

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO  
INSTITUTO DE FÍSICA

**MOVIMENTOS COLETIVOS  
DE EMPARELHAMENTO ISOVETORIAL**

um tratamento variacional simplificado  
com soluções analíticas de BCS projetado

*Kyotoku*  
*Dr. Diego*

*J. J. ...*  
*Emerson José Veloso de Barros*  
*Mauro Kyotoku*

**MAURO KYOTOKU**  
tese de doutoramento  
apresentada ao instituto  
de física da usp

SÃO PAULO · 1979

SBI-IFUSP



305M810T0441



"Parece escusado explicar uma coisa de si tão simples e intuitivamente compreensível. Sucede, porém, que a estupidez humana é grande, e a bondade humana não é notável."

Fernando Pessoa

## A G R A D E C I M E N T O S

Desejamos em primeiro lugar agradecer aos professores, colegas e funcionários do IFUSP, que tornaram possível a realização deste trabalho, e em especial

Ao professor Hsi-Tseng Chen pelas discussões e pelos conselhos úteis quando da realização do trabalho e principalmente pelas muitas horas dispendidas durante a redação final da tese.

Ao Akiyoshi Mizukami e ao Alfredo Galeão pelas oportunas discussões durante a realização do trabalho.

Aos colegas Amando Siuiti Ito, André Tsutomu Ota, José Luciano Miranda Duarte, Luis Carlos Gomes e Yassuko Hosoume que muito contribuíram para redação final da tese.

Ao pessoal do SEMA e do CCE-USP pela assistência na elaboração dos programas de computador e pela execução dos mesmos.

A Maria Cecília Arouche Celestino e Rita Lavinia Torriani pelo paciente trabalho de datilografia.

As minhas irmãs Elizabeth e Iumi, que muito ajudaram com os desenhos e nos pormenores finais da tese.

A FAPESP pelo apoio financeiro.

Ao Perclides pelas cópias Xerox.

## R E S U M O

Obtivemos, a partir do reconhecimento de propriedades de simetria em uma classe de funções de onda tipo BCS, expressões analíticas para energias de BCS projetadas e taxas de transição de reações entre estados coletivos de emparelhamento isovetorial em núcleos. Como consequência, efetuamos um tratamento simplificada de coordenadas geradoras.

Nesta tese, o objetivo é mais o de estabelecer um instrumento simples e eficiente para descrever estes estados coletivos  $0^+$ , do que apresentar novos resultados. Testamos a validade, as limitações e vantagens desta nossa aproximação em modelos simples e núcleos. Entre os diversos resultados, nossas amplitudes espectroscópicas obtidas por GCM são comparáveis ao métodos de diagonalização exata no modelo de camadas.

De maneira geral, podemos afirmar: o que foi obtido encoraja-nos sobremaneira, especialmente se considerarmos que elas foram conseguidos por uma aproximação bastante simples.

Também apresentamos alguns novos resultados de tal forma que podemos colocar em bases sólidas a nossa abordagem dos estados coletivos de emparelhamento isovetoriais.

Em vista da simplicidade de nossa aproximação, o presente modelo pode ser considerado um bom candidato para um estudo sistemático dos estados coletivos de emparelhamento isovetorial, que em núcleos semi-pesados, são fortemente populados por reações de transferência de um par.

## ABSTRACT

Analytical expressions for the projected-BCS energies and reaction transition rates among the isovector pairing collective states are obtained by the recognition of symmetry properties in a class of BCS wave functions. As a consequence it was possible to employ a simplified Generator Coordinate Method calculation.

The main purpose of the present work is to establish and develop a simple yet powerful tool for the less complicated nuclear models and for some real nuclei. Among the various results, our GCM values of spectroscopic amplitude are shown to be comparable to those of the Shell Model calculations. This is indeed encouraging especially in view of the fact that they were reached using a simple approximation such as the present one.

The results also clearly demonstrate that our model is on a rather sound basis, and can be applied immediately to the study of isovector collective motions.

The great simplicity of the present method, as compared with their earlier complicated versions, suggests that they might prove useful in the study of isovector pairing collective states which are strongly populated by pair transfer reactions in the medium weight nuclei.

## ÍNDICE

|  |    |
|--|----|
| 1 - Introdução geral   | 1  |
| 2 - Teoria de BCS com isospin  | 7  |
| 2.1 - Introdução   | 7  |
| 2.2 - O formalismo de HFB para o tratamento do emparelhamento neutron-proton                           | 9  |
| 2.3 - Determinação dos estado fundamental de núcleos par-par   | 16 |
| 2.4 - Casos especiais  | 20 |
| 2.4.1 - Sistema de nucleons idênticos  | 20 |
| 2.4.2 - Núcleos auto-conjugados  | 23 |
| 2.5 - Discussão das limitações da teoria de BCS  | 29 |
| 2.5.1 - Flutuações em número e isospin   | 29 |
| 2.5.2 - Estados espúrios   | 32 |
| 2.5.3 - Colapso da aproximação BCS   | 32 |
| 3 - Teoria de projeção em isospin e número   | 35 |
| 3.1 - Introdução   | 35 |
| 3.2 - O método de Peierls-Yoccoz aplicado a projeção de isospin e número                               | 37 |
| 3.3 - A projeção após o cálculo variacional - PBCS   | 42 |
| 3.3.1 - Exemplo ilustrativo: Projeção em número para o caso de nucleons idênticos                      | 43 |
| 3.3.2 - Exemplo ilustrativo: Projeção simultânea de isospin e número para o emparelhamento isovetorial | 44 |
| 3.4 - A projeção antes do cálculo variacional - FBCS   | 46 |

|   |     |
|---|-----|
| 4 - Método de coordenadas geradoras para emparelhamento isovetorial   | 53  |
| 4.1 - Introdução  | 53  |
| 4.2 - Equação de Griffín-Hill-Wheeler   | 55  |
| 4.3 - Cálculo das funções superposição $H^{TN}(\Delta^r, \Delta^s)$ e $I^{TN}(\Delta^r, \Delta^s)$                  | 57  |
| 4.4 - Solução numérica da equação de GHW  | 59  |
| 4.5 - Aplicação do GCM para sistemas emparelhados   | 60  |
| 4.5.1 - Exemplo ilustrativo; GCM para o caso de nucleons idênticos  | 60  |
| 4.5.2 - Exemplo ilustrativo: GCM para o caso de emparelhamento $T = 1$  | 62  |
| 5 - Expressões analíticas para projeção simultânea em isospin e número de funções de onda tipo BCS.                 | 65  |
| 5.1 - Introdução  | 65  |
| 5.2 - A obtenção das funções superposição $h(\Omega, \theta)$ e $n(\Omega, \theta)$ e um indício para solução geral | 71  |
| 5.3 - Cálculo da energia de BCS projetada para estados Yrast de isospin $0^+$ .                                     | 75  |
| 5.4 - Expressões analíticas para a projeção no espaço de isospin e de "gauge" com simetria axial                    | 88  |
| 6 - Um tratamento simplificado de coordenadas geradoras com soluções analíticas da projeção de BCS.                 | 104 |

|  |     |
|--|-----|
| 7 - Expressões analíticas do fator espectroscópico para reações de transferência de duas partículas dentro do presente modelo. | 110 |
| 7.1 - Introdução   | 110 |
| 7.2 - Informações sobre a estrutura nuclear a partir de reações de transferência de um par                                     | 111 |
| 7.3 - O fator espectroscópico de reações de transferência de um par dentro do presente modelo                                  | 115 |
| <br>   |     |
| 8 - Resultados e discussões  | 128 |
| 8.1 - Introdução   | 128 |
| 8.2 - Comparação com o trabalho precedente   | 132 |
| 8.3 - Comparação com soluções exatas   | 134 |
| 8.4 - Modelos semi-realísticos na camada fp.   | 157 |
| <br>   |     |
| Apêndice A-1   | 169 |
| <br>   |     |
| Referências  | 170 |

## ÍNDICE DE FIGURAS

|              |     |
|--------------|-----|
| Figura 2.1 - | 22  |
| Figura 2.2 - | 24  |
| Figura 2.3 - | 33  |
| Figura 3.1 - | 47  |
| Figura 3.2 - | 48  |
| Figura 3.3 - | 49  |
| Figura 8.1 - | 138 |
| Figura 8.2 - | 139 |
| Figura 8.3 - | 142 |
| Figura 8.4 - | 143 |
| Figura 8.5 - | 144 |
| Figura 8.6 - | 145 |
| Figura 8.7 - | 148 |
| Figura 8.8 - | 150 |
| Figura 8.9 - | 152 |
| Figura 8.10- | 154 |
| Figura 8.11- | 160 |

## ÍNDICE DE TABELAS

|              |     |
|--------------|-----|
| Tabela 2.1 - | 31  |
| Tabela 3.1 - | 49  |
| Tabela 4.1 - | 64  |
| Tabela 4.2 - | 64  |
| Tabela 5.1 - | 99  |
| Tabela 5.2 - | 100 |
| Tabela 7.1 - | 113 |
| Tabela 8.1 - | 134 |
| Tabela 8.2 - | 146 |
| Tabela 8.3 - | 151 |
| Tabela 8.4 - | 158 |
| Tabela 8.5 - | 163 |
| Tabela 8.6 - | 164 |
| Tabela 8.7 - | 165 |
| Tabela 8.8 - | 167 |

## 1 - Introdução Geral

Formulamos nesta tese um método eficiente e simples para descrever os movimentos coletivos de emparelhamento isovetoriais, que são caracterizados pelas reações de transferência altamente populadas de dois nucleons, com momento angular e paridade  $0^+$ . Alguns dos resultados aqui apresentados já foram anunciados [Kyotoku e Chen 1979].

Representamos, numa primeira abordagem, estes estados  $0^+$  por funções de onda tipo BCS, que caracteristicamente não tem conservados o número de partículas e o isospin. A seguir restauramos estas simetrias quebradas pelas técnicas usuais de projeção. Em vez de usar o tradicional procedimento numérico para efetuar a projeção, preferimos, nesta tese, a partir do reconhecimento de propriedades de simetria na função de onda de tipo BCS, um tratamento analítico.

Fisicamente, escolhemos em primeiro lugar um sistema com nucleons suficientes para que esteja distante da camada fechada possuindo assim distorções permanentes no espaço de isospin e de "gauge". O primeiro é associado a mistura de prótons e nêutrons, enquanto que o segundo é devido a não conservação do número de partículas [Ginocchio e Wenner, 1968].

Sob estas circunstâncias é possível a existência de uma completa separação entre as variáveis coletivas intrínsecas. A função de onda coletiva é um produto de funções D de Wigner do espaço de isospin e de "gauge". A função de onda intrínseca é aquela do tipo BCS, especialmente escolhida para conservar a projeção do isospin total no eixo de simetria (estamos supondo sistema intrínseco axialmente simétrico).

Em seguida, movemos o sistema para a região próxima à camada fechada, usando o método de coordenadas geradoras, onde os ângulos de Euler e de "gauge" são usados como coordenadas geradoras e o produto das funções de onda coletiva e intrínseca correlacionados adequa

damente através de operadores de rotação, como função de onda geradora.

A solução resultante da integral de Hill-Wheeler é a nossa função de onda projetada, que tratamos analiticamente. Portanto, neste trabalho apresentamos um novo modelo microscópico, incluindo os graus de liberdade rotacionais e vibracionais de emparelhamento que estão associados com a força de emparelhamento isovetorial em analogia com o tratamento de deformações quadrupolares.

Este modelo pode ser usado para um estudo sistemático dos estados  $0^+$  existentes em núcleos acima do  $^{40}\text{Ca}$ . Não simplesmente na região de  $40 \leq A \leq 70$  da tabela periódica, a melhor região para observar o emparelhamento isovetorial, mas também em regiões de alto isospin tal como os isotonos de  $N = 82$  ( $^{144}\text{Sm}$ ,  $^{142}\text{Nd}$ ,  $^{140}\text{Ce}$ ,  $^{138}\text{Ba}$ ,  $^{136}\text{Xe}$ ). Para o tratamento destes núcleos, o conceito de Yrast de emparelhamento pode ser útil, mas cálculos do tipo diagonalização exata no modelo de camadas, que também é uma abordagem microscópica, ou é impossível ou é um trabalho formidável sem ser admirável.

Recentemente, de maneira similar para tratar destes estados  $0^+$ , Chen, Mithler e Faessler (1978) desenvolveram dois métodos, aproximação de BCS-projetada e coordenadas geradoras, que conservam o número de nucleons e o isospin. A dificuldade básica encontrada nestes métodos é o sofisticado e dispendioso cálculo computacional necessário para restaurar as simetrias perdidas na função de onda tipo BCS. Para eliminar as flutuações em isospin e número efetua-se uma integral de projeção em 4 dimensões (3 em relação aos ângulos de Euler do espaço de isospin e 1 ao ângulo de "gauge" do espaço abstrato de mesmo nome). Consequentemente, os cálculos são em geral mais complicados do que a projeção em momento angular nos

núcleos deformados, onde se considera apenas um dos ângulos de Euler ao se fazer a tradicional simplificação de simetria axial.

