du S_n , la définition de la largeur de la voie souvent exploitée pour convertir cette dernière en amplitude réduite n'est pas applicable. La tabulation d'amplitudes réduites à la place et au lieu des largeurs des résonances constitue une réponse appropriée. Notre position étant le fruit d'une première comparaison entre deux bases dans le référentiel unifié du CM, nous recommandons des études futures pour trancher définitivement le sujet de la signification physique d'une amplitude réduite sur un état lié.

Sur la base du travail déjà accompli et du référentiel unifié traitant simultanément toutes les mesures expérimentales (sans inversion) comme la Fig.V.7.2 le suggère, nous espérons que cette thèse contribuera à trancher sur la question de la bonne normalisation de la section efficace $^{16}\text{O}(n, \alpha)^{13}\text{C}$. En effet, nous rappelons qu'une différence de normalisation de 30% à 40% constitue toujours un sujet en suspens malgré de larges discussions en rapport avec cette question au cours du projet CIELO.

Au cours de ce travail, nous avons reconstruit une large base expérimentale autour du système oxygène-17 et donné les bases précises d'un nouvel ajustement (traitement des réactions directes), ce qui renforce la possibilité d'obtenir des paramètres de résonances résolues pour l'oxygène-16 cible de qualité renforcée et sous forme de paramètres de structure nucléaire (énergies d'excitation et amplitudes réduites).

Avec ce jeu unique de paramètres nucléaires de qualité, nous pourrions aussi nous intéresser à l'impact de la section efficace $C - {}^{13}(\alpha, n)O - 16$ ainsi recalculée, dans un calcul de source de neutrons intrinsèque pour un combustible carbure tel envisagé dans la IVème génération de réacteurs. En particulier nous souhaitons une évaluation de l'impact d'une erreur possible de normalisation de 30% à 40%. En effet, un calcul de source $C - {}^{13}(\alpha, n)O - 16$ (Fig. V.7.1) réalisé sur le combustible (UPuAm)C avec la section efficace issue des paramètres de résonances du fichier JEFF-33T3 montre bien que l'erreur de normalisation commise sur la section efficace $C - {}^{13}(\alpha, n)O - 16$ se répercute sur le calcul intégral de la source.

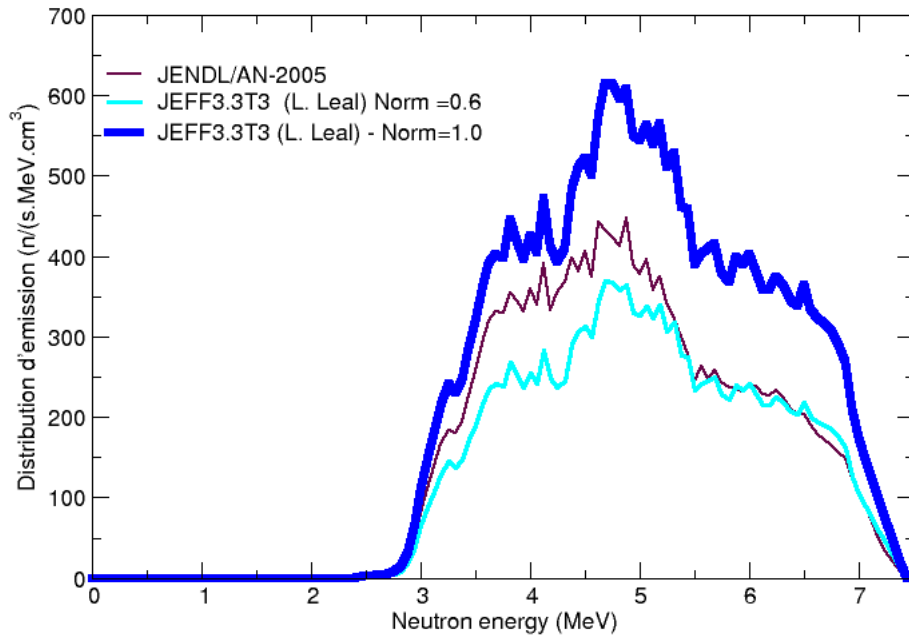


FIGURE V.7.1 – Source de neutron $C - {}^{13}(\alpha, n)O - 16$ estimée par calcul sur le combustible (UPuAm)C. La section efficace théorique $C - {}^{13}(\alpha, n)O - 16$ utilisée est calculée sur base des paramètres de résonances du fichier JEFF-33T3 en appliquant une normalisation $N = 1$ puis $N = 0,6$. La normalisation appliquée se répercute sur le calcul intégral de la source. Les données obtenues à partir de la section efficace évaluée de JENDL/AN-2005 sont utilisées ici comme témoin.

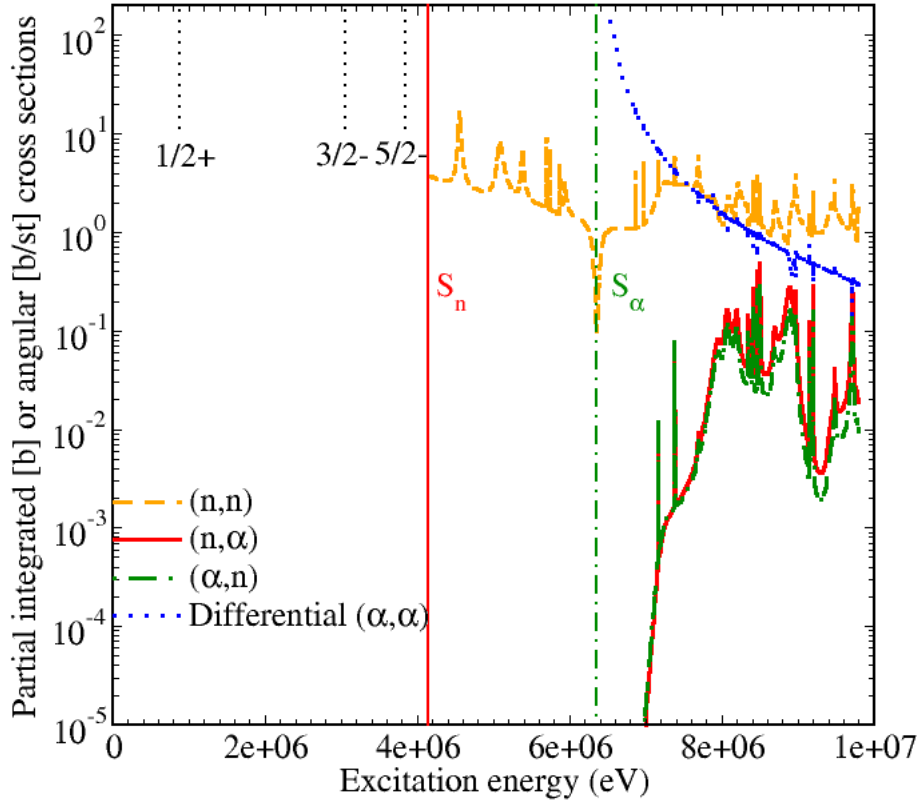


FIGURE V.7.2 – Modélisation des sections efficaces dans le référentiel unifié du CM du système $^{17}\text{O}^*$ par TORA. Plus précisément les réactions intégrées en angle $^{16}\text{O}(n,n)^{16}\text{O}$, $^{16}\text{O}(n,\alpha)^{13}\text{C}$, $^{13}\text{C}(\alpha,n)^{16}\text{O}$ et la réaction différentielle $^{13}\text{C}(\alpha,\alpha)^{13}\text{C}$ à l'angle de 54,7 degrés sont affichées. Les 3 barres verticales en pointillé représentent les positions des niveaux liés (de $J^\pi = (\frac{1}{2}^+, \frac{3}{2}^-, \frac{5}{2}^-)$) de structure nucléaire dans le référentiel du fondamental de ^{17}O .

Enfin, le souci de cohérence de données qui constitue la principale motivation de cette thèse nous amène aussi à nous intéresser à la question du choix arbitraire des conditions aux limites. Nous rappelons que le décalage énergétique observé sur les résonances est historiquement corrigé de manière arbitraire soit en prenant des conditions aux limites réelles constantes $B_c = -\ell$ soit variantes avec l'énergie $B_c = S_c$. Nous avons vu par des calculs simples de section efficace suivant les deux choix que ce décalage n'est pas anodin (voir Fig. I.5.1) pour le système composé $^{17}\text{O}^*$. Nous souhaitons une évaluation de l'impact de ces choix par un réajustement des paramètres des résonances dans les deux cas.

Bibliographie

- [1] A. M. Lane and R. G. Thomas, “R-Matrix Theory of Nuclear Reactions,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 30, p. 257, 1958.
- [2] W. Hauser and H. Feshbach, “The inelastic scattering of Neutrons,” *Phys. Rev.*, vol. 87, p. 366, 1952.
- [3] O. Bouland, “Pratiques de la théorie de la matrice-R formelle dans l’art de l’évaluation,” HDR, Université de Bordeaux-I, 2014.
- [4] O. Bouland, “Amélioration du calcul de l’autoprotection des résonances résolues par un traitement quasi-exact du ralentissement des neutrons,” Ph.D. dissertation, Université Paris-sud-Orsay, 1994.
- [5] P. Archier et al., “COMAC – Nuclear data covariance matrices library for reactor applications,” in *Int. Conf. PHYSOR*, 2014.
- [6] P. Archier, “Contribution à l’amélioration des données nucléaires neutroniques du sodium pour le calcul des réacteurs de génération IV,” Ph.D. dissertation, Université de Grenoble, 2011.
- [7] P. Tamagno et al., “From low to high energy nuclear data evaluations ; Issues and perspectives on nuclear reaction models and covariances,” *Eur. Phys. J. A*, vol. 51, p. 181, 2015.
- [8] C. De Saint Jean et al, “A Monte Carlo Approach to Nuclear Model Parameter Uncertainties Propagation,” *Nucl. Sci. Eng.*, vol. 161, p. 363, 2009.
- [9] K. H. Böckhoff et al., “Electron Linear Accelerators for Fast Neutron Data Measurements in Support of Fusion Energy Applications,” *Nucl. Sci. Eng.*, vol. 106, p. 192, 1990.
- [10] W. Mondelaers and P. Schillebeeckx, “GELINA, a neutron time-of-flight facility for neutron data measurements,” *Notizario*, vol. 11, p. 19, 2006.
- [11] M. E. Overberg et al, “Photoneutron target development for the RPI linear accelerator,” *Nucl. Inst. Meth. Phys. Res. A*, vol. 438, p. 253, 1999.

- [12] R. O. Sayer, L. C. Leal, N. M. Larson, R. R. Spencer and R. Q. Wright, “R-Matrix evaluation of O16 neutron cross section up to 6.3 MeV,” ORNL report, Tech. Rep. ORNL/TM-2000/2012, 2000.
- [13] G. M. Hale, in *Int. Symposium on Nuclear Data Evaluation Methodology*, 1992, p. 306.
- [14] G. Boutoux, “Sections efficaces neutroniques via la méthode de substitution ,” Ph.D. dissertation, Université de Bordeaux-I, 2012.
- [15] I. J. Thompson et al., “Verification of R-matrix calculations for charged-particle reactions in the resolved resonance region for the ^7Be system,” *Eur. Phys. J. A*, vol. 55, article accepted.
- [16] F. Ajzenberg-Selove, “Energy levels of light nuclei A=16-17,” *Nucl. Phys. A*, vol. 460, p. 1, 1986.
- [17] A. J. Koning and J. P. Delaroche, “Local and global nucleon optical models from 1 keV to 200 MeV,” *Nucl. Phys. A*, vol. 713, p. 231, 2003.
- [18] A. Koning, S. Hilaire and S. Goliery, “Talys-1.4,” Tech. Rep., 2011.
- [19] V. F. Weisskopf, “Nuclear Physics,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 29, p. 174, 1957.
- [20] N. Bohr, “Neutron Capture and Nuclear Constitution,” *Nature*, vol. 137, p. 344, 1936.
- [21] P. Tamagno, “Challenging fission cross section simulation with long standing micro-microscopic model of nucleus potential energy surface,” Ph.D. dissertation, Université de Bordeaux, 2015.
- [22] R. E. Le Levier and D. S. Saxon, “An Optical Model for Nucleon-Nuclei interaction,” *Phys. Rev.*, vol. 87, p. 40, 1952.
- [23] H. Feshback and V. F. Weisskopf, “A Schematic Theory of Nuclear Cross Sections,” *Phys. Rev.*, vol. 76, p. 1550, 1949.
- [24] R. D. Woods and D. S. Saxon, “Diffuse Surface Optical Model for Nucleon-Nuclei Scattering,” *Phys. Rev.*, vol. 95, p. 577, 1954.
- [25] H. A. Bethe, “Theory of Disintegration of Nuclei by Neutrons,” *Phys. Rev.*, vol. 47, p. 747, 1935.
- [26] E. Vogt, “Theory of Low Energy Nuclear Reactions,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 34, p. 723, 1962.
- [27] A. M. Lane and J. E. Lynn, “Anormous Radiative Capture in the Neutron Resonance Region : Analysis of the Experimental Data of the Electric Dipole Transitions,” *Nucl. Phys.*, vol. 17, p. 586, 1960.

- [28] M. Herman and A. Trkov, “ENDF-6 Formats Manual. Data Formats and Procedures for the Evaluated Nuclear Data File ENDF/B-VI and ENDF/B-VII,” BNL, Tech. Rep., 2010.
- [29] R. B. O. Bouland and N. M. Larson, “SAMQUA-A program for generating all possible combination of quantum numbers leading to a same nucleus state in the framework of the r-matrix code SAMMY,” Tech. Rep. JEFDOC-926/ENDF-363, 2003.
- [30] C. Bloch, “Une formulation unifiée de la théorie des réactions nucléaires,” *Nucl. Phys.*, vol. 4, p. 503, 1957.
- [31] J. E. Lynn, *The theory of Neutron Resonance Reactions*. Oxford : Clarendon Press, 1968.
- [32] L. Leal, “Two Body Problems : Schrödinger equation,” Communication privée à Cadarache, 2019.
- [33] M. H. Hull jr. and G. Breit, “Coulomb Wave Functions,” in *ENCYCLOPEDIA OF PHYSICS, NUCLEAR REACTION II : THEORY*. Berlin : Springer-Verlag, 1959, vol. XLI/1, p. 408.
- [34] N. F. Mott and H. S. W. Massey, *The Theory of Atomic Collisions*, 2nd ed. Oxford University Press, 1949.
- [35] J. M. Blatt and M. C. Biedenharn, “The Angular Distribution of Scattering and Reaction Cross Sections,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 24, p. 258, 1952.
- [36] P. G. Burke and C. J. Joachain, *Theory of Electron-Atom Collisions*. New York : Prentice Hall, 1995.
- [37] F. H. Fröhner and O. Bouland, “Treatment of External Levels in Neutron Resonance Fitting : Application to the Nonfissile Nuclide ^{52}Cr ,” *Nucl. Sci. Eng.*, vol. 137, p. 70, 2001.
- [38] L. Leal, E. Ivanov, G. Noguere, A. Plompen, S. Kopecky, “Resonance parameter and covariance evaluation for ^{16}O up to 6 MeV,” *EPJ Nuclear Sci. Technol.*, vol. 2, p. 43, 2016.
- [39] C. W. Reich and M. S. Moore, “Multilevel Formula for the Fission Process,” *Phys. Rev.*, vol. 111, p. 929, 1958.
- [40] F. H. Fröhner, “Evaluation and Analysis of Nuclear Resonance Data,” OECD/NEA, Tech. Rep., 2000.
- [41] A. Nizigama, P. Tamagno and O. Bouland, “Testing Compound Nucleus Hypothesis Across the ^{17}O Nucleus Excitation,” *EPJ Web Conf.*, vol. 211, p. 02001, 2019.

- [42] C. Lecointe et al. , “Final report on technical data, costs and life cycle inventories of nuclear power plants,” EDF, Tech. Rep. D 14.2–RS 1a, 2007.
- [43] IRSN. (2015) Examen des systèmes nucléaires de 4ème génération. [Online]. Available : https://www.irsn.fr/FR/expertise/rapports_expertise/surete/Pages/Rapport-Generation-IV_04-2015.aspx
- [44] E. Federici, A. Courcelle, P. Blanpain and H. Cognon, “Helium production and behavior in nuclear oxide fuels during irradiation in LWR,” in *Proc. Int. LWR Fuel Perform. Meet. San Fr.*, California, USA, 2007, p. 664.
- [45] A. Capote et al., “RIPL-Reference Input Parameter Library for Calculation of Nuclear Reactions and Nuclear Data Evaluations,” *Nucl. Data Sheets*, vol. 110, p. 3107, 2009.
- [46] I. R. Birss, “Helium production in reactor materials,” *J. Nucl. Mat.*, vol. 34, p. 241, 1970.
- [47] A. Courcelle. (2005) Need for $^{16}\text{O}(n, \alpha)$ measurement and evaluation in the range 2.5 to 10 mev. HPRL request in <http://www.nea.fr/html/dbdata/hprl/>. [Online]. Available : [http://www.oecdnea.org/dbdata/hprl/tmp/Need%20for%20O16\(n,alpha\).pdf](http://www.oecdnea.org/dbdata/hprl/tmp/Need%20for%20O16(n,alpha).pdf)
- [48] A. Courcelle and R.D. McKnight, “Nuclear data for improved LEU-LWR reactivity predictions,” OECD/NEA, Tech. Rep. NEA/WPEC-22/ISBN 92-64-02317-8, 2006.
- [49] G. Noguère, O. Bouland, D. Bernard, A. Santamarina and G. Giorginis. (2007) Correction of the $^{16}\text{O}(n, \alpha_0)$ cross section below 6 mev for JEFF-3.2 β . JEF/DOC-1207.
- [50] M. B. Chadwick et al., “CIELO Collaboration Summary Results : International Evaluations of Neutron Reactions on Uranium, Plutonium, Iron, Oxygen and Hydrogen,” *Nuclear Data Sheets*, vol. 148, p. 189, 2018.
- [51] WPEC-SG40, “Results of the Collaborative International Evaluated Library Organisation (CIELO) project,” OECD, Tech. Rep. NEA No. 7498, 2019.
- [52] N. Soppera, M. Bossant and E. Dupont, “JANIS4 : An improved Version of the NEA Java-based Nuclear Data Information System,” *Nuclear Data Sheets*, vol. 120, p. 294, 2014.
- [53] S. Goliery and L. Siess, “The s-process Nucleosynthesis,” in *Proceedings IAU Symposium No. 228*, 2005, p. 451.
- [54] M. Lugaro et al., *Ap. J.*, vol. 586, p. 1305, 2003.