No presente trabalho buscamos a equivalente simetria axial no caso de isospin a fim de simplificar os problemas numéricos e computacionais. Podemos dizer que foi proveitoso o esforço desenvolvido nesta direção, pois reconhecemos a existência de uma classe de funções de onda tipo BCS que apresenta simetria axial no espaço de isospin, o que não só simplifica o problema, mas coloca nos em um caminho para atacar a projeção de BCS analiticamente. Consequentemente economizamos muito tempo e dinheiro para efetuar a projeção. Para alguns casos, inclusive conseguimos obter formas simples para energias, de tal modo que algumas das características físicas começam a ficar transparentes.

Além disso, a nossa bem sucedida abordagem analítica facilita a obtenção do fator espectroscópico que é uma quantidade física importante para a análise de reações de transferência de um par. Em relação a este ponto os empecilhos ao tratamento numérico foram tais que estão ainda para ser superados. [H. Müther - comunicação particular] .

Com o método desenvolvido pudemos também projetar em  $N$  e  $T$  bem definidos a partir de componentes não dominantes da função de onda de tipo BCS, que é problemático pelo procedimento numérico em razão das dificuldades técnicas. Portanto, estamos aptos para restaurar em uma só vez, estados de diferentes simetrias do ensemble de funções de onda.

A facilidade da projeção torna possível uma cuidadosa investigação dos estados coletivos  $0^+$ , partindo de técnicas variacionais conhecidas como FBCS [Dietrich e outros 1964] com isospin, onde o cálculo variacional é feito após a projeção, que não seria viável se, necessitássemos de muito tempo de processamento, pa

ra cada valor do parâmetro variacional.

O atual método é, sem aumentar a dificuldade, bem mais abrangente do que a complicada versão anterior, [Chen e outros 1978] permitindo tratar, desde isospins mais baixos até os muito altos, de poucas a muitas partículas e também considerar as diferentes intensidades da força de emparelhamento  $G$ . Ainda mais, estamos em condições de atacar o difícil problema que envolve mais de uma camada, ou seja, obter os estados  $Yrast$  de emparelhamento das regiões do  ${}_{58}\text{Ce}^{140}$  ou  ${}_{40}\text{Zr}^{90}$  onde, praticamente, não é possível fazer cálculos de diagonalização exata no modelo de camadas.

Apesar de podermos calcular os estados coletivos isovetoriais de emparelhamento acima do cálcio e confrontá-los com a experiência, não desenvolveremos aqui este plano ambicioso, pois nossa ênfase é mais no sentido de estabelecer o método do que na sua ampla aplicação.

Neste sentido testamos a validade, a limitação, e as vantagens da presente abordagem, comparando em modelos simples e núcleos, os nossos resultados com os existentes.

No modelo simétrico de dois níveis a partir de GCM reproduzimos quase exatamente, tanto na energia como no fator espectroscópico, os resultados da solução exata de Dussel e outros (1970). Fizemos também, neste modelo, cálculos para energia de alto isospin e notamos um interessante comportamento destes estados ao analisá-los com as diferentes aproximações (PBCS e FBCS). Também estudamos no modelo simétrico de dois níveis a decomposição da função de onda tipo BCS, ficando claro, por um lado, a necessidade de projeção devido a baixa probabilidade de cada uma das componentes da função de onda de BCS e, de outro, a potencialidade do método, que permite calcular as componentes de muito baixa probabilidade.

Em núcleos, particularmente na região de  $52 \leq A \leq 60$ , onde já anunciamos alguns resultados [Kyotoku e Chen 1979], comparamos os nossos valores da energia e amplitude espectroscópica com calculados a partir da diagonalização exata Bés e outros 1973. Os resultados são altamente encorajadores, principalmente se levarmos em conta que o cálculo de cada estado leva segundos em computadores de velocidade normal, o que torna os nossos cálculos tão práticos quanto os de BCS com neutrons e protons. Para ilustrar a potencialidade do método fizemos alguns cálculos para 5 níveis ativos, onde o uso do método de diagonalização exata é problemático.

Ao calcularmos os estados excitados por GCM supusemos também que eles são axialmente simétricos. Para confirmar a validade desta hipótese comparamos os nossos cálculos que se baseiam em uma coordenada geradora  $(\Delta_{\pi\nu})$  com aqueles de três coordenadas geradoras  $(\Delta_{\pi\pi}, \Delta_{\nu\nu}, \Delta_{\pi\nu})$  [Chen e outros 1978].

Para esta aproximação simples, os nossos resultados parecem ser favoráveis para  $T = 0$  e em todos os estados nos limites de vibração e rotação de emparelhamentos. Entretanto, maiores investigações são necessárias para chegar a conclusões definitivas sobre as propriedades de simetria dos estados excitados de senioridade zero. Além disso, a nossa função de onda é a superposição de estados simétricos de carga de núcleos vizinhos [Chen e Richardson-1973]. Portanto, é impossível projetar estados com diferentes simetrias de carga além desta. Isto impõe uma limitação ao atual modelo. Entretanto, os estados simétricos  $0^+$  já formam por si só um vasto campo a ser explorado.

A seguir, no capítulo 2 faremos uma revisão extensa e necessária da solução BCS para um sistema de protons e neutrons correlacionados através da força de emparelhamento. Discutiremos, além das limitações desta teoria, alguns casos de interesse físico

que serão aproveitados no desenvolvimento do trabalho.

Sabemos que uma das limitações da teoria de BCS com neutrons e protons é a quebra de simetria em isospin e número. No capítulo 3, mostraremos como na literatura estas simetrias são restauradas pelas técnicas usuais de projeção. De passagem, para ilustrarmos os resultados de cálculos variacionais antes da projeção (PBCS) e depois da projeção (FBCS) veremos também o caso de projeção num sistema com partículas idênticas.

No capítulo 4 é feita uma revisão de como as funções de onda tipo BCS projetadas podem ser usadas como funções de onda geradoras do método de coordenadas geradoras. Serão feitas algumas aplicações para sistemas de partículas idênticas e para sistemas com neutrons e protons.

A partir do capítulo 5 apresentaremos o conteúdo central da tese, ou seja, serão obtidas expressões analíticas para energias de BCS projetadas a partir do reconhecimento de propriedades de simetria em uma classe de funções de onda tipo BCS.

Como consequência, efetuamos no capítulo 6 um tratamento simplificado de coordenadas geradoras. Um teste mais restrigente ao nosso modelo é o cálculo de amplitudes espectroscópicas que será feito no capítulo 7.

O capítulo 8 servirá para as aplicações das fórmulas obtidas nos três capítulos anteriores em modelos simples e núcleos. Compararemos os nossos resultados com os existentes na literatura e apresentaremos alguns novos, de tal forma que possamos colocar em bases sólidas a nossa abordagem dos estados coletivos de emparelhamento isovetoriais.

## 2. A teoria de BCS com isospin

### 2.1. Introdução

Uma teoria satisfatória da estrutura nuclear deveria explicar as propriedades nucleares em termos da interação das partículas que a constituem. Se desprezarmos os efeitos relativísticos e a possível existência de forças de muitos corpos, a equação de Schrödinger com a interação de dois corpos possibilita a descrição de um sistema de muitos nucleons. Entretanto são encontradas duas dificuldades para se resolver a equação de Schrödinger: O conhecimento imperfeito da força de dois corpos no núcleo e a resolução do problema quântico de muitos corpos. Em face a estes problemas, para descrever os diferentes fenômenos nucleares, a alternativa foi elaborar modelos simples a partir da identificação de conceitos apropriados e graus de liberdade relevantes.

Assim para explicar principalmente a propriedade da alta estabilidade dos núcleos denominados "mágicos" Mayer (1949) e Jensen e colaboradores (1949) elaboraram o modelo de camadas. Neste modelo considera-se que os nucleons movem-se independentemente num potencial comum, resultante do efeito médio de todos os outros nucleons sobre cada um deles, podendo desta forma também determinar os spins e paridades dos níveis mais baixos.

Apesar do grande sucesso do modelo de camadas em prever algumas propriedades nucleares, a impossibilidade em descrever a mistura de configurações, observados em reações de transferência de um nucleon e a incapacidade em descrever os movimentos coletivos, tais como vibração ou rotação, indicavam a necessidade de introduzir forças residuais de dois corpos, que não poderiam ser incluídos no campo médio.

Um dos avanços da física nuclear foi quando reconheceu-se que a interação de emparelhamento era um efeito importante da força residual [Bohr e outros 1958]. Vários fatos experimentais suportavam essa idéia tais como, efeito impar-impar, momentos de inércia mais baixos do que os previstos pelo modelo de camadas e o hiato de energia nos espectros dos núcleos par-par.

Historicamente os estudos da correlação de emparelhamento se restringiam principalmente ao problema de correlações entre partículas idênticas, ou entre prótons ou entre nêutrons. Entretanto devido a interação nuclear ser independente da carga [Henley - 1969] espera-se que a correlação entre nêutrons e prótons tenha a mesma importância que a correlação entre as partículas idênticas. Realmente imagina-se que a correlação de emparelhamento venha a ser efetiva quando os nucleons estão próximos a superfície de Fermi. Sendo assim a correlação nêutron-próton não tem importância em núcleos pesados, onde os últimos nêutrons e prótons preenchem camadas diversas. Entretanto em núcleos com  $20 \leq N, Z \leq 50$  onde os últimos nêutrons e prótons estão na mesma camada, torna-se necessário incluir a interação nêutron-próton.

Neste capítulo vamos considerar basicamente a solução de BCS para este sistema de nêutrons e prótons sujeitos a correlação de emparelhamento. Na secção 2.2 descrevemos o formalismo de HFB projetado, bastante conveniente para este tipo de emparelhamento. A seguir na secção 2.3 determinaremos o estado fundamental aproximado para núcleos par-par. Alguns casos especiais serão considerados na secção 2.4 e finalmente na secção 2.6 discutiremos as limitações da teoria de BCS que deverão ser superadas a partir do capítulo 3.

2.2. O formalismo de HFB para o tratamento de emparelhamento neutron-proton

O ponto de partida é a seguinte hamiltoniana esfericamente simétrica, escrita na base do modelo de camadas

$$\hat{H} = \sum_{jmt} \epsilon_j c_{jmt}^+ c_{jmt} + \frac{1}{4} \sum_{(jmt)'s} \langle j_1 m_1 t_1 j_2 m_2 t_2 | \sigma | j_3 m_3 t_3 j_4 m_4 t_4 \rangle c_{j_1 m_1 t_1}^+ c_{j_2 m_2 t_2}^+ c_{j_4 m_4 t_4} c_{j_3 m_3 t_3} \quad (2.2.1)$$

na base do modelo de camadas considera-se que é suficiente para caracterizar um estado de partícula independente, o número quântico de momento angular  $j$ , o número quântico magnético  $m$  e a projeção de isospin  $t$ , explicitamente rotulados como  $t = \pi$  para prótons e  $t = \nu$  para neutrons. Os operadores  $c$ 's e  $c^+$ 's são operadores aniquilação e criação de partículas.  $\epsilon_j$  são as energias dos níveis de partícula independente e  $\langle j_1 m_1 t_1 j_2 m_2 t_2 | \sigma | j_3 m_3 t_3 j_4 m_4 t_4 \rangle$  são os elementos de matriz da interação nucleon-nucleon que devem obedecer as seguintes relações de anti-simetria

$$V_{1234} = -V_{2134} = -V_{1243} = V_{3412} \quad (2.2.2)$$

onde escrevemos para encurtar  $V_{1234} = \langle j_1 m_1 t_1 j_2 m_2 t_2 | \sigma | j_3 m_3 t_3 j_4 m_4 t_4 \rangle$

Embora, toda a formulação que apresentaremos nesta tese seja válida para uma hamiltoniana independente da carga, vamos usar a convencional interação de emparelhamento  $T = 1$  como elemento de matriz constante

$$\langle j_1 m_1 t_1 j_2 m_2 t_2 | \sigma | j_3 m_3 t_3 j_4 m_4 t_4 \rangle = -\frac{G}{2} S_{j_2 m_2} S_{j_4 m_4} \delta_{j_1 j_2} \delta_{j_3 j_4} \delta_{-m_1 m_2} \delta_{-m_3 m_4} \left[ \delta_{t_1 t_3} \delta_{t_2 t_4} + \delta_{t_1 t_4} \delta_{t_2 t_3} \right] \quad (2.2.3)$$

onde  $s_{jm} = (-)^{j-m}$  é um fator de fase. Este potencial apesar de ser bastante idealizado apresenta algumas das características do potencial realísticos e o estudo de algumas peculiaridades da estrutura nuclear pode ser iniciado a partir dele.

Existem diferentes caminhos para tratar a hamiltoniana (2.2.1) com a interação de emparelhamento constante (2.2.3) [Goswami 1964] [Camiz et al 1966] e [Ginochio e Weneser 1968]. Nós seguiremos o formalismo de Hartree-Fock-Bogoliubov HFB que será bastante adequado num momento posterior, ou seja, ao efetuarmos a projeção.

A teoria de Hartree-Fock-Bogoliubov, que é a unificação das teorias de Hartree-Fock (HF) e BCS, foi elaborada para tratar auto-consistentemente os fenômenos de emparelhamento em núcleos esféricos e deformados. Neste tratamento as funções de onda de HFB obtidas não tem o número e o momento angular bem definidos. Goeke e outros (1973) formularam um método bastante adequado para restauração destas simetrias quebradas. No presente caso, de emparelhamento com isospin, a função de onda de BCS generalizada não tem o número e o isospin total bem definidos. Como existe uma grande analogia entre a álgebra de momento angular e álgebra de isospin, e estamos basicamente interessados na projeção em número e isospin, é conveniente seguir o formalismo de HFB para o caso de neutrons e protons.

Neste esquema (HFB) o problema de autovalores de  $\hat{H}$  é resolvido pelo princípio variacional em que a função de onda tentativa é:

$$|\phi\rangle = \prod_{jm\tau} (a_{jm\tau}) |0\rangle \quad (2.2.4)$$

onde  $|0\rangle$  é o vácuo real e  $a_{jm\tau}$  são os novos operadores de quasi-

partículas, obtidos a partir da generalização usual da transformação de Bogoliubov-Valatin (1958) e é escrito em termos dos operadores de criação ( $c_{jmt}^+$ ) e aniquilação ( $c_{jmt}$ ) de partículas como:

$$a_{j\tau}^+ = \sum_t [ U_{t\tau}^j c_{jmt}^+ + S_{jm} V_{t\tau}^j c_{j\cdot mt} ] \quad (2.2.5)$$

O índice  $\tau = 1$  e  $\tau = 2$  são usados para distinguir as duas espécies de quasipartículas, que são diferenciadas pela energia e obtidos da mistura do neutron, do proton, do buraco de neutron e do buraco de proton através da força de emparelhamento neutron-proton. Em seguida (2.2.5) é decomposto em três sucessivas transformações de acordo com o teorema de Bloch-Messiah (1962)

i) Uma transformação unitária  $D^j$ , que troca o operador  $c_{jmt}$  por uma combinação linear de  $c_{jmt}$ 's, ou seja:

$$b_{jm\xi} = \sum_t D_{\xi t}^j c_{jmt} \quad (2.2.6)$$

onde a matriz  $D^j$  para este caso é justamente a matriz de rotação no espaço de isospin:

$$D^j = \begin{pmatrix} \cos \varphi_j & \text{sen } \varphi_j \\ -\text{sen } \varphi_j & \cos \varphi_j \end{pmatrix} \quad (2.2.7)$$

ii) Uma transformação especial de Bogoliubov que introduz um novo operador de criação (aniquilação) de quasipartículas  $\eta_{jm\xi}^+$  ( $\eta_{jm\xi}$ ) como uma combinação linear de  $b_{jm\xi}^+$  e  $b_{jm\xi}$

$$\eta_{jm\xi} = u_{\xi}^j b_{jm\xi}^+ - s_{jm} v_{\xi}^j b_{j-m\xi} \quad (2.2.8)$$

com  $u_{\xi}^{j^2} + v_{\xi}^{j^2} = 1$ .

iii) Uma transformação unitária  $C^j$ , que substitue o novo operador de quasipartículas  $\eta_{jm\xi}$  por uma combinação linear  $\eta_{jm\xi}$  que nos leva ao operador  $a_{jm\tau}$

$$a_{jm\tau} = \sum_{\xi} C_{\tau\xi}^j \eta_{jm\xi}^+ \quad (2.2.9)$$

onde a matriz  $C^j$  tem a seguinte forma:

$$C^j = \begin{pmatrix} \cos \psi_j & \text{sen} \psi_j \\ -\text{sen} \psi_j & \cos \psi_j \end{pmatrix} \quad (2.2.10)$$

Para obter uma relação entre  $u_{\xi}^j$ ,  $v_{\xi}^j$  e  $u_{\tau}^j$ ,  $v_{\tau}^j$  é definida a seguinte matriz

$$\begin{aligned} A_{\xi\ell}^j &= u_{\xi}^j \delta_{\xi\ell} \\ B_{\xi\ell}^j &= -v_{\xi}^j \delta_{\xi\ell} \end{aligned} \quad (2.2.11)$$

fazendo com que em notação matricial se tenha a relação:

$$U^j = D^j A^j C^j \quad (2.2.12)$$

$$V^j = D^j B^j C^j$$

Como operadores de quasipartículas devem ser fermiônicos, há necessidade que a transformação generalizada de Bogoliubov seja canônica, implicando nas seguintes relações de ortogonalidade:

$$\sum [U_{t\tau}^j U_{t\tau'}^{j'} + V_{t\tau}^j V_{t\tau'}^{j'}] = \delta_{t\tau'} \delta_{jj'}$$

$$\sum [U_{t\tau}^j V_{t\tau'}^{j'} - V_{t\tau}^j U_{t\tau'}^{j'}] = 0 \quad (2.2.13)$$

$$\sum_{\tau} [U_{t\tau}^j U_{t'\tau}^{j'} + V_{t\tau}^j V_{t'\tau}^{j'}] = \delta_{tt'} \delta_{jj'} \quad (2.2.14)$$

$$\sum [U_{t\tau}^j V_{t'\tau}^{j'} - V_{t\tau}^j U_{t'\tau}^{j'}] = 0$$

Com esta discussão o estado de HFB (2.2.4), que é o vácuo para as quasipartículas  $a_{jm\tau} |0\rangle$ , pode ser escrito com o auxílio da transformação de Bloch-Messiah como:

$$|\phi\rangle = \prod_{jm\xi} (\eta_{jm\xi}) |0\rangle \quad (2.2.15)$$

tomando como única possibilidade os estados emparelhados, tem-se:

$$|\phi\rangle = \prod_{\substack{jm>0 \\ \xi}} \eta_{jm\xi} \eta_{j-m\xi} |0\rangle \quad (2.2.16)$$

usando (2.2.8), que  $b_{jm\xi}$ 's são operadores fermiônicos e  $b_{jm\xi} |0\rangle = 0$ , obtém-se:

$$|\phi\rangle = \prod_{\substack{jm>0 \\ \xi}} (u_{\xi}^j + v_{\xi}^j s_{jm} b_{jm\xi}^+ b_{j-m\xi}^+) |0\rangle \quad (2.2.17)$$

Reescrevendo na forma exponencial e depois em termos dos operadores  $c_{jmt}$ 's, mais adequado para a projeção, tem-se:

$$|\phi\rangle = \prod_{\substack{jm>0 \\ \xi}} [u_{\xi}^j] \exp\left[\frac{1}{2} \sum_{\substack{jm \\ t_1 t_2}} S_{jm}^j f_{t_1 t_2} c_{jm t_1}^+ c_{j-m t_2}^+\right] |0\rangle \quad (2.2.18)$$

com

$$f_{t_1 t_2} = \sum_{\xi} \frac{v_{\xi}^j}{u_{\xi}^j} D_{u_{\xi}^j}^j D_{v_{\xi}^j}^j = [V^j U^{j-1}]_{t_1 t_2} \quad (2.2.19)$$

onde  $U^{j-1}$  é o inverso da matriz de  $U^j$ .

Expandindo a função de onda (2.2.18) obtém-se:

$$|\phi\rangle = \prod_{jm>0} \left[ \rho_4^j c_{j-m\pi}^+ c_{jm\pi}^+ c_{j-m0}^+ c_{jm0}^+ + \rho_{\pi\pi}^j S_{jm} c_{j-m\pi} c_{jm\pi} + \rho_{00}^j S_{jm} c_{j-m0} c_{jm0} + \rho_{\pi 0}^j S_{jm} (c_{j-m\pi}^+ c_{jm0}^+ + c_{j-m0}^+ c_{jm\pi}^+) + \rho_0^j \right] |0\rangle \quad (2.2.20)$$

onde

$$\rho_4^j = v_{\pi 1}^j v_{0 2}^j - v_{0 1}^j v_{\pi 2}^j$$

$$\rho_0^j = u_{\pi 1}^j u_{0 2}^j - u_{0 1}^j u_{\pi 2}^j$$

$$\rho_{00}^j = u_{0 1}^j v_{0 2}^j - v_{0 1}^j u_{\pi 2}^j$$

$$\rho_{\pi\pi}^j = v_{\pi 1}^j u_{0 2}^j - u_{0 1}^j v_{\pi 2}^j$$

$$\rho_{\pi 0}^j = v_{0 1}^j u_{0 2}^j - u_{0 1}^j v_{0 2}^j \quad (2.2.21)$$

Pode-se observar claramente que  $|\phi\rangle$  não é autoestado de  $\hat{T}_z$  e  $T^2$ , pois é construído de pares de nucleons acoplados a  $T = 1$  e  $T_z = \pm 1$  e  $0$ , observe também que a função de onda não possui o número de partículas bem definido, característicos da aproximação BCS.

Estamos agora em condições para determinar variacionalmente as características completas do estado fundamental  $|\phi\rangle$  ou o

vácuo de quasipartículas escrevendo, com o auxílio das matrizes  $\rho^j$ ,  $\chi^j$  e  $\sigma^j$  que estão definidas a seguir, o valor esperado da hamiltoniana  $\hat{H}$  (2.2.1), com a interação de emparelhamento constante (2.2.3) entre estados tentativos  $|\phi\rangle$  é:

$$\langle\phi|\hat{H}|\phi\rangle = \sum_{jt} 2\Omega_j(\epsilon_{jt} - \lambda_t) \rho_{tt}^j - \frac{G}{2} \sum_{jtt'} \Omega_j [\rho_{tt}^j \rho_{t't}^j + \rho_{t't}^j \rho_{tt}^j] - G \sum_{\substack{jj' \\ tt'}} \Omega_j \Omega_{j'} [\kappa_{tt'}^j \sigma_{t't}^{j'}] \quad (2.2.22)$$

e o fator de normalização  $\langle\phi|\phi\rangle = \prod_j [\det \chi_j]^{-\Omega_j}$

onde 
$$\rho_{tt'}^j = \langle\phi|c_{jm_t}^+ c_{jm_{t'}}|\phi\rangle = [V^j v^{jt_r}]_{tt'} \quad (2.2.23)$$

$$\kappa_{tt'}^j = \langle\phi|c_{j-m_t} c_{j-m_{t'}}|\phi\rangle = -[U^j v^{jt_r}]_{tt'} \quad (2.2.24)$$

$$\sigma_{tt'}^j = \langle\phi|c_{jm_t}^+ c_{j-m_{t'}}^+|\phi\rangle = -[U^j v^{jt_r}]_{tt'} \quad (2.2.25)$$

$$\chi_j = U^{jt_r} U^j + V^{jt_r} V^j \quad (2.2.26)$$

Aqui  $U^{jt_r}$  é a matriz transposta de  $U^j$ . Deve-se observar que o fator de fase  $s_{jm}$  não foi incluído nas expressões de (2.2.22), (2.2.24) e (2.2.25) e não será incluído nas expressões semelhantes no decorrer da tese, por aparecerem na forma quadrada e portanto não exercerem nenhum papel. Deve-se mencionar também que, pelas condições de ortogonalidade (2.2.13) e (2.2.14) a matriz  $\chi_j$  é unitária e o fator de normalização é  $\langle\phi|\phi\rangle = 1$ . Os parâmetros  $\lambda_\rho$  e  $\lambda_\pi$  variam de acordo com o número de neutrons ( $N_\rho$ ) e prótons ( $N_\pi$ ) respectivamente, pois o estado tentativo  $|\phi\rangle$  não possui o número de partículas bem definido. Eles são determinados pelas seguintes equações de número usuais:

$$\langle \Phi | \hat{N}_\pi | \Phi \rangle = N_\pi = \sum 2\Omega_j [v_{\pi 1}^{j2} + v_{\pi 2}^{j2}]$$

$$\langle \Phi | \hat{N}_\nu | \Phi \rangle = N_\nu = \sum 2\Omega_j [v_{\nu 1}^{j2} + v_{\nu 2}^{j2}] \quad (2.2.27)$$

Por questão de conveniência relaciona-se, os coeficientes da transformação generalizada de Bogoliubov ( $u_{t\tau}^j$ 's e  $v_{t\tau}^j$ 's), com os seguintes parâmetros  $\Delta_{\pi\pi}$ ,  $\Delta_{\nu\nu}$ ,  $\Delta_{\pi\nu}$  conhecidos como parâmetros de hiato, através da seguinte equação de autovalores, conhecida como equação de HFB [Baranger-1961].