- [55] L. Siess, S. Goriely and N. Langer, “Nucleosynthesis of s-elements in rotating AGB stars,” *A&A*, vol. 415, p. 1089, 2004.
- [56] N. Stauff, “Etude conceptuelle d’un cœur de quatrième génération, refroidi au sodium, à combustible de type carbure,” Ph.D. dissertation, Université D’Orsay, Paris XI, 2011.
- [57] C. De Saint Jean et al., “Status of CONRAD, a nuclear reaction analysis tool,” *EDP Sciences*, vol. 1, p. 251, 2008.
- [58] P. Archier et al., “Recent developments in the CONRAD code regarding experimental corrections,” *EPJ Web. Conf.*, vol. 42, p. 02004, 2013.
- [59] P. Archier et al., “CONRAD evaluation code : development status and perspectives,” *Nuclear Data Sheets*, vol. 118, p. 488, 2014.
- [60] P. Archier et al., “Generation of ^{238}U covariance matrices by using the integral data assimilation technique of the CONRAD code,” *EPJ Web. Conf.*, vol. 106, p. 04015, 2016.
- [61] Edwin Privas, Cyrille De Saint Jean and Gilles Noguere, “On the use of the BMC to resolve Bayesian inference with nuisance parameters,” *EPJ Nuclear Sci. Technol.*, vol. 4, p. 36, 2018.
- [62] M. Larson, “Updated user’s guide for SAMMY : Multilevel R-Matrix fits to neutron data using Bayes’ equations,” ORNL, Tech. Rep. ORNL/TM-9179/R8ENDF-364/R2, 2008.
- [63] N. M. Larson, “Updated user’s guide for SAMMY : Multilevel R-Matrix fits to neutron data using Bayes’ equations,” ORNL, Tech. Rep. ORNL/TM-9179/R1, 1984.
- [64] R. E. MacFarlane, “The NJOY nuclear data processing system, version 2016,” LANL, Tech. Rep. LA-UR-17-20093, 2016.
- [65] J. Raynal, “Notes on ECIS94,” CEA Saclay, Tech. Rep. CEA-N-2772, 1994.
- [66] M. Ohkubo, “Neutron total cross section measurement on oxygen, aluminum and carbon below 930 keV,” JAERI, Tech. Rep. JAERI-M-86-193, 1987.
- [67] M. Ohkubo et al., “Neutron resonance parameters of Rubidium-85 and Rubidium-87,” *J. Nucl. Sci. Technol.*, vol. 21, p. 254, 1984.
- [68] F. G. Perey, T. A. Love and W. E. Kinney, “A test of neutron total cross-section evaluations from 0.2 to 20 MeV for C, O, Al, Si, Ca, Fe, and SiO₂,” ORNL, Tech. Rep. ORNL-4823, 1972.

- [69] S. Cierjacks et al., “High precision time-of-flight measurements of neutron resonance energies in carbon and oxygen between 3 and 30 MeV,” *Nucl. Instr. Meth.*, vol. 169, p. 185, 1980.
- [70] D. C. Larson, J. A. Harvey and N. W. Hill, “Neutron total cross section of hydrogen, carbon, oxygen, and iron from 500 keV to 60 MeV,” in *Proc. Int. Conf. On Nuclear Cross Sections for Technology*, Knoxville, USA, 1980, p. 34.
- [71] J. L. Fowler et al., “Level structure of ^{17}O from neutron total cross sections,” *Phys. Rev. C*, vol. 8, p. 545, 1973.
- [72] Y. Danon et al., “Measurement of total cross section of water and O-16 in the MeV energy range,” in *AccApp’15*, Washington, DC, USA, 2015, p. 345.
- [73] G. Giorginis et al., “The cross section of the $^{16}\text{O}(n, \alpha)^{13}\text{C}$ reaction in the MeV energy range,” in *International Conference on Nuclear Data for Science and Technology 2007*, 2008, p. 525.
- [74] D. Lister and A. Sayres, “Elastic scattering of neutrons from carbon and oxygen in the energy range 3.0 to 4.7 mev,” *Phys. Rev.*, vol. 143, p. 745, 1966.
- [75] A. Okazaki, “Scattering of polarized neutrons by heavy nuclei,” *Phys. Rev.*, vol. 99, p. 55, 1955.
- [76] J. P. Martin and M. S. Zucker, “Differential cross section and polarization angular distributions for $^{16}\text{O}(n, n)^{16}\text{O}$,” *Bull. Am. Phys. Soc.*, vol. 7, p. 72, 1962.
- [77] J. L. Fowler and H. O. Cohn, “Oxygen differential neutron scattering and phenomenological nuclear potentials,” *Phys. Rev.*, vol. 109, p. 89, 1958.
- [78] L. Drigo, G. Tornielli and G. Zannoni, “Polarization in the $^{16}\text{O}(n, n)$ reaction,” *Nuovo Cimento A*, vol. 31, p. 1, 1976.
- [79] C. H. Johnson and J. L. Fowler, “Scattering of neutrons from ^{16}O in the 2.2- to 4.2-MeV energy range,” *Phys. Rev.*, vol. 162, p. 890, 1967.
- [80] J. L. Fowler and C. H. Johnson, “Differential scattering of neutrons at narrow levels in ^{17}O ,” *Phys. Rev. C*, vol. 2, p. 124, 1970.
- [81] W. E. Kinney and F. G. Perey, “Neutron elastic- and inelastic- scattering cross sections for oxygen in the energy range 4.34 to 8.56 MeV,” ORNL, Tech. Rep. ORNL-4780, 1972.
- [82] L. Leal et al. , “R-matrix resonance analysis and statistical properties of the resonance parameters of ^{233}U in the neutron energy range from thermal to 600 ev,” ORNL report, Tech. Rep. ORNL/TM-2000/372, 2001.

- [83] S. F. Mughabghab, *Atlas of neutron resonances*, Netherlands, 2006.
- [84] R. B. Firestone and Zs. Revay, “Thermal neutron capture cross sections for $^{16,17,18}\text{O}$ and ^2H ,” *Phys. Rev. C*, vol. 93, p. 044311, 2016.
- [85] J. K. Bair and F. X. Haas, “Total Neutron Yield from the Reactions $^{13}\text{C}(\alpha, n)^{16}\text{O}$ and $^{11,18}\text{O}(\alpha, n)^{20,21}\text{Ne}$,” *Phys. Rev.*, vol. 7, p. 1356, 1973.
- [86] S. Harissopulos et al., “Cross section of the $^{13}\text{C}(\alpha, n)^{16}\text{O}$ reaction : A background for the measurement of geo-neutrinos,” *Phys. Rev. C*, vol. 72, p. 062801(R), 2005.
- [87] A. C. L. Barnard, C. M. Jones, and G. C. Phillips, “The scattering of ^3He by ^4He ,” *Nucl. Phys.*, vol. 50, p. 629, 1964.
- [88] T. A. Tombrello and P. D. Parker, “Scattering of ^3He from ^4He ,” *Phys. Rev.*, vol. 130, p. 1112, 1963.
- [89] R. J. Spiger and T. A. Tombrello, “Scattering of ^3He by ^4He and of ^4He by tritium,” *Phys. Rev.*, vol. 163, p. 964, 1967.
- [90] J. A. McCray, “Elastic scattering of protons from ^6Li nuclei,” *Phys. Rev.*, vol. 130, p. 2034, 1963.
- [91] A. J. Elwyn et al., “Cross sections for the $^6\text{Li}(p, ^3\text{He})^4\text{He}$ reaction at energies between 0. 1 and 3. 0 MeV,” *Phys. Rev.*, vol. 20, p. 1984, 1979.
- [92] J. Hori et al., “Measurement of capture gamma rays from the broad 53-keV and the narrow 35-keV neutron resonances of ^{23}Na ,” *J. Nucl. Sci. Technol.*, vol. 38, p. 91, 2001.
- [93] R. E. Chrien and M. Reich, “The Brookhaven High Flux Beam Reactor fast chopper facility,” *Nucl. Instr. Meth.*, vol. 53, p. 93, 1967.
- [94] D. L. Price et al., “Neutron capture in ^{238}U ,” *Nucl. Phys. A*, vol. 121, p. 630, 1968.
- [95] <http://www.oecd-nea.org/dbdata/jeff-beta/JEFF33T3/neutrons/files/8-O-16g.jeff33t3>.
- [96] O. Bouland, “Experimental Data Parameterisation in the Resolved Resonance Energy Range : R - Matrix theory and Approximations,” *BgNS TRANSACTIONS*, vol. 10, p. 224, 2005.
- [97] N. Michel, “Precise Coulomb wave functions for a wide range of complex ℓ , η and z ,” *Comp. Phys. Comm.*, vol. 176, p. 232, 2007.
- [98] G. Noguère, CEA/DER/SPRC/LEPH, Tech. Rep. 02/224, 2003.

- [99] C. Coceva, R. Simonini, and D. K. Olsen, “Calculation of the ORELA Neutron Moderator Spectrum and Resolution Function,” *Nucl. Inst. Meth.*, vol. 211, p. 459, 1983.
- [100] M. C. Moxon, “REFIT2 : A Least Squares Fitting Program for Resonance Analysis of Neutron Transmission and Capture Data,” NEA, Tech. Rep. NEA-0914/02, 1989.
- [101] J. E. Lynn, “Average Neutron Transmission in the keV Region,” *Proc. Phys. Soc.*, vol. 82, p. 903, 1963.
- [102] H. Derrien, “R-Matrix Analysis of Neutron Effective Total Cross Section, Fission Cross Section and in the Energy Capture Cross Section of ^{233}U Range from Thermal to 150 eV,” *J. Nucl. Sci. Technol.*, vol. 31, p. 379, 1994.
- [103] M. A. Preston, *Physics of the nucleus*. Addison-Wesley, 1962.
- [104] G. Noguère, “Contributions to the study of the unresolved resonance range of neutron-induced reactions,” HDR, Université de Bordeaux, 2014.
- [105] J. P. Delaroche, Ch. Lagrange and J. Salvy, “The optical model with particular consideration of the coupled-channel optical model,” in *Proc. of a Consultants Meeting on the Use of Nucl. Theory in Neutron Nucl. Data Eval.*, Trieste, Italy, 1975, p. 251.