$$\begin{bmatrix} \epsilon_{j\pi} - \lambda_\pi & 0 & \Delta_{\pi\pi} & \Delta_{\pi\nu} \\ 0 & \epsilon_{j\nu} - \lambda_\nu & \Delta_{\nu\pi} & \Delta_{\nu\nu} \\ \Delta_{\pi\pi} & \Delta_{\nu\pi} & -\epsilon_{j\pi} + \lambda_\pi & 0 \\ \Delta_{\pi\nu} & \Delta_{\nu\nu} & 0 & -\epsilon_{j\nu} + \lambda_\nu \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_{\pi\tau}^j \\ U_{\nu\tau}^j \\ V_{\pi\tau}^j \\ V_{\nu\tau}^j \end{bmatrix} = E_{j\tau} \begin{bmatrix} U_{\pi\tau}^j \\ U_{\nu\tau}^j \\ V_{\pi\tau}^j \\ V_{\nu\tau}^j \end{bmatrix} \quad (2.2.28)$$

Resolvendo-se a equação de autovalores acima tem-se:

$$E_{j\tau}^2 = \frac{1}{2} \left\{ k_\pi^j + k_\nu^j \pm [(k_\pi^j - k_\nu^j)^2 - 4K^2]^{\frac{1}{2}} \right\} \quad (2.2.29)$$

com

$$k_\pi^j = (\epsilon_{j\pi} - \lambda_\pi)^2 + \Delta_{\pi\pi}^2 + \Delta_{\nu\pi}^2$$

$$k_\nu^j = (\epsilon_{j\nu} - \lambda_\nu)^2 + \Delta_{\nu\nu}^2 + \Delta_{\nu\pi}^2$$

$$(2.2.30)$$

$$K = \Delta_{\pi\nu} (\Delta_{\pi\pi} + \Delta_{\nu\nu})$$

onde  $\pm$  significa agora as diferentes quasipartículas 1 e 2 de (2.2.5)

### 2.3. Determinação do estado fundamental de núcleos par-par

Para determinar o estado fundamental podemos aplicar o

princípio variacional

$$\delta \frac{\langle \Phi | H' | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle} = 0 \quad (2.3.1)$$

nos parâmetros  $\Delta_{\pi\pi}$ ,  $\Delta_{\nu\nu}$  e  $\Delta_{\pi\nu}$ , ou seja:

$$\frac{\partial}{\partial \Delta_{\pi\pi}} \frac{\langle \Phi | H' | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle} \quad (2.3.2a)$$

$$\frac{\partial}{\partial \Delta_{\nu\nu}} \frac{\langle \Phi | H' | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle} \quad (2.3.2b)$$

$$\frac{\partial}{\partial \Delta_{\pi\nu}} \frac{\langle \Phi | H' | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle} \quad (2.3.2c)$$

que fornecem as seguintes equações:

$$\Delta_{\pi\pi} = \frac{G}{2} \sum_j \Omega_j [v_{\pi 1}^j U_{\pi 1}^j + v_{\pi 2}^j U_{\pi 2}^j] \quad (2.3.3a)$$

$$\Delta_{\nu\nu} = \frac{G}{2} \sum_j \Omega_j [v_{\nu 1}^j U_{\nu 1}^j + v_{\nu 2}^j U_{\nu 2}^j] \quad (2.3.3b)$$

$$\Delta_{\pi\nu} = \frac{G}{2} \sum_j \Omega_j [v_{\pi 1}^j U_{\nu 1}^j + v_{\pi 2}^j U_{\nu 2}^j] \quad (2.3.3c)$$

que somadas as duas equações de número (2.2.27) tem-se no total, as cinco equações acopladas não lineares da aproximação BCS para neutrons e protons, que podem ser resolvidas para determinar  $\Delta_{\pi\pi}$ ,  $\Delta_{\nu\nu}$ ,  $\Delta_{\pi\nu}$ ,  $\lambda_\pi$  e  $\lambda_\nu$ , e assim a energia e a função de onda aproximadas do estado fundamental de um sistema de neutrons e protons com interação de emparelhamento.

Evidentemente a solução de cinco equações acopladas não

lineares implicam na necessidade de computadores, entretanto Goswami (1964), Camiz e outros (1966) e Ginocchio e Weneser (1968) encontraram que a função de onda do estado fundamental de um sistema par-par é dada por:

$$|\phi\rangle = \prod_{j>0} [U_{\pi 1}^j + V_{\pi 1}^j S_{jm} C_{j-m\pi}^+ C_{jm\pi}^+] [U_{\nu 2}^j + V_{\nu 2}^j S_{jm} C_{j-m\nu}^+ C_{jm\nu}^+] |0\rangle \quad (2.3.4)$$

com

$$B_{\nu 0}^j = 0 \quad A_{\pi 0} \neq 0 \quad A_{\nu 0} \neq 0 \quad A_{\pi \nu} = 0$$

Esta função de onda (2.3.4) representa apenas núcleos par-par e não tem nenhum efeito da correlação neutron-proton para o estado fundamental. A transformação de Bogoliubov generalizada (2.2.5) toma a seguinte forma:

$$a_{jmt} = U_{t\tau}^j C_{jmt}^+ + S_{jm} V_{t\tau}^j C_{j-mt}$$

que é semelhante a transformação de Bogoliubov para nucleons idênticos, a menos do índice  $\tau$ . A partir do resultado acima podemos afirmar que a energia do estado fundamental é fornecida pelo produto de duas transformações especiais de Bogoliubov efetuada separadamente sobre prótons e nêutrons e o resultado final é:

$$E_0 = \sum_J 2\Omega_J [\epsilon_{j\pi} V_{\pi 1}^{j^2} + \epsilon_{j\nu} V_{\nu 2}^{j^2}] - 2G \sum_J \Omega_J [V_{\pi 1}^{j^4} + V_{\nu 2}^{j^4} + V_{\pi 1}^{j^4} V_{\nu 2}^{j^4}] - \quad (2.3.5)$$

$$G \sum_{JJ'} \Omega_J \Omega_{J'} [U_{\pi 1}^j V_{\pi 1}^j U_{\pi 1}^{j'} V_{\pi 1}^{j'} + U_{\nu 2}^j V_{\nu 2}^j U_{\nu 2}^{j'} V_{\nu 2}^{j'}]$$

onde  $v_{t\tau}^j$ 's e  $v_{t\tau}^{j'}$ 's são determinados a partir da equação de autovalores (2.2.28)

$$\left\{ \begin{array}{l} U_{\pi 1}^{j2} \\ V_{\pi 1}^{j2} \end{array} \right\} = \frac{1}{2} \left( 1 \pm \frac{\epsilon_{j\pi} - \lambda_{\pi}}{E_{j1}} \right) \quad \left\{ \begin{array}{l} U_{j2}^{j2} \\ V_{j2}^{j2} \end{array} \right\} = \frac{1}{2} \left( 1 \pm \frac{\epsilon_{j0} - \lambda_0}{E_{j2}} \right) \quad (2.3.6)$$

com  $E_{j1} = \sqrt{(\epsilon_{j\pi} - \lambda_{\pi})^2 + \Delta_{\pi\pi}^2}$  e  $E_{j2} = \sqrt{(\epsilon_{j0} - \lambda_0)^2 + \Delta_{j0}^2}$  que foram determinados a partir de (2.2.29). Os parâmetros  $\Delta$ 's e  $\lambda$ 's são obtidos a partir das quatro equações, acopladas agora duas a duas, deduzidas ao se substituir  $v_{t\tau}^{j'}$ s e  $u_{t\tau}^{j'}$ s de (2.3.6) em (2.3.2) e (2.2.26), ou seja:

$$\frac{2}{G} = \sum_j \frac{\Omega_j}{E_{j1}}$$

$$N_{\pi} = \sum_j \Omega_j \left( 1 - \frac{\epsilon_{j\pi} - \lambda_{\pi}}{E_{j1}} \right) \quad (2.3.7)$$

$$\frac{2}{G} = \sum_j \frac{\Omega_j}{E_{j2}}$$

$$(2.3.8)$$

$$N_0 = \sum_j \Omega_j \left( 1 - \frac{\epsilon_{j0} - \lambda_0}{E_{j2}} \right)$$

Deve-se mencionar que o termo  $\frac{G}{2} \sum V_{\pi 1}^{j2} V_{j2}^{j2}$  é originário da interação neutron-proton, contribuindo portanto ao potencial de Hartree-Fock e consequentemente à energia total. Mas a interação neutron-proton não adiciona nenhum efeito ao potencial de emparelhamento.

É interessante notar que com a função de onda (2.3.4) revisita-se a simplicidade da teoria de BCS, mas como veremos se pagará um alto preço por esta simplificação ao se tentar restaurar as simetrias quebradas desta função de onda.

## 2.4. Casos especiais

### 2.4.1. Sistema de nucleons idênticos

A maioria das discussões na literatura atual de sistemas com senioridade zero são feitas considerando-se o caso de nucleons idênticos, as equações obtidas são mais simples e portanto permitem maiores interpretações físicas. Vamos incluir nesta tese um pequeno tópico sobre esta solução por questão de completeza, pois iremos referir-se a ele em alguns capítulos posteriores.

A função de onda tentativa de BCS [Bardeen e colaboradores 1957] para o caso de partículas idênticas é dada por:

$$|\phi\rangle = \prod_{j>0} [u_j^j + v_j^j s_{jm} c_{jm\pi}^+ c_{j-m\pi}] |0\rangle \quad (2.4.1)$$

que pode ser deduzido a partir de (2.2.18) considerando que temos apenas um tipo de quasipartículas, isto é,  $\tau = 1$  e apenas um tipo de partículas  $t = \pi$ . Isto implica que as matrizes de (2.2.12) e de (2.2.22 a 2.2.25) são de um elemento.

Pode-se então obter o seguinte valor esperado da hamiltoniana de emparelhamento para o caso de nucleons idênticos, a partir de (2.2.22) e sem efetuar a somatória sobre a projeção de isospin  $t$ :

$$\langle\phi|H|\phi\rangle = \sum_j 2\Omega_j(\epsilon_j - \lambda) v_j^2 - G \sum_j \Omega_j v_j^4 - G \sum_j \Omega_j \Omega_j u_j v_j u_j v_j \quad (2.4.2)$$

onde simplificou-se a notação por conveniência

$$\begin{aligned} v_j &\equiv v_j^j = v_{m1}^j \\ u_j &\equiv u_j^j = u_{m1}^j \end{aligned} \quad (2.4.3)$$

Usando (2.2.27) pode-se calcular os coeficientes da transformação de Bogoliubov que são:

$$\begin{cases} u_j^2 \\ v_j^2 \end{cases} = \frac{1}{2} \left( 1 \pm \frac{\epsilon_j - \lambda}{E_j} \right) \quad (2.4.4)$$

onde o autovalor de (2.2.28) é  $E_j = E_{j1} = \sqrt{(\epsilon_j - \lambda)^2 + \Delta^2}$

Para obter (2.4.4) foi suposto que  $\Delta_{\omega\omega} = 0$  e  $\Delta_{\pi\pi} = 0$  pois trata-se de um caso de nucleons idênticos.

Desprezando os termos  $G \sum_j \Omega_j v_j^4$  e colocando (2.4.4) em (2.4.2) para efetuar o cálculo variacional (2.3.2a) em relação a  $\Delta \equiv \Delta_{\pi\pi}$  chega-se a conhecida equação de hiato:

$$\frac{2}{G} = \sum_j \frac{\Omega_j}{E_j} \quad (2.4.5)$$

que juntamente com a equação de número

$$\langle \phi | \hat{N} | \phi \rangle = \sum_j \Omega_j \left( 1 - \frac{\epsilon_j - \lambda}{E_j} \right) = 2N \quad (2.4.6)$$

necessária para a determinação do potencial químico  $\lambda$ , permitem de terminar todos os parâmetros necessários para o cálculo da energia do estado fundamental de BCS que é:

$$E = \sum_j 2 \Omega_j \epsilon_j v_j^2 - G \sum_j \Omega_j v_j^4 - G \sum_j \Omega_j \Omega_{j'} u_j v_j u_{j'} v_{j'} \quad (2.4.7)$$

onde recolocou-se o termo  $G \sum_j \Omega_j v_j^4$ . A rigor este termo muitas vezes conhecido como termo de auto-energia deveria ser tratado autoconsistentemente, mas para o presente objetivo isto é uma sofisticação desnecessária.

Uma das consequências importantes da teoria de emparelha-

mento de BCS é a interpretação física da equação de número (2.4.6). Pode-se considerar que cada par tem probabilidade de ocupação  $v_j^2$  para cada estado emparelhado ( $j, m$ ).

Ao se fazer uma curva de  $v_j^2$  contra cada nível de partícula independente  $\epsilon_j$  (fig. 2.1.), vê-se que respectivamente para  $\epsilon_j \ll \lambda$  e  $\epsilon_j \gg \lambda$  os valores de  $v_j^2$  serão aproximadamente um e zero. Para sistemas fermiônicos normais  $v_j^2$  cairia abruptamente no nível de Fermi  $\lambda$ . Uma das conclusões importantes da teoria de supercondutividade é que a correlação de emparelhamento torna difusa a superfície de Fermi em um intervalo de energia da ordem de  $\Delta$ , permitindo uma mistura de configurações não previsto pelo modelo de camadas.

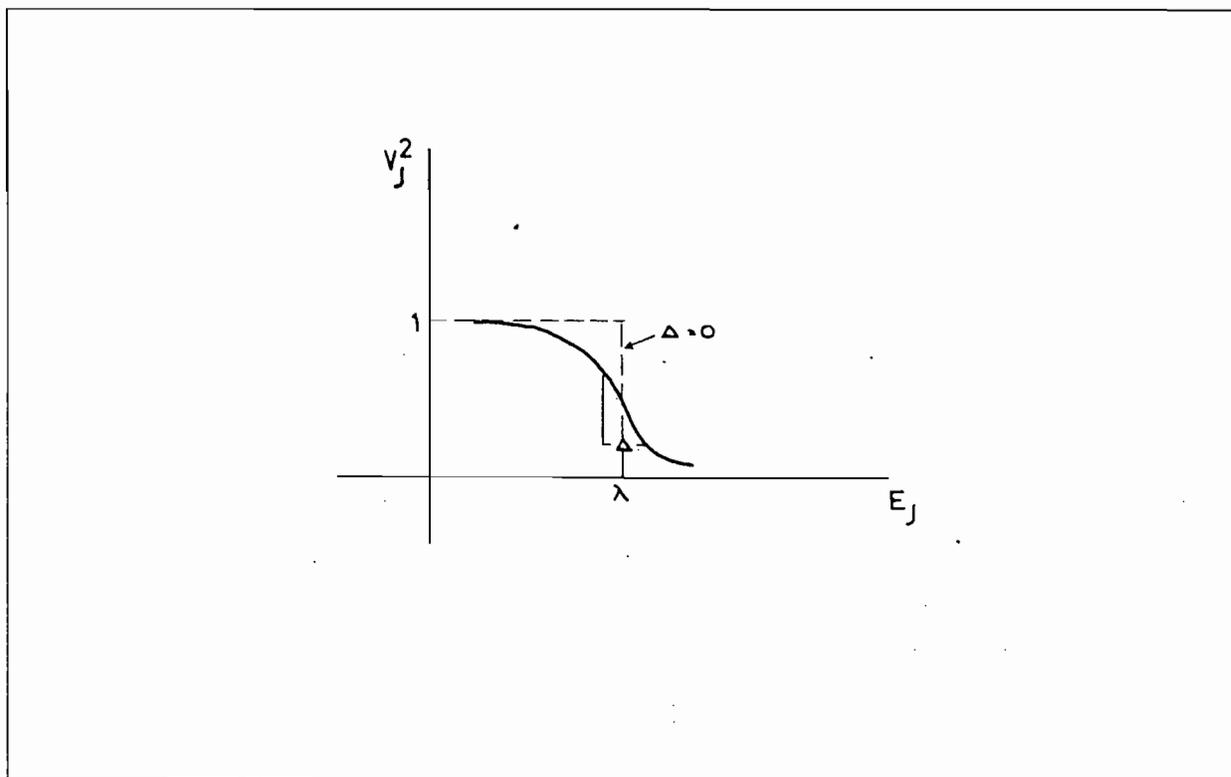


FIGURA 2.1. - Probabilidade de ocupação de um estado emparelhado

Após a discussão da equação de número, vejamos quais conclusões pode-se tomar da equação do hiato. Por questão de conveniência vamos multiplicá-la por  $\Delta$  nos dois lados assim:

$$\Delta = \frac{G}{2} \sum_{j\pi > 0} \frac{\Delta}{\sqrt{(\epsilon_j - \lambda)^2 + \Delta^2}} \quad (2.4.8)$$

Pode-se reparar que para a soma de acima a maior contribuição vem dos níveis próximos a superfície de Fermi, pois quando  $\epsilon - \lambda \approx 0$ ,  $\Delta [(\epsilon_j - \lambda)^2 + \Delta^2]^{-\frac{1}{2}} \approx 1$  e para estados distantes da superfície de Fermi temos  $\Delta [(\epsilon_j - \lambda)^2 + \Delta^2]^{-\frac{1}{2}} \ll 1$ . A conclusão que podemos tirar é que a interação de emparelhamento exerce papel importante apenas em estados próximos a superfície de Fermi.

Uma consequência importante deste fato é que os prótons e neutrons podem ser tratados separadamente nos cálculos de núcleos pesados. Para núcleos com  $(N-Z) \ll 20$ , que é o caso com  $A < 150$ . Neutrons e prótons preencherão camadas diversas nas vizinhanças da superfície de Fermi e a correlação entre neutron-próton será bem menor do que as correspondentes quantidades para neutrons e prótons em suas próprias camadas. Este efeito está ilustrado na figura 2.2.

#### 2.4.2. Núcleos auto-conjugados ( $N_\pi = N_j$ )

A discussão feita na secção anterior mostrou quão importante é a interação neutron-próton nestes núcleos, onde a terceira componente do isospin  $M_T$  é sempre igual a zero.

Como a aproximação BCS não conserva também esta quantidade, o seu valor médio é:

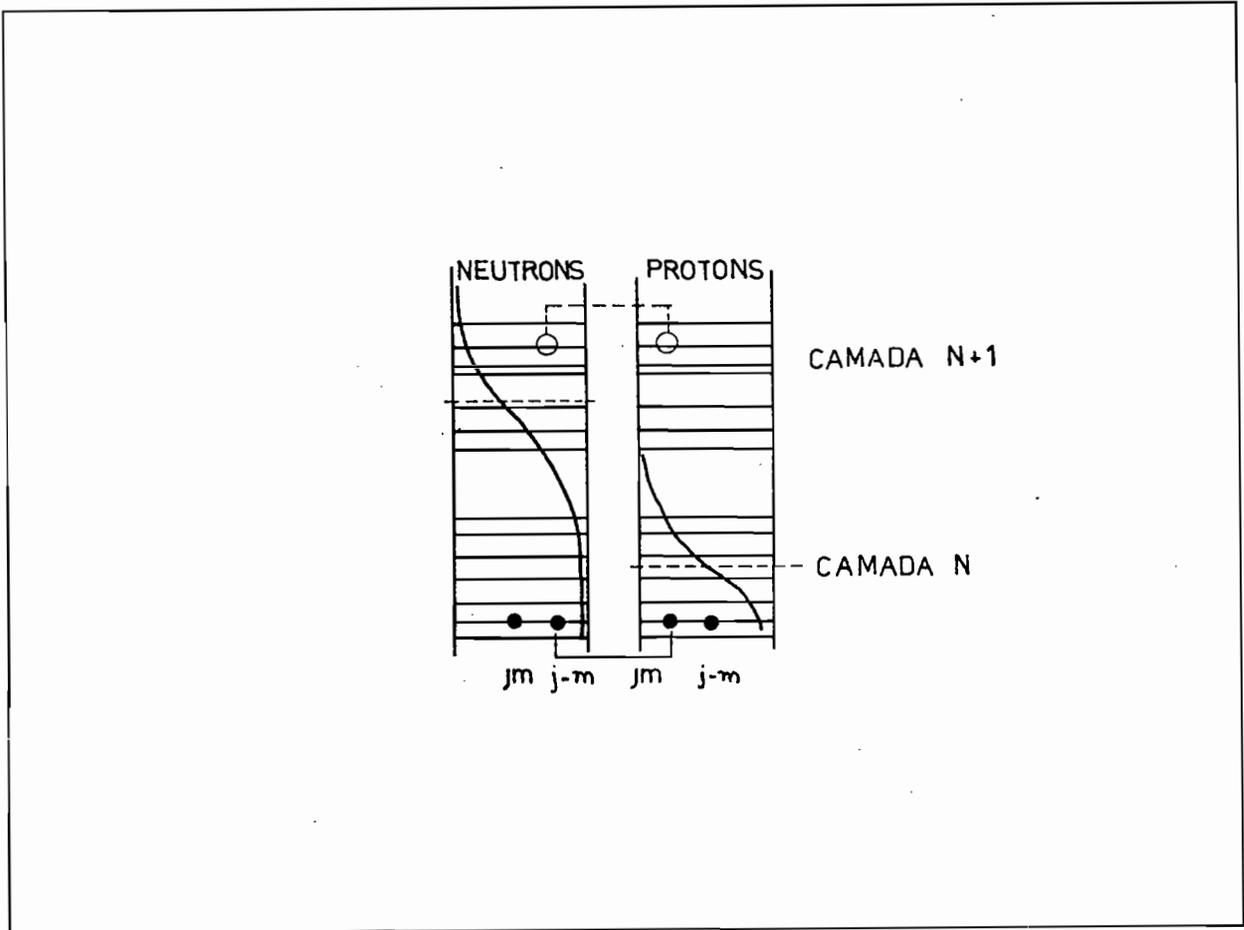


FIGURA 2.2. - Ilustração de efeitos devido a interação neu  
tron-próton em núcleos pesados

(Da Ref. Nathan-Nilsson 1965)

$$\langle \phi | \hat{T}_3 | \phi \rangle = \frac{1}{2} \sum_j \Omega_j [ (v_{j_1}^j)^2 + v_{j_2}^j ) - (v_{\pi_1}^j + v_{\pi_2}^j ) ] \quad (2.4.9)$$

que é zero no caso de núcleos auto-conjugados. Para os coeficien -  
tes  $v^j$ 's existem várias possibilidades para que isto ocorra, mas  
as fisicamente relevantes são as duas seguintes:

$$v_{j_1}^j = v_{\pi_2}^j = v_j \quad v_{j_2}^j = v_{\pi_1}^j = 0 \quad (2.4.10)$$

$$v_{02}^j = v_{\pi 1}^j = v_j \quad v_{01}^j = v_{\pi 2}^j = 0 \quad (2.4.11)$$

que serão tratadas separadamente.

Caso a)

Neste caso a partir das relações de ortogonalidade (2.2.13) e (2.2.14) tem-se

$$u_{02}^j = u_{\pi 1}^j = u_j \quad u_{01}^j = u_{\pi 2}^j = 0 \quad (2.4.12)$$

e os coeficientes  $\rho^j$ 's do estado fundamental de BCS (2.2.21) tomam os seguintes valores

$$\rho_{00}^j = -v_j^2 \quad \rho_4^j = u_j^4 \quad \rho_{\pi\pi}^j = \rho_{00}^j = 0 \quad \rho_{\pi 0}^j = u_j v_j \quad (2.4.13)$$

de tal forma que

$$|\Phi_a\rangle = \prod_{jm} [u_j + v_j s_{jm} c_{j-m\pi}^+ c_{jm0}^+] |0\rangle \quad (2.4.14)$$

Vê-se que esta função de onda toma forma bastante simples de BCS. Usando (2.4.10) e (2.2.5) por um cálculo direto tem-se a seguinte transformação

$$a_{jmt}^+ = u_j c_{jmt}^+ + v_j s_{jm} c_{j-m-t} \quad (2.4.15)$$

ou seja,  $u_{t\tau}^j = u_j \delta_{t\tau} \quad v_{t\tau}^j = v_j \delta_{-t\tau}$

Esta transformação foi proposta primeiramente por Banerjee

e Parikh (1965) e não tem sido usada na literatura pois mistura componentes de núcleos ímpar-ímpar com par-par, que acarreta um problema a mais na aproximação BCS com np.

Para determinarmos a energia do estado fundamental devemos calcular os elementos de matriz de  $\rho^j$ ,  $\chi^j$  e  $G^j$  que são:

$$\begin{aligned} \rho_{\pi\pi}^j &= \rho_{\nu\nu}^j = v_j^2 & \rho_{\pi\nu}^j &= \rho_{\nu\pi}^j = 0 \\ G_{\pi\nu}^j &= G_{\nu\pi}^j = K_{\pi\nu}^j = K_{\nu\pi}^j = u_j v_j & G_{\pi\pi}^j &= G_{\nu\nu}^j = K_{\pi\pi}^j = K_{\nu\nu}^j = 0 \end{aligned} \quad (2.4.16)$$

e o resultado para o valor esperado é:

$$\langle \phi_a | H | \phi_a \rangle = \sum_j 2\Omega_j (\epsilon_{j\pi} + \epsilon_{j\nu} - \lambda_\pi - \lambda_\nu - \frac{3}{2} G v_j^2) v_j^2 - G \sum_{jj'} \Omega_j \Omega_{j'} u_j v_j u_{j'} v_{j'} \quad (2.4.17)$$

Para efetuar o cálculo variacional é necessário determinar as formas funcionais de  $u_j$  e  $v_j$ , ao se satisfazer a condição (2.4.10), pode-se verificar que devemos ter o seguinte conjunto para os parâmetros  $\Delta$ 's,

$$\Delta_{\pi\pi} = \Delta_{\nu\nu} = 0 \quad \text{e} \quad \Delta_{\pi\nu} = \Delta \quad (2.4.18)$$

na equação de autovalores (2.2.27). Resolvendo-a com esta condição vamos encontrar que

$$\begin{cases} u_j^2 \\ v_j^2 \end{cases} = \frac{1}{2} \left( 1 \pm \frac{\epsilon_j - \lambda}{E_j} \right) \quad (2.4.19)$$

onde o autovalor é  $E_j = \sqrt{(\epsilon_j - \lambda)^2 + \Delta^2}$

O potencial químico  $\lambda = \lambda_\pi = \lambda_\rho$  é o mesmo pois o número de neutrons é igual ao de protons, sendo determinado agora pela única equação de número.

$$N_\pi = N_\rho = N = \sum_j 2\Omega_j v_j^2 \quad (2.4.20)$$

onde  $2N$  número total de núcleons.