Annexe A

Complément au calcul des coefficients des polynômes de Legendre dans le formalisme de Blatt et Biedenharn

Nous rappelons que le coefficient du polynôme de Legendre est calculé dans le formalisme de Blatt et Biedenharn [35] suivant la relation (IV.3.14). Cette relation contient le coefficient $G_{\{\ell_1 s_1 \ell'_1 s'_1 J_1\} \{\ell_2 s_2 \ell'_2 s'_2 J_2\}}$ qui est calculé ainsi

$$G_{\{\ell_1 s_1 \ell'_1 s'_1 J_1\} \{\ell_2 s_2 \ell'_2 s'_2 J_2\}} = A_{\ell_1 s_1 \ell'_1 s'_1; J_1} A_{\ell_2 s_2 \ell'_2 s'_2; J_2} D_{\ell_1 s_1 \ell'_1 s'_1 \ell_2 s_2 \ell'_2 s'_2; L J_1 J_2} \quad (A.1)$$

Les termes $A_{\ell_1 s_1 \ell'_1 s'_1; J_1}$, $A_{\ell_2 s_2 \ell'_2 s'_2; J_2}$ et $D_{\ell_1 s_1 \ell'_1 s'_1 \ell_2 s_2 \ell'_2 s'_2; L J_1 J_2}$ sont calculés [62] suivant les équations

$$A_{\ell_1 s_1 \ell'_1 s'_1} = \sqrt{(2\ell_1 + 1)(2\ell'_1 + 1)(2J_1 + 1)} \Delta(\ell_1 J_1 s_1) \Delta(\ell'_1 J_1 s'_1) \quad (A.2)$$

$$A_{\ell_2 s_2 \ell'_2 s'_2} = \sqrt{(2\ell_2 + 1)(2\ell'_2 + 1)(2J_2 + 1)} \Delta(\ell_2 J_2 s_2) \Delta(\ell'_2 J_2 s'_2) \quad (A.3)$$

$$\begin{aligned} D_{\ell_1 s_1 \ell'_1 s'_1 \ell_2 s_2 \ell'_2 s'_2; L J_1 J_2} &= (2L + 1) \Delta^2(J_1 J_2 L) \Delta^2(\ell_1 \ell_2 L) \Delta^2(\ell'_1 \ell'_2 L) \\ &\times W(\ell_1 J_1 \ell_2 J_2, s_1 L) W(\ell'_1 J_1 \ell'_2 J_2, s'_1 L) \delta_{s_1 s_2} \delta_{s'_1 s'_2} (-1)^{s_1 - s_2} \\ &\times \frac{n! (-1)^n}{(n - \ell_1)! (n - \ell_2)! (n - L)!} \\ &\times \frac{n'! (-1)^{n'}}{(n' - \ell'_1)! (n' - \ell'_2)! (n' - L)!} \end{aligned} \quad (A.4)$$

Les valeurs de n et n' sont obtenues suivant les relations

$$2n = \ell_1 + \ell_2 + L \quad (A.5)$$

$$2n' = \ell'_1 + \ell'_2 + L \quad (A.6)$$

n et n' ne prennent ici que des valeurs paires. Pour les valeurs impaires, on a $D_{\ell_1 s_1 \ell'_1 s'_1 \ell_2 s_2 \ell'_2 s'_2; L J_1 J_2} = 0$.

Les coefficients Δ^2 sont obtenus de la manière suivante

$$\Delta^2(abc) = \frac{(a+b-c)!(a-b+c)!(-a+b+c)!}{(a+b+c+1)!} \quad (\text{A.7})$$

où a, b, c sont choisis de telle manière que :

$$\vec{a} + \vec{b} = \vec{c} \quad (\text{A.8})$$

Les coefficients W sont obtenus suivant la relation

$$\begin{aligned} W(\text{defg}, \text{hi}) &= \sum_{k=k_{\min}}^{k_{\max}} \frac{(-1)^{d+e+f+g}(k+1)!}{(k-(d+e+h))!(k-(f+g+h))!} \\ &\times \frac{1}{(k-(d+f+i))!(k-(d+g+h))!} \\ &\times \frac{1}{(d+e+f+g+i-k)!(d+g+h+i-k)!} \\ &\times \frac{1}{(f+e+h+i-k)!} \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

avec

$$k_{\min} = \max\{(d+e+h), (f+g+h), (d+f+i), (e+g+i)\} \quad (\text{A.10})$$

$$k_{\max} = \min\{(d+e+f+g), (d+g+h+i), (f+e+h+i)\} \quad (\text{A.11})$$

$W(\ell_1 J_1 \ell_2 J_2, s_1 L)$ et $W(\ell'_1 J_1 \ell'_2 J_2, s'_1 L)$ sont ainsi obtenus en remplaçant dans les relations (A.9), (A.10) et (A.11) d, e, f, g, h, i respectivement par $\ell_1, J_1, \ell_2, J_2, s_1, L$ et par $\ell'_1, J_1, \ell'_2, J_2, s'_1, L$. Le degré du polynôme de Legendre L satisfait aux conditions [35]

$$\begin{aligned} L &\leq 2J_{\max} \\ L &\leq 2\ell_{\max} \\ L &\leq 2\ell'_{\max} \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

Annexe B

Expression de la quantité de mouvement de la particule émise lors d'une collision entre deux particules

Ce texte est écrite à partir des explications données dans la référence [62], pages 65-66). Nous considérons la collision entre un projectile de masse m et une cible de masse M .

1. Dans le référentiel du laboratoire

- La quantité de mouvement du projectile est $\vec{p}$;
- La quantité de mouvement de la cible est $\vec{q}=0$;
- La vitesse du CM est $\vec{V}$.

2. Dans le référentiel du CM

- La quantité de mouvement du projectile est $\vec{K} = \hbar \vec{k}$;
- La quantité de mouvement de la cible est $-\vec{K}$.

3. Le bilan d'énergie dans le référentiel du laboratoire et dans le référentiel du CM :

$$E_{\text{Lab}} = E_{\text{dans le CM}} + E_{\text{CM}} \quad (\text{B.1})$$

Avec

$$E_{\text{Lab}} = E_{\text{Lab}}^{\text{proj}} + \underbrace{E_{\text{Lab}}^{\text{cible}}}_{=0} = \frac{p^2}{2m^2} \quad (\text{B.2})$$

$$E_{\text{dans le CM}} = E_{\text{dans le CM}}^{\text{proj}} + E_{\text{dans le CM}}^{\text{cible}} = \frac{K^2}{2m^2} + \frac{K^2}{2M^2} \quad (\text{B.3})$$

$$E_{\text{CM}} = \frac{(m + M) V^2}{2} \quad (\text{B.4})$$

(B.2), (B.3), (B.4) dans (B.1) donne

$$\frac{p^2}{2m^2} = \frac{K^2}{2m^2} + \frac{K^2}{2M^2} + \frac{(m+M)V^2}{2} \quad (B.5)$$

La relation (B.5) n'est pas changée si on ajoute à gauche comme à droite un même terme :

$$\frac{p^2}{2m^2} + m + M = \frac{K^2}{2m^2} + \frac{K^2}{2M^2} + \frac{(m+M)V^2}{2} + m + M \quad (B.6)$$

En vertu de la conservation de l'énergie totale avant et après la collision (quantités avec le signe "prime"), on écrit

$$\frac{K^2}{2m^2} + \frac{K^2}{2M^2} + \frac{(m+M)V^2}{2} + m + M = \frac{K'^2}{2m'^2} + \frac{K'^2}{2M'^2} + \frac{(m'+M')V'^2}{2} + m' + M' \quad (B.7)$$

Une légère manipulation algébrique nous permet d'obtenir

$$K'^2 = \frac{2m'M'}{m' + M'} \left[K^2 \left(\frac{m+M}{2mM} \right) + \underbrace{m + M - m' - M'}_Q \right] \quad (B.8)$$

En faisant le bilan des vitesses, on a :

1. Pour le projectile

$$\vec{V}_{Lab}^{proj} = \vec{V}_{CM}^{proj} + \vec{V}_{CM} \iff \frac{\vec{p}}{m} = \frac{\vec{K}}{m} + \vec{V} \quad (B.9)$$

2. Pour la cible

$$\vec{V}_{Lab}^{cible} = \vec{V}_{CM}^{cible} + \vec{V}_{CM} \iff 0 = -\frac{\vec{K}}{M} + \vec{V} \iff \vec{V} = \frac{\vec{K}}{M} \quad (B.10)$$

En mettant la relation (B.10) dans (B.9), on obtient

$$\vec{K} = \left(\frac{M}{m+M} \right) \vec{p} \quad (B.11)$$

En tenant compte de B.11 et B.8 devient

$$K'^2 = \frac{2m'M'}{m' + M'} \left[\left(\frac{M}{m+M} p \right)^2 \left(\frac{m+M}{2mM} \right) + Q \right] \quad (B.12)$$

La relation (B.2) nous donne $p = \sqrt{2mE_{Lab}}$. Après simplification, on a

$$K'^2 = \frac{2m'M'}{m' + M'} \left[\frac{M}{m+M} E_{Lab} + Q \right] \quad (B.13)$$

Annexe C

Transformations entre le système du laboratoire et le système du CM pour la section efficace différentielle en angle

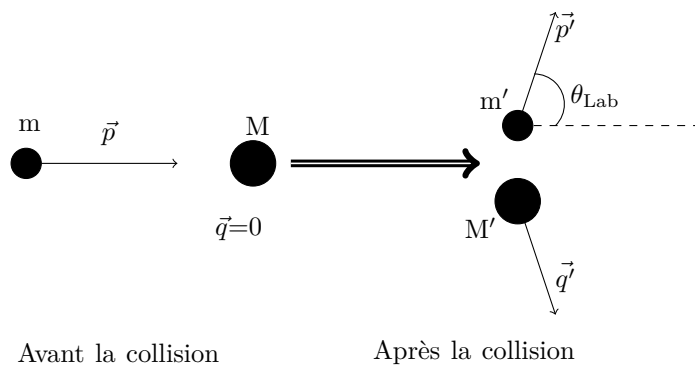


FIGURE C.1 – Collision de deux particules dans le référentiel du laboratoire.

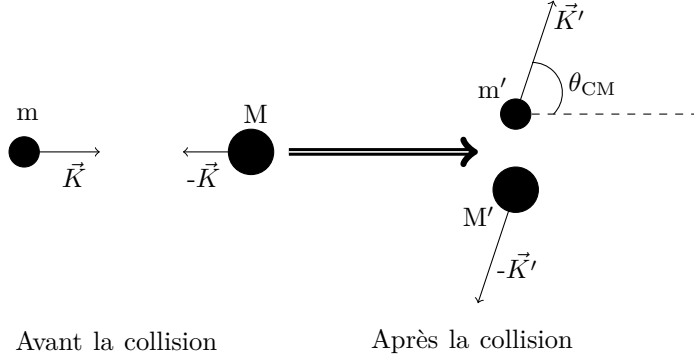


FIGURE C.2 – Collision de deux particules dans le référentiel du CM.