Fazendo-se o cálculo variacional em relação a  $\Delta$  vamos obter a equação de hiato

$$\frac{2}{G} = \sum_j \frac{\Omega_j}{E_j} \quad (2.4.21)$$

Com estas duas equações temos a energia e a função de onda do estado fundamental. A energia é dada por:

$$E_0 = \sum_j 4\Omega_j \left( \epsilon_j - \frac{3}{4} G v_j^2 \right) v_j^2 - 2G \sum_{j,j'} \Omega_j \Omega_{j'} u_j v_j u_{j'} v_{j'} \quad (2.4.22)$$

onde foi feito  $\epsilon_j = \epsilon_{j\pi} = \epsilon_{j\rho}$ , pois a interação é independente da carga.

Na energia do estado fundamental acima nota-se que se em vez do termo  $\frac{3}{2} G$ , tivesse o termo  $G$  a energia total seria a soma das energias de dois sistemas independentes de neutrons e protons. Então a menos deste termo que apenas modificou a energia do campo médio tem-se uma semelhança muito grande entre o caso de nucleons idênticos e a presente secção, sendo assim uma boa parte das discussões já feitas continuam válidas.

Caso b)

Neste caso também as relações de ortogonalidade determi

nam:

$$u_{\pi 1}^j = u_{\nu 2}^j = u_j \quad u_{\pi 2}^j = u_{\nu 1}^j = 0 \quad (2.4.23)$$

sendo os coeficientes  $B$ 's, (2.2.21) da função de onda do tipo BCS para neutrons e protons são os seguintes:

$$B_4^j = v_j^4 \quad B_0^j = u_j^4 \quad B_{\pi\pi}^j = B_{\nu\nu}^j = u_j v_j \quad B_{\pi\nu}^j = 0 \quad (2.4.24)$$

de tal forma que ela fica:

$$|\phi_b\rangle = \prod_{jm>0} [u_j + v_j s_{jm} c_{j m \pi}^+ c_{j -m \pi}^+] [u_j + v_j s_{jm} c_{j m \nu}^+ c_{j -m \nu}^+] |0\rangle \quad (2.4.25)$$

Esta função de onda corresponde a um produto direto de duas funções de onda BCS com neutrons e protons respectivamente, significando que a energia do estado fundamental é dada pelo produto de duas transformações usuais de Bogoliubov do tipo:

$$a_{jm\tau}^+ = u_j c_{jm\tau}^+ + s_{jm} v_j c_{j-m\tau} \quad (2.4.26)$$

isto é, tem-se  $u_{\tau\tau}^j = u_j \delta_{\tau\tau} \quad v_{\tau\tau}^j = v_j \delta_{\tau\tau}$

Os elementos de matriz de  $\rho^j$ ,  $\chi^j$  e  $G^j$  são:

$$\begin{aligned} \rho_{\pi\pi}^j &= \rho_{\nu\nu}^j = v_j^2 & \rho_{\pi\nu}^j &= \rho_{\nu\pi}^j = 0 \\ \chi_{\pi\pi}^j &= \chi_{\nu\nu}^j = u_j v_j & \chi_{\pi\nu}^j &= \chi_{\nu\pi}^j = 0 \end{aligned} \quad (2.4.27)$$

e a expressão da energia do estado fundamental é a mesma do caso a) (2.4.22). Seguindo os mesmos procedimentos do outro caso, obtém-se que

$$\Delta_{\pi\pi} = \Delta_{\omega\omega} = \Delta \quad \text{e} \quad \Delta_{\pi\nu} = 0 \quad (2.4.28)$$

fazendo com que os valores de  $v_j$  e  $u_j$  sejam idênticos ao caso a) e também a energia  $E$ .

Existe portanto uma completa degenerescência entre as duas soluções. Entretanto a estrutura dos dois estados são completamente diferentes. Vê-se que a transformação proposta por Banerjee e Parihk (1965) conserva a componente  $T_z$  do isospin, não ocorrendo o mesmo com a solução (a).

## 2.5. Discussão das limitações da teoria de BCS

Neste capítulo foi visto um método bastante simples para o tratamento da hamiltoniana de emparelhamento, no entanto esta simplicidade trás uma série de problemas e limitações que serão discutidas a seguir.

### 2.5.1. Flutuação em número e isospin

Esta é provavelmente uma das limitações mais conhecidas da teoria de BCS, apesar de ser a maior inovação desta teoria.

A função de onda tentativa (2.4.1) para o caso de nucleons idênticos não tem o número de partículas bem definido e a função de onda tentativa (2.2.20), além do número não tem o isospin bem definido apesar da hamiltoniana ser independente da carga.

A incerteza no número de pares de partículas é dada como segue:

$$(\Delta N)^2 = \langle \hat{N}^2 \rangle - \langle \hat{N} \rangle^2 = \sum_j \Omega_j u_j^2 v_j^2 \quad (2.5.1)$$

deve ser sempre pequena, para que se possa descrever aproximadamente o núcleo de interesse. No limite de acoplamento forte, que significa todos os níveis reduzirem-se a um só, teremos

$$\left(\frac{\Delta N}{N}\right)^2 = \frac{2\Omega_j - N}{N\Omega_j} \xrightarrow{\Omega_j \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \quad (2.5.2)$$

portanto a flutuação é menor quanto maior for o número de partículas, donde se conclue que aproximação supercondutora deve ser melhor quanto maior for o número de partículas do sistema. De fato os isótopos de estanho (Sn) com cerca de 12 a 24 neutrons fora da dupla camada fechada  $N_\pi = 50$  e  $N_j = 50$  são exemplos típicos de núcleos supercondutores.

Para estudar a flutuação em isospin vamos expandir a função de onda tentativa de (2.2.20) em estados com número de partículas e isospin bem definidos como segue

$$|BCS\rangle = \sum_{NTM_T} C_{NTM_T} |NTM_T\rangle \quad (2.5.3)$$

Na tabela 2.1 os coeficientes  $C_{NTM_T}$  estão dados para o caso simples de (2.2.20) conter apenas o produto de dois termos. Mostra-se também os valores destes coeficientes para as duas soluções do núcleo auto-conjugado com  $2N = 4$  de (2.4.14) e (2.4.25), onde nota-se que a componente dominante de  $2N = 4$  contém cerca de 38%, mas então divididos em duas de  $T = 0$  e  $T = 2$  cada uma com cerca de 21% e 17% respectivamente. Como tenta-se descrever um núcleo auto-conjugado  $M_T = 0$  que significa  $T = 0$  para o estado fundamental não devemos ter um bom resultado com esta porcentagem tão baixa. Então se a aproximação BCS já apresenta-

| $N$ | $T$ | $M_T$ | $C_{NTM_T}$  | $C_{NTM_T}^a$<br>$\langle N \rangle = 2$<br>$\mathcal{E}_{\omega}^i = \mathcal{E}_{\pi}^i = 0$ | $ C_N^a ^2$ | $ C_T^a ^2$ | $ C_{M_T}^a ^2$                    | $C_{NTM_T}^b$<br>$\langle N \rangle = 2$<br>$\mathcal{E}_{\omega}^i = 0$ | $ C_N^b ^2$ | $ C_T^b ^2$ | $ C_{M_T}^b ^2$ |
|-----|-----|-------|--|--|-------------|-------------|------------------------------------|--|-------------|-------------|-----------------|
| 0   | 0   | 0     | $\mathcal{E}_0^{j^4}$  | $\frac{1}{4}$  | 6.25        | 6.25        | 6.25                               | $\frac{1}{4}$  | 6.25        | 6.25        | 6.25            |
| 1   | 1   | 1     | $\sqrt{2} \mathcal{E}_0^j \mathcal{E}_{\omega\omega}^j$  | 0  | 25.0        | 25.0        | 0.00                               | $\frac{\sqrt{2}}{4}$   | 25.00       | 25.00       | 12.50           |
|     |     | 0     | $2 \mathcal{E}_0^j \mathcal{E}_{\pi\omega}^j$  | $\frac{1}{2}$  |             |             | 25.00                              | 0.00   |             |             | 0.00            |
|     |     | -1    | $\sqrt{2} \mathcal{E}_0^j \mathcal{E}_{\omega\omega}^j$  | 0  |             |             | 0.00                               | $\frac{\sqrt{2}}{4}$   |             |             | 12.50           |
| 2   | 2   | 2     | $\mathcal{E}_{\omega\omega}^{j^2}$   | 0  | 37.50       | 16.70       | 0.00                               | $\frac{1}{4}$  | 37.50       | 16.70       | 6.25            |
|     |     | 1     | $2 \mathcal{E}_{\omega\omega}^{j^2} \mathcal{E}_{\pi\omega}^{j^2}$                               | 0  |             |             | 0.00                               | 0  |             |             | 0.00            |
|     |     | 0     | $\sqrt{6} \mathcal{E}_{\omega\omega}^{j^2} + \frac{\sqrt{2}}{3} \mathcal{E}_0^j \mathcal{E}_4^j$ | $\frac{1}{4} \left( \frac{\sqrt{18}-\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \right)$                               |             |             | 16.70                              | $-\frac{1}{4} \sqrt{\frac{2}{3}}$  |             |             | 4.20            |
|     |     | -1    | $2 \mathcal{E}_{\pi\pi}^j \mathcal{E}_{\omega\omega}^j$  | 0  |             |             | 0.00                               | 0  |             |             | 0.00            |
|     |     | -2    | $\mathcal{E}_{\pi\pi}^{j^2}$   | 0  |             |             | 0.00                               | $\frac{1}{4}$  |             |             | 6.25            |
|     | 0   | 0     | $\frac{\sqrt{10}}{3} \mathcal{E}_0^j \mathcal{E}_4^j$  | $-\frac{1}{4} \sqrt{\frac{10}{3}}$   | 20.80       | 20.80       | $-\frac{1}{4} \sqrt{\frac{10}{3}}$ | 20.80  | 20.80       |             |                 |
| 3   | 1   | 1     | $\sqrt{2} \mathcal{E}_0^j \mathcal{E}_{\omega\omega}^j$  | 0  | 25.0        | 2.50        | 0.00                               | $-\frac{\sqrt{2}}{4}$  | 25.00       | 25.00       | 12.50           |
|     |     | 0     | $2 \mathcal{E}_4^j \mathcal{E}_{\omega\omega}^j$   | $-\frac{1}{2}$   |             |             | 25.0                               | 0  |             |             | 0.00            |
|     |     | -1    | $\sqrt{2} \mathcal{E}_4^j \mathcal{E}_{\pi\pi}^j$  | 0  |             |             | 0.00                               | $-\frac{\sqrt{2}}{4}$  |             |             | 12.50           |
| 4   | 0   | 0     | $\mathcal{E}_4^{j^2}$  | $-\frac{1}{4}$   | 6.25        | 6.25        | 6.25                               | $-\frac{1}{4}$   | 6.25        | 6.25        | 6.25            |

TABELA 2.1 . São fornecidos os coeficientes  $C_{NTM_T}$  da decomposição da função de onda em estados com número de pares ( $N$ ) e isospin ( $T$ ) e projeção do isospin ( $M_T$ ) definidos, para o caso do limite de acoplamento forte  $j = 3/2$ . As diferentes colunas  $C_{NTM_T}^a$  e  $C_{NTM_T}^b$  referem-se respectivamente aos valores numéricos dos coeficientes da função de onda (2.4.14) e (2.4.25) onde o número médio de pares é  $\langle N \rangle = 2$ . Os  $|C's|^2$  são as porcentagens das componentes para  $N$  em primeiro lugar dividido a seguir nos isospins possíveis que são subdivididos nas projeções  $M_T$  para as duas funções de onda (a) (2.4.14) e (b) (2.4.25).

va limitações ao se quebrar a simetria em número, vamos ter isto aumentado ao se perder também a simetria em isospin.