Reprenons le problème de la collision entre deux particules de masses m et M traité dans l'annexe B et illustré par les Fig. C.1 et Fig. C.2. Après la collision, on peut établir un bilan des vitesses pour l'éjectile suivant les composantes :

1.

$$\frac{p' \cos \theta_{\text{Lab}}}{m'} = \frac{K' \cos \theta_{\text{CM}}}{m'} + \frac{p}{m + M} \quad (\text{C.1})$$

2.

$$\frac{p' \sin \theta_{\text{Lab}}}{m'} = \frac{K' \sin \theta_{\text{CM}}}{m'} + 0 \Leftrightarrow \frac{p' \sqrt{1 - \cos^2 \theta_{\text{Lab}}}}{m'} = \frac{K' \sqrt{1 - \cos^2 \theta_{\text{CM}}}}{m'} \quad (\text{C.2})$$

Adoptons les notations de la référence [62] suivantes : $\mu = \cos \theta_{\text{Lab}}$ et $\nu = \cos \theta_{\text{CM}}$. Ces notations sont utilisées par souci de simplification. Les relations (C.1) et (C.2) deviennent

1.

$$\frac{p' \mu}{m'} = \frac{K' \nu}{m'} + \frac{p}{m + M} \quad (\text{C.3})$$

2.

$$\frac{p' \sqrt{1 - \mu^2}}{m'} = \frac{K' \sqrt{1 - \nu^2}}{m'} \quad (\text{C.4})$$

Posons également

$$\xi = \left(\frac{m'}{m + M} \right) \frac{p}{K'} \quad (\text{C.5})$$

En exploitant la relation B.13 et le fait que $p = \sqrt{2mE_{\text{Lab}}}$, on obtient

$$\xi^2 = \left(\frac{m'}{m + M} \right)^2 \frac{p^2}{K'^2} = \frac{\left(\frac{m'}{m + M} \right)^2 2mE_{\text{Lab}}}{\frac{2m'M'}{m' + M'} \left[E_{\text{Lab}} \frac{M}{m + M} + Q \right]} \quad (\text{C.6})$$

En posant $\epsilon_{\text{Lab}} = -\frac{M+m}{M}Q$ et après simplifications, la relation (C.6) devient

$$\xi^2 = \frac{m'm(m'+m)E_{\text{Lab}}}{M'M(m+M)(E_{\text{Lab}} - \epsilon_{\text{Lab}})} \quad (\text{C.7})$$

De la relation (C.3), on peut écrire

$$p'\mu = K'\nu + \frac{m'p}{m+M} \quad (\text{C.8})$$

En tenant compte de (C.5), la relation C.8 peut être écrite

$$p'\mu = K'\nu + K'\xi \quad (\text{C.9})$$

En faisant la somme des carrées des équations (C.3) et (C.4), on obtient

$$\frac{p'^2}{m'^2} = \frac{K'^2}{m'^2} + 2\frac{K'p\nu}{m'(m+M)} + \frac{p^2}{(m+M)^2} \quad (\text{C.10})$$

De la relation C.8, on peut écrire

$$K'\nu = p'\mu - \frac{m'p}{m+M} \quad (\text{C.11})$$

En insérant (C.11) dans (C.10) et après un réarrangement, on obtient

$$p'^2 - K'^2 - \frac{2m'p\mu}{m+M}p' + \frac{m'^2p^2}{(m+M)^2} = 0 \quad (\text{C.12})$$

Une solution de l'équation (C.12) est

$$\begin{aligned} p' &= \frac{m'p\mu}{m+M} + \sqrt{\frac{m'^2p^2\mu^2}{(m+M)^2} - \frac{m'^2p^2}{(m+M)^2} + K'^2} \\ &= \frac{m'}{m+M} \left\{ p\mu + \sqrt{p^2(\mu^2 - 1) + \left(\frac{m+M}{m'}\right)^2 K'^2} \right\} \end{aligned} \quad (\text{C.13})$$

En utilisant la relation (C.5) dans (C.13), nous avons

$$\begin{aligned} p' &= \frac{m'}{m+M} \left\{ p\mu + \sqrt{p^2(\mu^2 - 1) + p^2\xi^{-2}} \right\} \\ &= \underbrace{\frac{m'}{m+M} \frac{p}{\xi}}_{K'} \left\{ \mu\xi + \sqrt{(\mu^2 - 1)\xi^2 + 1} \right\} \\ &= K' \left\{ \mu\xi + \sqrt{1 - \xi^2(1 - \mu^2)} \right\} \end{aligned} \quad (\text{C.14})$$

En insérant (C.14) dans la relation (C.9), on peut écrire

$$K' \left\{ \mu\xi + \sqrt{1 - \xi^2 (1 - \mu^2)} \right\} \mu = K' \nu + K' \xi \quad (\text{C.15})$$

Après simplification et réarrangement, on obtient

$$\nu = -\xi (1 - \mu^2) + \sqrt{1 - \xi^2 (1 - \mu^2)} \mu \quad (\text{C.16})$$

ou

$$\boxed{\cos\theta_{\text{CM}} = -\xi (1 - \cos^2\theta_{\text{Lab}}) + \sqrt{1 - \xi^2 (1 - \cos^2\theta_{\text{Lab}})} \cos\theta_{\text{Lab}}} \quad (\text{C.17})$$

L'équation (C.17) permet de convertir dans le référentiel du CM un angle fourni dans le référentiel du laboratoire. La dérivée de cette expression par rapport à $\cos\theta_{\text{Lab}}$ donne

$$\begin{aligned} \frac{d\cos\theta_{\text{CM}}}{d\cos\theta_{\text{Lab}}} &= \frac{d}{d\cos\theta_{\text{Lab}}} \left[-\xi (1 - \cos^2\theta_{\text{Lab}}) + \sqrt{1 - \xi^2 (1 - \cos^2\theta_{\text{Lab}})} \cos\theta_{\text{Lab}} \right] \\ &= \frac{\left(\mu\xi + \sqrt{1 - \xi^2 (1 - \cos^2\theta_{\text{Lab}})} \right)^2}{\sqrt{1 - \xi^2 (1 - \cos^2\theta_{\text{Lab}})}} \end{aligned} \quad (\text{C.18})$$

$\frac{d\cos\theta_{\text{CM}}}{d\cos\theta_{\text{Lab}}}$ est le Jacobien J de la transformation du référentiel du CM au référentiel du laboratoire. La section efficace dans le référentiel du laboratoire s'obtient ainsi (Eq. D.72 dans la référence [28], page 336)

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_{\text{Lab}}} = \frac{d\cos\theta_{\text{CM}}}{d\cos\theta_{\text{Lab}}} \frac{d\sigma}{d\Omega_{\text{CM}}} \quad (\text{C.19})$$

Pour une réaction d'un couple de particules α en voie d'entrée à un couple de particules α' en voie de sortie, l'équation C.19 est équivalente à

$$\boxed{\frac{d\sigma_{\alpha\alpha'}(E)}{d\Omega_{\text{Lab}}} = \frac{\left(\mu\xi + \sqrt{1 - \xi^2 (1 - \cos^2\theta_{\text{Lab}})} \right)^2}{\sqrt{1 - \xi^2 (1 - \cos^2\theta_{\text{Lab}})}} \frac{d\sigma_{\alpha\alpha'}(E)}{d\Omega_{\text{CM}}}} \quad (\text{C.20})$$

La relation (C.20) constitue l'expression de la section efficace différentielle par rapport à l'angle d'émission dans le référentiel du laboratoire.

Annexe D

Choix du fichier a priori pour l'ajustement de paramètres des résonances dans le référentiel unifié et résultats préliminaires obtenus

Avec les suggestions apportées par cette thèse (référentiel unifié du CM, choix des rayons de voies issus du modèle optique, etc.) pour l'amélioration de données nucléaires, un réajustement de paramètres des résonances pour reproduire les données expérimentales dans un cadre théorique le plus approprié possible devient une nécessité. Pour le cas du système composé $^{17}\text{O}^*$, le fichier de paramètres de résonances a priori proposé a été choisi ainsi :

1. Fichier de paramètres de départ : JEFF-33T3 (voir sa description au paragraphe III.4.1).
2. Nouveau fichier constitué :
 - a) Les 3 résonances externes du fichier JEFF-33T3 dont la contribution est estimée dans les rayons issus du modèle optique (voir paragraphe (V.4.1.3)) ont été enlevés ;
 - b) Les largeurs des résonances $\Gamma_{\lambda}^{\text{Lab}}$ (elles sont tabulées dans le référentiel du laboratoire neutronique dans le fichier JEFF-33T3) ont été ensuite converties en amplitudes réduites de la manière suivante (voir formule (II.2.10)) :

$$\gamma_{\lambda}^{\text{Lab}} = \sqrt{\frac{\Gamma_{\lambda}^{\text{Lab}}(E_{\lambda})}{2P(E_{\lambda})}} \quad (\text{D.1})$$

Où E_λ est l'énergie de la résonance dans le référentiel du laboratoire neutronique. Les facteurs de pénétrabilité $P(E_\lambda)$ ont été calculés en utilisant les rayons issus du modèle optique pour la voie neutron. Le facteur de pénétrabilité pour une voie de désexcitation radiative (nécessaire pour convertir la largeur totale de capture radiative $\Gamma_{\gamma,\text{tot}}^{\text{Lab}}$ en amplitude réduite) est par convention égale à 1 ;

- c) Les paramètres des résonances ont ensuite été convertis dans le référentiel unifié du CM à partir du référentiel du laboratoire neutronique suivant les relations :

$$E_\lambda^{\text{CM}} = E_\lambda^{\text{Lab}} \sqrt{\frac{M}{M+m}} + S_n \quad (\text{D.2})$$

$$\gamma_\lambda^{\text{CM}} = \gamma_\lambda^{\text{Lab}} \sqrt{\frac{M}{M+m}} \quad (\text{D.3})$$