### 2.5.2 Estados espúrios

Um problema decorrente da flutuação do número de partículas da aproximação BCS é o aparecimento de estados espúrios que pode ser entendido da seguinte forma:

No caso do modelo degenerado, o tratamento BCS fornece distintos  $\Omega_j$  estados de duas quasipartículas, enquanto que na solução exata existem  $(\Omega_j - 1)$  estados de senioridade dois. É fácil ver que um estado de duas quasipartículas,

$$|2qp\rangle = \sum a_{jm}^* a_{j-m} |BCS\rangle$$

o qual, apesar da existência de duas quasipartículas, é uma combinação linear de estados do estado fundamental.

No caso não degenerado, existe também o estado espúrio de duas quasipartículas com spin zero. O quadro de quasipartículas independentes fornecem  $M$  estados excitados  $0^+$ , um a mais do que o valor correto, onde  $M$  é o número de níveis do sistema. Como o estado fundamental não é auto-estado do operador número de partículas  $\hat{n} = 2N$ , o estado  $\hat{n}|BCS\rangle$  é diferente de  $|BCS\rangle$  e sua componente de duas quasipartículas é o estado espúrio, apenas estados a ele ortogonais tem significado físico em núcleos. Mas estados de duas quasipartículas, resultantes de uma diagonalização aproximada da hamiltoniana, não são usualmente ortogonais ao estado espúrio, que é misturado com alguma porcentagem em todos os estados obtidos.

### 2.5.3. Colapso da aproximação BCS

Até aqui mostramos como a aproximação supercondutora pode ser usada em núcleos que apresentam a correlação de emparelhamento.

No esquema supercondutor a correlação de emparelhamento faz com que o nível de Fermi torne-se difuso, e cada nucleon tem uma certa probabilidade  $(v_j^2)$  de ser encontrado em cada um dos diversos níveis, próximos ao nível de Fermi.

Mas em núcleos próximos a núcleos mágicos, a correlação de emparelhamento não é suficientemente forte para que o próximo nível de partícula independente possa ser atingido e neste caso não existe substancial difusividade do nível de Fermi.

Podemos tirar conclusões mais definitivas a partir da seguinte curva tomada da equação do hiato (2.4.5).

$$y = m(x) = \sum_j \frac{\Omega_j}{\sqrt{(\epsilon_j - \lambda)^2 + \Delta^2}} \quad (2.5.3)$$

que corta a reta  $y = \frac{2}{G}$  para  $x = \Delta$  (fig. 2.3)

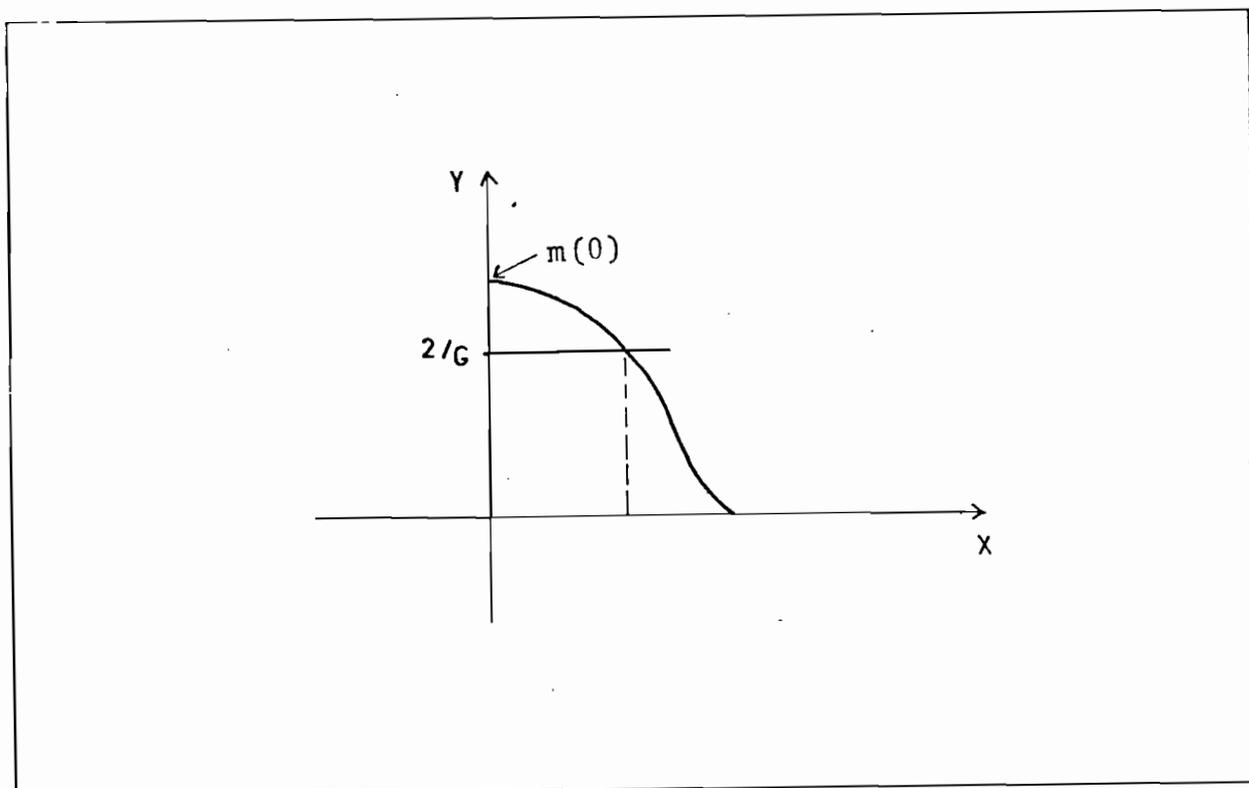


Figura 2.3 - Curva da fórmula 2.5.3

O valor de  $m(x)$  na origem é  $\sum_j \frac{\omega_j}{|\epsilon_j - \lambda|}$ , será sempre finito excetuando-se os valores de  $\lambda$  igual a  $\epsilon_j$ . Assim a solução supercondutora não existe se  $G$  for muito pequeno. O valor crítico de  $G$  depende por sua vez de  $\lambda$ , que deve ser calculado para satisfazer a condição sobre o número médio de partículas. Em geral próximo aos núcleos mágicos todos os  $|\epsilon_j - \lambda|$  são grandes e portanto  $m(x)$  é pequeno, sendo que  $G$  não é suficiente para que exista a solução supercondutora.

### 3 - Teoria de projeção em isospin e número

#### 3.1. Introdução

Até agora mostramos como é possível obter a energia e a função de onda aproximadas para um sistema de neutrons e protons, interagindo-se mutuamente através de uma força de emparelhamento independente da carga. Sabemos também que a hamiltoniana nuclear  $\hat{H}$  sempre obedece aos princípios de invariância, que em linguagem quantomecânica significa a existência de certos operadores de simetria  $\hat{S}_i$  que comutam com  $\hat{H}$ , assim;

$$[\hat{H}, \hat{S}] = 0 \quad (3.1.1)$$

Se o problema de autovalores de  $\hat{H}$  fosse resolvido exatamente, então existiria um único sistema comum de autofunções de  $\hat{H}$  e de todos os  $\hat{S}_i$ . Como a função de onda BCS não é solução exata da hamiltoniana de emparelhamento, pode significar que algumas das simetrias foram quebradas. De fato observando as funções de onda (2.2.20), (2.3.4) e (2.4.25) podemos notar que ela não apresenta autovalores dos operadores quadrado do isospin  $\hat{T}^2$ , da componente z do isospin  $\hat{T}_z$  e do número de pares  $\hat{N}$ . A única exceção é (2.4.14), que possui a projeção do isospin sempre igual a zero, fato este que será explorado mais tarde, no capítulo 5.

Estas quebras de simetria para resolver aproximadamente a hamiltoniana de muitos corpos nuclear é bastante corriqueira, por exemplo a função de onda do modelo de camadas não é invariante por translação e a quantidade de movimento  $p$  não é conservada. A função de onda de BCS e de HB não tem o número de partículas bem definido. Tanto o modelo de Nilsson como as aproximações HF e HB fornecem funções de onda que não são rotacionalmente invariante

tes, sendo o momento angular total indefinido.

Para restaurar as diversas simetrias quebradas nas apro de onda, temos na literatura, os vários métodos de projeção. A projeção em número da função de onda BCS foi elaborada há algum por Bayman (1961) e aplicada por diversos autores de tal forma que podemos considerar tradicional para os adeptos do sistema de quasipartículas. Para se reestabelecer a simetria rotacional o pioneirismo cabe a Peierls e Yoccoz (1957) que utilizaram a integral de Hill-Wheeler na projeção em estados com momento angular total bem definido. E foi aplicado extensamente para projetar estados de HF [Ripka 1968] e estados de HB [Goeke e outros 1972].

A projeção em isospin de uma função de onda tipo BCS, apesar da analo giada algebra de momento angular e de isospin, começou a ser aplicado apenas recentemente [Chen et al 1978]. Duas explicações a primeira vis ta são plausíveis. O primeiro motivo é que o esquema de quasipartículas que considera neutrons e protons é muito mais complicado do que o caso de nucleons idênticos, aplicando-se mais frequentemente métodos que não levam em conta a transformação de Bogoliubov-Valatin [Hecht 1965]. A segunda razão é que no caso de projeção em momento angular pode ser feita uma simplificação nos cálculos devido a peculiaridade das formas nucleares que aparentemente apresentam simetria axial. No trabalho de Chen, Muther e Faessler (1978) a projeção em isospin foi feita levando-se em conta os três ângulos de Euler a saber  $\alpha$ ,  $\beta$  e  $\gamma$ . É um dos objetivos desta tese pro curar a contrapartida de simetria axial no espaço de cargas de tal forma que a projeção em isospin seja tão manipulável quanto a projeção em momento angular.

Na secção 3.2. discutiremos e aplicaremos o método de projeção de Peierls-Yoccoz para restauração das simetrias em isospin e número. Nas secções 3.3 e 3.4 serão revistos respectivamente os tratamentos de projeção após e antes do cálculo variacional.

### 3.2. O método de projeção de Peierls-Yoccoz

Este método de projeção [Peierls e Yoccoz 1957] afirma que se uma função de onda  $|\phi\rangle$  dada não invariante sob certas operações de simetria, então um estado  $|\psi\rangle$  pode ser construído de acordo com

$$|\psi\rangle = \hat{P}_s |\phi\rangle \quad (3.2.1)$$

onde

$$\hat{P}_s = \int d\xi f(\xi) \hat{U}(\xi) \quad (3.2.2)$$

onde a função  $f(\xi)$  deve ser escolhida apropriadamente como veremos para o caso da projeção em isospin e número. O operador  $\hat{U}(\xi)$  unitário é responsável pela transformação unitária das funções de onda do espaço de Hilbert, isto se faz necessário pois a quebra de simetria, fixa uma orientação no espaço que estamos tratando e as quantidades canonicamente conjugadas não podem ser determinadas pelo princípio da incerteza. Exemplificando se o núcleo não possui simetria rotacional, temos uma orientação definida e o momento angular não pode ser determinado. O papel do operador  $\hat{U}(\xi)$  deve ser tal que não mais tenhamos orientações fixas no espaço que em nosso caso serão, o espaço de cargas para o Isospin e o espaço de "gauge" para o número de partículas.

Seguindo Chen et al(1978) para a projeção em isospin temos o operador:

$$\hat{P}_T = \frac{2T+1}{8\pi^2} \sum_k \int d\Omega D_{M_T k}^{T*} \hat{R}(\Omega) \quad (3.2.3)$$

como também para a projeção em número:

$$\hat{P}_N = \frac{1}{2\pi} \int d\theta \exp(-iN\theta) \hat{S}(\theta) \quad (3.2.4)$$

nestas fórmulas  $D_{m,k}^T(\Omega)$  é a função de D de Wigner. A transformação de gauge  $\hat{S}(\theta)$  é definida por:

$$\hat{S}(\theta) c_{jmt}^+ \hat{S}(\theta)^{-1} = \exp\left(\frac{1}{2}i\theta\right) c_{jmt}^+ \quad (3.2.5)$$

o operador de rotação  $\hat{R}(\Omega)$ , dependendo do três ângulos de Euler  $\alpha\beta\gamma$  e  $\hat{S}(\theta)$  são:

$$\hat{R}(\Omega) = \exp(i\alpha\hat{T}_z) \exp(i\beta\hat{T}_y) \exp(i\gamma\hat{T}_z) \quad (3.2.6)$$

$$\hat{S}(\theta) = \exp(-i\hat{N}\theta) \quad (3.2.7)$$

devemos alertar que não mudamos a notação coletiva dos ângulos de Euler  $\Omega(\alpha\beta\gamma)$  para diferenciar da semi-degenerescência de  $\Omega_j$  dada a tradição com que ambas são usadas esperando que índice  $j$  seja suficiente para não confundí-los

Como a função de onda  $|\phi\rangle$  não tem o número de partículas e o isospin bem definidos, o estado projetado é obtido como em (3.2.1) por:

$$|\Phi_{TN}\rangle = \frac{\hat{P}_T \hat{P}_N |\phi\rangle}{\langle\phi|\hat{P}_T \hat{P}_N|\phi\rangle^{1/2}} \quad (3.2.8)$$

onde  $\langle \phi | \hat{P}_T \hat{P}_M | \phi \rangle^{1/2}$  é o coeficiente de normalização.