Où m est la masse du neutron, M la masse de l' ^{16}O et S_n l'énergie de séparation du neutron exprimée dans le référentiel du CM ;

- d) Choix effectué pour les états liés :

Dans le but d'assurer la cohérence avec la base dédiée pour l'Astrophysique [16], les paramètres des résonances pour les états liés sont issus de cette base et fixés (sauf pour la première résonance négative où une amplitude réduite neutronique issue du fichier JEFF-33T3 a été attribuée pour mieux reproduire les données expérimentales à l'énergie thermique). Les temps de demi-vie tabulés dans la référence [16] ont été converties en largeur totale qui a été ensuite attribuée à largeur partielle totale de désexcitation radiative $\Gamma_{\gamma,\text{tot}}$. En effet, la largeur neutronique pour ces trois niveaux est inexistante dans la référence [16]. La conversion est effectuée suivant la relation

$$\Gamma_\lambda = \Gamma_{\gamma,\text{tot}} = \frac{\hbar}{2\tau_{\frac{1}{2}}} \quad (\text{D.4})$$

La largeur $\Gamma_{\gamma,\text{tot}}$ obtenue a été ensuite transformée en amplitude réduite suivant la procédure expliquée au point b). La conversion dans le référentiel du CM n'est pas nécessaire puisque les données issues de la référence [16] sont tabulées dans ce dernier. Le Tableau D.1 résume les choix effectués aux états liés

$E_\lambda^{\text{CM}}(\text{MeV})$	J^π	$\gamma_{\gamma,\text{tot}}^{\text{CM}} (\sqrt{eV})$	$\gamma_{n_\lambda}^{\text{CM}} (\sqrt{eV})$
0,872678	$\frac{1}{2}^+$	7,97e-04	6,05235e+02 (à ajuster)
3,05524	$\frac{1}{2}^-$	3,70e-02	0 (fixé)
3,84345	$\frac{5}{2}^-$	8,11e-02	0 (fixé)

TABLE D.1 – Paramètres a priori choisis pour les états liés du système composé $^{17}\text{O}^*$.

Les résultats préliminaires issus de l'ajustement sont présentés sur les Fig. D.1 et D.2 ainsi que dans le Tableau D.2.

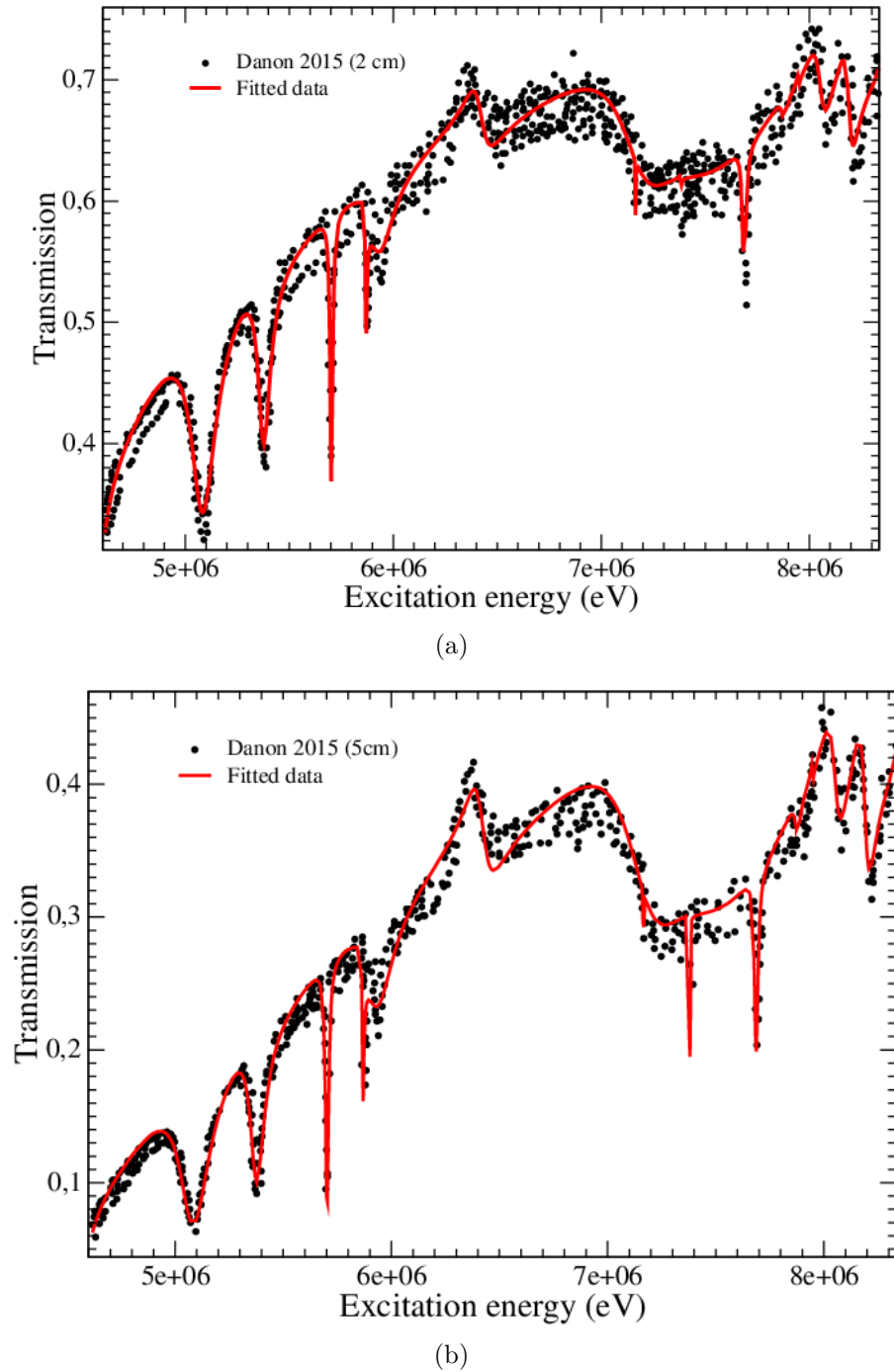
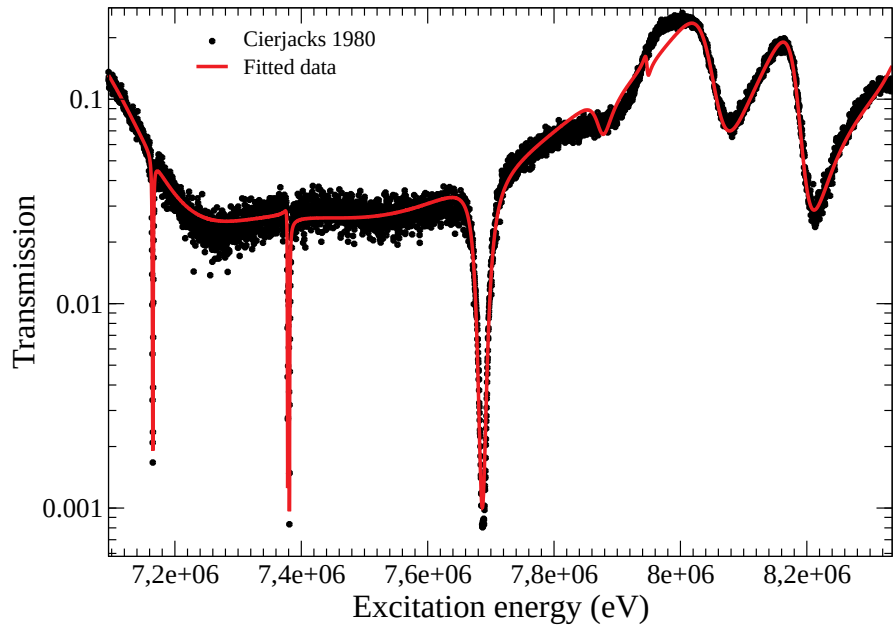
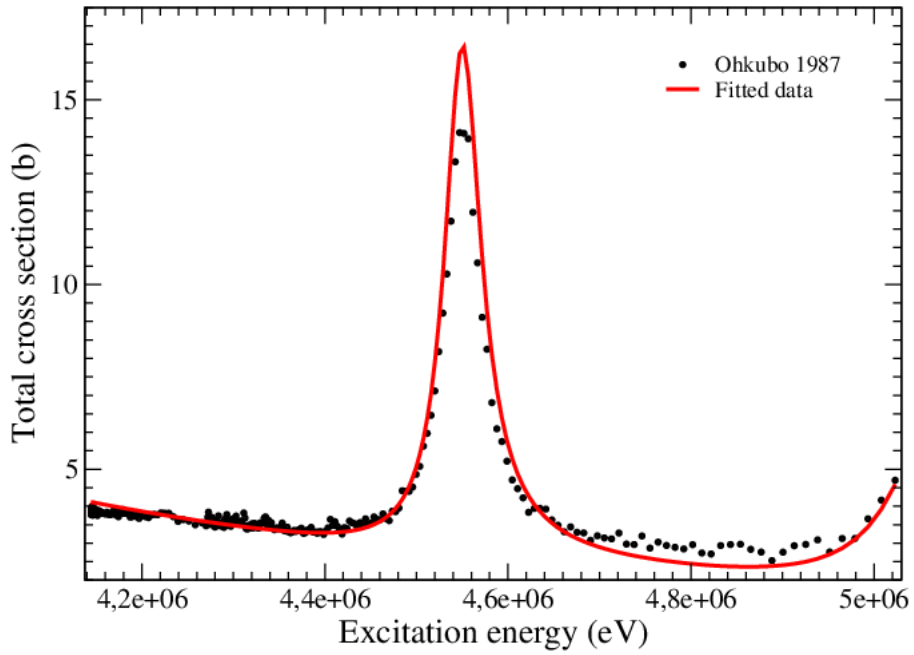


FIGURE D.1 – Résultats préliminaire de l'ajustement des paramètres des résonances sur les données de transmission de Y. Danon [72] ; en a) épaisseur de l'échantillon égale à 2 cm, en b) épaisseur de l'échantillon égale à 5 cm.



(a)



(b)

FIGURE D.2 – Résultats préliminaire de l'ajustement des paramètres des résonances sur les données de a) Cierjacks 1980 [69] (section efficace totale convertie en transmission pour un meilleur ajustement) et b) Ohkubo 1987 [66] (section efficace totale).

Type	Nouvelles données (ajustement)	TORA-JEFF-33T3
$^{16}\text{O}(\text{n, tot})$	3,76539 b	3,7653 b
$^{16}\text{O}(\text{n, n})$	3,76535 b	3,7651 b
$^{16}\text{O}(\text{n, } \gamma)$	4,2769e-06 b	1,6695e-04 b

TABLE D.2 – Sections efficaces obtenues à l'énergie thermique ($E = 0,0253$ eV) avec les paramètres des résonances issus des résultats préliminaires de l'ajustement.

Résumé court

La précision atteinte dans l'évaluation des sections efficaces neutroniques telle qu'elle est pratiquée depuis une quarantaine d'années atteint aujourd'hui ses limites, qui ne pourront être repoussées qu'en reconsidérant l'approche traditionnellement adoptée afin de permettre un saut qualitatif majeur. Ce travail de thèse démontre qu'une telle approche est possible en remplaçant le référentiel restreint constitué classiquement du neutron incident et du noyau cible par celui, plus général, du système composé qui peut être formé par de multiples voies. Un tel changement de paradigme qui implique la modélisation simultanée de toutes les réactions menant à un même système composé, ouvre la perspective de comparaison immédiate entre les paramètres nucléaires intéressant la physique neutronique avec ceux de l'astrophysique ou de l'étude de la structure de la matière. Il permet de rapprocher des activités d'évaluation menées habituellement séparément et bénéficie du partage des bases expérimentales et des bases théoriques de paramètres nucléaires fondamentaux. Au cours de cette thèse, un module dénommé TORA (TOol for Reactions Analysis) associé au code CONRAD du CEA/LEPh a été implémenté pour répondre au défi de ce changement de philosophie dans l'évaluation des sections efficaces neutroniques. Après une validation numérique rigoureuse du module, ce travail de thèse termine par des études connexes dans le nouveau référentiel de travail (COM du système composé excité).

Mots clés : Evaluation, données nucléaires, section efficace, système composé, matrice R.

Short summary

The traditional methodology of nuclear data evaluation, which has been in use for the past four decades, is showing its limitations in reducing significantly the uncertainties in neutron cross sections below their current level. This suggests that a new approach should be considered. This PhD work aims at demonstrating that a major qualitative improvement is possible by changing the reference frame historically used for evaluating nuclear data model. The central idea was to move from restrictive frame of the incident neutron and target nucleus to the more general frame of the excited compound system. Such a change, which implies the simultaneous modelling of all the reactions leading to the same compound system, opens up the possibility of direct comparison between nuclear model parameters, whether those are derived for reactor physics applications for reactor physics applications, astrophysics or basic nuclear spectroscopy studies. This have the double advantage of bringing together evaluation activities performed separately, and of pooling experimental databases and basic theoretical nuclear parameter files. During this PhD thesis, a new module, so called TORA (TOol for Reactions Analysis), was implemented within the CONRAD system of the CEA/LEPh, to allow the change of paradigm foreseen for next generation of evaluated neutron cross sections. After rigorous numerical validation of the TORA module, this work ends by associated studies within this new frame.

Keywords : Evaluation, nuclear data, cross section, compound system, R-Matrix.

Glossaire

AGB Asymptotic Giant Branch. L'appellation désigne une région occupée par des étoiles de masses faibles et intermédiaires (inférieures ou égales à dix fois la masse du soleil).

AIEA Agence Internationale de l'Energie Atomique. C'est une agence créée en 1957 au sein des Nations Unies dans le but « de hâter et d'accroître la contribution de l'énergie atomique à la paix, la santé et la prospérité dans le monde entier ».

AMUR Code multi-voies dédié à l'évaluation des sections efficaces pour les noyaux légers. Il est basé sur le formalisme de Wigner and Eisenbud de la théorie de la matrice R.

AZURE Code dédié à la modélisation des réactions nucléaires à basse énergie. Il est construit pour des applications d'Astrophysique dans le cadre de la théorie de la matrice R.

BRR Budapest Research Reactor. Réacteur de recherche situé en Hongrie. Il a été mis en service en 1959 et est utilisé comme source de neutrons.

BWR Boiling Water Reactor. C'est un réacteur utilisant l'eau bouillante comme caloporteur. Dans ce type de réacteur, l'eau légère du circuit principal joue à la fois le rôle de modérateur et de caloporteur. Elle est donc portée à haute température dans le cœur du réacteur (285°C). Le parc des réacteurs à eau bouillante est le deuxième plus grand au monde après celui des réacteurs à eau sous pression.

CEA Commissariat à l'Energie Atomique et aux Energies Alternatives.

CIELO Collaborative International Evaluation Library Organisation. Un projet mis en place en 2013 par la NEA (Nuclear Energy Agency) dont le but était d'amélioration des sections efficaces des réactions nucléaires des noyaux qui ont un impact significatif sur les technologies nucléaires actuelles : hydrogène, oxygène, fer, uranium et plutonium. Ce projet a été clôturé en fin 2017.

CM Centre de Masse.

COMAC COvariance MAtrices of Cadarache. Nom choisi pour la bibliothèque de stockage des données nucléaires du centre du CEA de Cadarache contenant les erreurs et corrélations d'erreurs.

CONRAD COde for Nuclear Reaction Analysis and Data Assimilation. Code d'analyse des réactions nucléaire développé depuis 2005 au Laboratoire d'Etudes de Physique du CEA à Cadarache.

DTL Dynamitron-Tandem-Laboratorium. Un dynamitron est un accélérateur de particules par application d'une tension constante. L'accélérateur de type tandem change ensuite les ions négatifs en ions positifs en vue d'une seconde accélération. Le Dynamitron-Tandem-Laboratorium désigné ici est l'installation de la Ruhr-Universität Bochum (Allemagne).

ECIS Equations Couplées en Itérations Séquentielles. C'est un code basé sur la résolution en itérations séquentielles des équations différentielles. Il a été développé par Jacques Raynal et sa naissance date de 1968. Le code TALYS fait appel au code ECIS pour des calculs modèle optique et voies couplées.

EDA Energy Dependent Analysis. Code d'analyse de réactions nucléaires sous la formulation générale de la théorie de la matrice R (incluant l'opérateur de Bloch) et du formalisme de Wolfenstein. Il est développé au laboratoire de Los Alamos (Etats-Unis).

ENDF Evaluated Nuclear Data File. C'est un système de stockage et de récupération des données nucléaires évaluées utilisées pour des applications dans la technologie nucléaire. Ce système comprend à la fois les procédures de stockage et les formats utilisés par les bibliothèques de données évaluées. Le format actuel est ENDF-6. Le contrôle des formats ENDF est détenu par le CSEWG (Cross Section Evaluation Working Group) aux Etats - Unis d'Amérique.

EXFOR EXchange FORmat for experimental numerical nuclear reaction data. C'est une base de données nucléaires expérimentales contenant également des informations bibliographiques, procédures expérimentales et sources des incertitudes relatives aux mesures stockées.

FBR Fast Breeder Reactor. C'est un réacteur à neutrons rapides surgénérateur qui utilise le combustible $\text{UO}_2 - \text{PuO}_2$. Il fabrique par la suite du plutonium à partir de l'U-238. Le nom de ce type de réacteur vient du fait qu'il fonctionne avec des neutrons rapides et qu'il produit plus de plutonium qu'il n'en consomme.

FRESCO Code dédié à la réalisation des calculs de voies de réaction couplées en Physique nucléaire . Il a été développé au départ en 1983 par Ian Thompson au Laboratoire Daresbury (Royaume Uni).

FRM Forschungsreaktor München. Premier réacteur de recherche en Allemagne attaché à l'Université de Munich. Il a atteint une puissance nominale de 4 MW. Depuis 2004, il a été remplacé par le réacteur FRM II d'une puissance de 20 MW. Les deux versions FRM partagent le but commun qui est la production de neutrons à des fins de recherche scientifique.

FWHM Full Width at Half Maximum. L'acronyme désigne ici la largeur à mi-hauteur de la résonance.

GCR Gas-cooled Reactor. Ce terme désigne un réacteur modéré au graphite et refroidi au dioxyde de carbone. Ce type de réacteur peut fonctionner à l'uranium naturel.

GECCOS GEneral Coupled-Channel COde System. C'est un code dédié aux calculs des réactions nucléaires avec un objectif de le rendre le plus possible aisé à utiliser. Cet objectif vise l'utilisation minimale d'information d'entrée en dotant le code des valeurs des paramètres par défaut et des bibliothèque de données internes.

GELINA Geel Electron Linear Accelerator. Accélérateur linéaire d'électrons destiné à la production de neutrons par effet bremsstrahlung dans une cible d'uranium. Cette installation européenne est exploitée par le JRC (Joint Research Center) à Geel - en Belgique.

GFR Gas cooled Fast Reactor. C'est un réacteur de génération IV refroidi à l'hélium. Il partage avec d'autres système de génération IV entre autres l'avantage de permettre la minimisation des déchets par un recyclage multiple du combustible.

GIF Generation IV International Forum. C'est un cadre international mis en place depuis l'an 2000 dans le but d'établir les besoins pour une nouvelle génération de réacteurs.

GLS Generalized Least Squares. Techniques d'ajustement des paramètres s'appuyant sur la minimisation de l'écart théorie-expérience par moindres carrés pour des observables corrélées et une variance non unique. Cette technique est largement utilisée par des codes d'évaluation en Physique nucléaire pour l'ajustement des paramètres des modèles.

HFBR High Flux Beam Reactor. Les HFBR sont des réacteurs expérimentaux construits dans le but d'obtenir un haut flux de neutrons dans les canaux de sortie.

HPGe High Purity Germanium. Ce sont des semi-conducteurs à base de germanium utilisés dans la détection des photons. Ces détecteurs sont réputés pour leur bonne résolution en énergie.

HPRL High Priority Request List. C'est une compilation des besoins visant l'amélioration des données nucléaires pour des applications dans l'industrie nucléaire. Cette compilation a été initiée et mise à jour régulièrement dans le cadre des travaux du WPEC.

IRSN Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire. C'est un établissement public à caractère industriel et commercial français dont la mission concerne des risques liés aux rayonnements ionisants utilisés dans l'industrie, la médecine ou les rayonnements naturels.

JAEA Japan Atomic Energy Agency. Agence japonaise pour l'énergie atomique équivalente au Commissariat à l'Energie Atomique et aux Energies Alternatives (CEA) en France.

JEFF Joint Evaluated Fission and Fusion File. C'est la bibliothèque de données nucléaires évaluées de la communauté scientifique européenne.

JENDL Japanese Evaluated Nuclear Data Library. C'est une bibliothèque de données nucléaires évaluées développée par le JAEA. La première version JENDL-1 a été produite en 1977.

JRC Joint Research Centre. C'est un centre commun de recherche de l'Union Européenne. Le JRC possède six centres situés respectivement à : Bruxelles (Belgique), Geel (Belgique), Ispra (Italie), Karlsruhe (Allemagne), Petten (Pays-Bas), Séville (Espagne).

KamLAND Kamioka Liquid scintillator Anti-Neutrino Detector. C'est un détecteur de neutrinos situé à Kamioka au Japon.

KIT Karlsruhe Institute of Technology. C'est une des plus prestigieuses institutions universitaires en Allemagne.

LAB ou **Lab** Laboratoire. Système de coordonnées pour la simulation de l'interaction de deux corps.

LANL Los Alamos National Laboratory. C'est un laboratoire du Département des énergies des Etats-Unis situé à Los Alamos (Etat du Nouveau-Mexique).

LBE Lead Bismuth Eutectic. C'est un alliage Plomb-Bismuth présentant la propriété eutectique (point de fusion minimum).

LEPh Laboratoire d'Etudes de Physique. C'est un des laboratoires du SPRC appartenant au centre du CEA de Cadarache. C'est dans ce dernier que s'est déroulée cette thèse.

- LFR** Lead cooled Fast Reactor. C'est un réacteur à neutrons rapides refroidi au plomb (fondu ou sous forme d'alliage eutectique plomb-bismuth). Il présente un important avantage du point de vue développement durable étant donné que le plomb est un métal abondant et disponible.
- MLBW** Multi Level Breit-Wigner. C'est une approximation de la théorie de la matrice R qui consiste à négliger les interférences entre éléments non diagonaux de la matrice R.
- MSR** Molten Salt Reactor. C'est un réacteur refroidi au sel fondu. Pour ce type de réacteur, le combustible (sous forme de sel de combustible) est dissout dans le liquide de refroidissement.
- NC** Noyau Composé. Le terme désigne l'ensemble projectile-noyau cible en équilibre statistique (théorie du noyau composé).
- NJOY** Code de traitement développé au laboratoire national de Los Alamos et dédié à la reconstruction des sections efficaces ponctuelles et multigroupes à partir des fichiers du format ENDF.
- NRG** Nuclear Research and Consultancy Group. C'est un institut néerlandais qui exploite le réacteur nucléaire de Petten. Il est le leader mondial dans la production des isotopes médicaux.
- ORELA** Oak Ridge Electron Linear Accelerator. Une installation destinée à la production des neutrons par effet bremsstrahlung dans une cible de Tantale appartenant à la Division de Physique du Laboratoire d'Oak Ridge (Etats-Unis). Les neutrons produits sont entre autres utilisés pour études des réactions nucléaires induites par neutrons (mesure de sections efficaces par technique de temps de vol).
- ORNL** Oak Ridge National Laboratory. Un laboratoire appartenant au Département d'Energie des Etats-Unis et situé dans l'est de l'état du Tennessee. Parmi ses missions se trouve notamment l'exploitation de la source de neutrons ORELA.
- PHWR** Pressurised Heavy Water Reactor. C'est un réacteur qui utilise l'eau lourde à la fois comme modérateur et comme caloporteur. Le plus connu dans cette famille est le réacteur canadien CANDU (Canadian Deuterium Uranium).
- PWR** Pressurised Water Reactor. C'est un réacteur utilisant l'eau légère comme modérateur et caloporteur. L'eau du circuit primaire, le modérateur, est maintenue à une très haute pression pour éviter qu'elle ne bout. Le parc nucléaire commercial français est essentiellement constitué de réacteurs

nucléaires à eau sous pression (58 réacteurs de génération II et un réacteur de génération III en construction à Flamanville).

RBMK (Russe) Réacteur refroidi à l'eau légère et modéré au graphite. Ce type de réacteur utilise comme combustible de l'uranium peu enrichi (2,6 %). Depuis l'accident de Tchernobyl qui impliquait un réacteur de cette famille, des efforts ont été entrepris pour la modernisation du parc existant.

REFIT Code dédié à l'analyse des résonances sur les données de transmission et de capture neutronique. Le code utilise l'approximation Reich-Moore de la théorie matrice R.

RIPL Reference Input Parameter Library. C'est une bibliothèque de paramètres d'entrée des codes de calcul des réactions et d'évaluation de données nucléaires. Cette bibliothèque contient entre autres les masses des noyaux, les niveaux énergétiques discrets des noyaux, les paramètres phénoménologiques du modèle optique, etc. Elle a été mise en place par l'AIEA et la plus récente version, RIPL-3, existe depuis 2009.

RM Reich-Moore. C'est l'approximation la plus appliquée de la théorie de la matrice R. Elle consiste à négliger les contributions des éléments non diagonaux pour certaines voies (en particulier pour le traitement des voies de désexcitation radiatives) dans la matrice R. Elle est considérée comme la plus rigoureuse parmi les approximations de la théorie de la matrice R.

RPI Rensselaer Polytechnic Institute. Institution universitaire et de recherche situé dans l'Etat de New-York (Etats-Unis).

RRR Resolved Resonance Range. L'acronyme désigne l'intervalle énergétique dans lequel les résonances sont bien distinctes les unes des autres dans le profil de la section efficace. La largeur à mi-hauteur des résonances est inférieure à l'espacement moyen entre les résonances.

SAMMY Code d'évaluation de données nucléaires développé au laboratoire national d'Oak Ridge (Etats-Unis). C'est un code reconnu depuis longtemps dans le monde de l'évaluation des réactions nucléaires (la première version du code est sortie en 1980) et il est toujours cité comme référence.

SC Système Composé. Le terme désigne l'ensemble projectile-noyau cible qui n'a pas encore atteint l'équilibre statistique (théorie du noyau composé).

SCWR Super Critical Water Reactor. C'est un réacteur de génération IV qui fonctionne à haute température et à haute pression avec un refroidissement à l'eau légère (température et pression supérieures aux valeurs critiques, c-à-d 374°C, 22.1 MPa). Pour ce type de réacteur, il est estimé une efficacité de

plus de 44%, largement meilleure par rapport à celle des réacteurs refroidis à l'eau légère actuels qui est 34-36 %.

SFR Sodium cooled Fast Reactor. Réacteur à neutrons rapides utilisant le sodium liquide comme caloporteur.

SLBW Single Level Breit-Wigner. La plus restrictive des approximations de la théorie de la matrice R qui néglige les interférences entre résonances.

SPRC Service de Physique des Réacteurs et du Cycle. C'est un des services du Département d'Etudes des Réacteurs (DER) du CEA situé dans le centre de Cadarache. Il abrite le Laboratoire d'Etudes de Physique (LEPh) dans lequel s'est déroulée cette thèse.

TALYS Code informatique dédié à l'analyse et la prédiction des réactions nucléaires. Il est né d'une collaboration entre NRG Petten (Pays-Bas) et CEA Bruyères-le-Châtel (France). Le code TALYS existe depuis 1998. Il est le successeur du code GNASH (Los Alamos).

TENDL TALYS-based Evaluated Nuclear Data Library. C'est une bibliothèque de données fournie de manière systématique par le code TALYS. Elle contient des données pour des énergies allant de la fin du domaine RRR jusqu'à 200 MeV.

TOF Time of Flight. Technique de mesure de données utilisée en Physique nucléaire s'appuyant sur la connaissance de la distance entre la source et le détecteur ainsi que du temps mis par le projectile pour parcourir cette distance.

TORA TOols for Resonance Analysis. Outil de calcul de sections efficaces des réactions nucléaires construit au cours de cette thèse.

u.m.a Unité de masse atomique.

URR Unresolved Resonance Range. L'acronyme désigne l'intervalle énergétique dans lequel les résonances se recouvrent partiellement les unes des autres dans le profil de la section efficace. La largeur à mi-hauteur des résonances est supérieure à l'espacement moyen entre les résonances.

VdG Van de Graaf. Accélérateur de particules chargées dont le principe repose sur l'application d'une différence de potentiel.

VHTR Very High Temperature Reactor. C'est un réacteur de génération IV modéré au graphite. Le coeur possède une grande stabilité vis-à-vis de la température et peut atteindre 1000°C.

WPEC Working Party on international nuclear data Evaluation Co-operation.

Une collaboration mise en place par l'Organisation de coopération et de développement économiques (OCDE) depuis 1989 dans le but de promouvoir l'échange d'information sur l'évaluation des données nucléaires, les mesures, les modèles de calcul, etc.

WPEC-SG 22 Le sous-groupe 22 du WPEC.

WPEC-SG 40 Le sous-groupe 40 du WPEC.