Usando o fato que a hamiltoniana  $\hat{H}$  (2.2.1) com (2.2.3) comuta com operadores de rotação  $\hat{R}$  e  $\hat{S}$  a energia média desta hamiltoniana é obtida a partir de:

$$\langle \phi_{TN} | H | \phi_{TN} \rangle = \frac{\sum_{kk'} \int d\Omega D_{kk'}^{T*}(\Omega) \int d\theta \exp(-iN\theta) h(\Omega, \theta)}{\sum_{kk'} \int d\Omega D_{kk'}^{T*}(\Omega) \int d\theta \exp(-iN\theta) \eta(\Omega, \theta)} \quad (3.2.9)$$

Nesta expressão  $h(\Omega, \theta)$  e  $\eta(\Omega, \theta)$  são conhecidos por funções de superposição e são dados por:

$$h(\Omega, \theta) = \langle \phi | \hat{H} \hat{R}(\Omega) \hat{S}(\theta) | \phi \rangle \quad (3.2.10)$$

$$\eta(\Omega, \theta) = \langle \phi | \hat{R}(\Omega) \hat{S}(\theta) | \phi \rangle \quad (3.2.11)$$

que em geral são complexos. Os valores esperados para todos os operadores que comutam com  $\hat{R}$  e  $\hat{S}$ , isto é se forem operadores tensoriais de ordem zero podem ser obtidos de forma análoga. No entanto para operadores de transferência de um para, esta propriedade não é satisfeita complicando um pouco os cálculos. Voltaremos a mencionar este aspecto mais detalhadamente no capítulo 7

O cálculo destas funções apesar de envolverem apenas operações elementares e álgebra de operadores é bastante artificiosa. Foi desenvolvida em parte por Onishi e Yoshida (1968), sendo que Goeke e outros (1972) elaboraram um método bastante adequado, tanto para o cálculo numérico como para manipulações analíticas, que usaremos nesta tese. Por ser demasiadamente longo não repetiremos aqui

o trabalho por eles desenvolvido ficando para esta secção apenas as partes essenciais à clareza do presente trabalho.

Como  $|\phi\rangle$  não tem o número e o isospin bem definidos é necessário desorientá-lo para que seja possível a projeção, então obtém-se

$$\hat{R}(\Omega)\hat{S}(\Theta)|\phi\rangle = \left[ \prod_{\substack{j>0 \\ \xi}} u_{\xi}^j \right] \exp \left[ \frac{i}{2} \sum_{\substack{j>0 \\ \xi}} \sum_{\substack{m \\ t_1, t_2}} g(\Omega, \Theta) c_{j m t_1}^+ c_{j -m t_2}^+ \right] |0\rangle \quad (3.2.12)$$

$$\text{com } g(\Omega, \Theta) = \exp(i\Theta) R(\Omega) f R^{tr}(\Omega) \quad (3.2.13)$$

onde  $R(\Omega)$  é a representação matricial de  $\hat{R}(\Omega)$  na base de isospin  $|t t_z\rangle$ , sendo  $R^{tr}(\Omega)$  a sua transposta. A função superposição  $h(\Omega, \Theta)$  é dada indiretamente em termos das matrizes  $f$  de (2.2.19) e  $g(\Omega, \Theta)$  de (3.2.13) como:

$$\frac{h(\Omega, \Theta)}{n(\Omega, \Theta)} = \sum_{j_t} 2 \Omega_j \epsilon_{j_t} \rho_{t t}^j(\Omega, \Theta) - G \sum_{j_{t'}} \Omega_{j'} [\rho_{t t}^j(\Omega, \Theta) \rho_{t' t'}^j(\Omega, \Theta) + \rho_{t t}^j(\Omega, \Theta) \rho_{t' t'}^j(\Omega, \Theta)] - G \sum_{\substack{j_t \\ j_{t'}}} \Omega_j \Omega_{j'} [k_{t t'}^j(\Omega, \Theta) \sigma_{t' t}^j(\Omega, \Theta)] \quad (3.2.14)$$

onde podemos ver que a menos dos ângulos  $\Omega, \Theta$  é similar a (2.2.22). Da expressão acima (3.2.14) a função superposição  $n(\Omega, \Theta)$  obtida por Onishi e Yoshida (1968) é:

$$n(\Omega, \Theta) = \left\{ \prod_{j>0} [u_{\xi}^j u_{\xi}^j] \right\}^{\Omega_j} \left\{ \det [1 + f^{tr} g(\Omega, \Theta)] \right\}^{\Omega_j} \quad (3.2.15)$$

assim como as matrizes generalizadas  $\rho^j(\Omega, \Theta)$ ,  $k^j(\Omega, \Theta)$  e  $\sigma^j(\Omega, \Theta)$  que são:

$$\rho_{tt'}^j(\Omega, \theta) = \frac{\langle \phi | c_{jmt}^+ c_{j-mt'} \hat{R}(\Omega) \hat{S}(\theta) | \phi \rangle}{\langle \phi | \hat{R}(\Omega) \hat{S}(\theta) | \phi \rangle} = \left\{ f^{tr} g(\Omega, \theta) [1 + f^{tr} g(\Omega, \theta)]^{-1} \right\}_{tt'} \quad (3.2.16)$$

$$\chi_{tt'}^j(\Omega, \theta) = \frac{\langle \phi | c_{jmt} c_{j-mt'} \hat{R}(\Omega) \hat{S}(\theta) | \phi \rangle}{\langle \phi | \hat{R}(\Omega) \hat{S}(\theta) | \phi \rangle} = \left\{ g(\Omega, \theta) [1 + f^{tr} g(\Omega, \theta)]^{-1} \right\}_{tt'} \quad (3.2.17)$$

$$G_{tt'}^j(\Omega, \theta) = \frac{\langle \phi | c_{jmt}^+ c_{j-mt'}^+ \hat{R}(\Omega) \hat{S}(\theta) | \phi \rangle}{\langle \phi | \hat{R}(\Omega) \hat{S}(\theta) | \phi \rangle} = \left\{ [1 + f^{tr} g(\Omega, \theta)]^{-1} f^{tr} \right\}_{tt'} \quad (3.2.18)$$

aqui  $f^{tr}$  significa matriz transposta de  $f$

Em princípio o processo de projeção em isospin dos estados de BCS para operadores escalares está desenvolvido, as grandezas importantes são a função de superposição  $\eta(\Omega, \theta)$  a matriz densidade generalizada  $\rho(\Omega, \theta)$  e os tensores de emparelhamento generalizados  $\chi(\Omega, \theta)$  e  $G(\Omega, \theta)$ . Todos dependem das matrizes  $f$  e  $g$  das expressões (2.2.19) e (3.2.13)

No entanto esta representação é inconveniente para fins numéricos pois no caso limite de emparelhamento nulo as matrizes  $f$  e  $g$  tornam-se singulares e o método até agora escolhido não é mais utilizável. Além disso é necessário o conhecimento explícito da 1ª e 2ª transformação de Bloch-Messiah, que aumenta o trabalho numérico. Goeke, Wolter e Faessler (1972) desenvolveram um método, no qual todas as grandezas são escritas em termos da transformação de Bogoliubov generalizada  $U$  e  $V$ , da matriz de rotação  $R(\Omega)$  e da rotação  $e^{i\theta}$  no espaço de "gauge". A dedução pode ser encontrada em Goeke (1971), escrevemos aqui apenas o resultado final que é:

$$\eta(\Omega, \theta) = \prod_j \{ \det X_j(\Omega, \theta) \}^{\Omega_j} \quad (3.2.19)$$

$$P^j(\Omega, \theta) = R(\Omega) V^j e^{i\theta} X_j^{-1}(\Omega, \theta) V^{jT} \quad (3.2.20)$$

$$K^j(\Omega, \theta) = - \{ R(\Omega) V^j e^{i\theta} X_j^{-1}(\Omega, \theta) U^{jT} \}^{tr} \quad (3.2.21)$$

$$G^j(\Omega, \theta) = - R^*(\Omega) U^j X_j^{-1}(\Omega, \theta) V^{jTr} \quad (3.2.22)$$

$$X_j(\Omega, \theta) = U^{jTr} R^*(\Omega) U^j + V^{jTr} R(\Omega) V^j e^{i\theta} \quad (3.2.23)$$

As expressões acima reduzem-se as fórmulas de (2.2.23 à 2.2.26) quando tomamos  $\Omega = 0$  e  $\theta = 0$ . Quando  $\theta = 0$  temos somente projeção em isospin e  $\Omega = 0$  apenas projeção em número, casos que estudaremos a seguir:

### 3.3. A projeção após o cálculo variacional (PBCS)

Uma das formas de obter a energia é calcular os parâmetros variacionais antes da projeção, este procedimento é o mais comum na literatura porque a projeção é feita apenas uma única vez. Vamos discutir a seguir dois exemplos para ilustrar este procedimento

3.3.1. Exemplo ilustrativo: Projeção em número para o caso de nucleons idênticos

Aqui os parametros  $u_j$  e  $v_j$ , conseqüentemente  $\lambda$  e  $\Delta$  podem ser considerados livres, mas ao tratar o caso de PBCS, são aqueles obtidos na secção (2.4.1). As restrições desta secção fazem com que se tenha apenas um elemento nas matrizes  $\rho^j, \chi^j, G^j$  e  $X_j$ , ou seja:

$$\rho^j(\theta) = v_j e^{i\theta} \chi_j^{-1}(\theta) v_j \quad (3.3.1)$$

$$\chi^j(\theta) = -v_j e^{i\theta} \chi_j^{-1}(\theta) u_j \quad (3.3.2)$$

$$G^j(\theta) = -u_j \chi_j^{-1}(\theta) v_j \quad (3.3.3)$$

$$X_j(\theta) = u_j^2 + v_j^2 e^{i\theta} \quad (3.3.4)$$

Substituindo estes elementos em (3.2.14), onde para o caso de nucleons idênticos não temos a somatória sobre a projeção  $Z$  do isospin, a função superposição  $h(\Omega, \theta)$  fica simplesmente:

$$\frac{h(\theta)}{n(\theta)} = \sum_j \frac{2\Omega_j \epsilon_j v_j^2 e^{i\theta}}{(u_j^2 + v_j^2 e^{i\theta})} - G \sum_j \frac{\Omega_j v_j^4 e^{2i\theta}}{(u_j^2 + v_j^2 e^{i\theta})^2} - G \sum_{j,j'} \frac{\Omega_j \Omega_{j'} u_j v_j u_{j'} v_{j'} e^{i\theta}}{(u_j^2 + v_j^2 e^{i\theta})(u_{j'}^2 + v_{j'}^2 e^{i\theta})} \quad (3.3.5)$$

Para a função superposição  $n(\Omega, \theta)$  colocando (3.3.4) em (3.2.19) temos:

$$n(\theta) = \prod_j (u_j^2 + v_j^2 e^{i\theta})^{-2j}$$

Substituindo as funções superposição acima nas integrais em (3.2.9) e observando que  $z = e^{i\theta}$  chegamos a:

$$\langle \phi_N | H | \phi_N \rangle = \sum_j 2 \Omega_j \epsilon_j v_j^2 \frac{R_1^N(j)}{R_0^N} - G \sum_j \Omega_j v_j^4 \frac{R_2^N(j)}{R_0^N} - G \sum_{j,j'} \Omega_j \Omega_{j'} u_j v_j u_{j'} v_{j'} \frac{R_0^N(j,j')}{R_0^N} \quad (3.3.6)$$

onde a função  $R_n^N(j_1, j_2, \dots, j_n)$  é definida como:

$$R_n^N(j_1, j_2, \dots, j_n) = \frac{1}{2\pi i} \oint dz \, z^{-(N-n+1)} \prod_{j \in \{j_1, j_2, \dots, j_n\}} (u_j^2 + z v_j^2)^{R_j - n} \quad (3.3.7)$$

O maior problema reside em efetuar as integrais acima. Estudando o fenômeno de emparelhamento Kerman, Lawson e Macfarlane (1961) efetuaram a projeção numericamente. Analiticamente ela pode ser calculada usando-se uma expansão em torno do ponto de sela [Iwamoto e Onishi 1967] onde o primeiro termo é a própria aproximação BCS [Bayman 1960]. Uma comparação bem como uma discussão para um modelo simples será feita no fim da seção 3.4.

### 3.3.2. Exemplo ilustrativo: Projeção simultânea de isospin e número para emparelhamento isovetorial

Como vimos a projeção em número já implica em dificuldades, se a ela adicionarmos a projeção em isospin, onde é necessário fazer em geral mais três integrais, o trabalho complica-se bastante e só foi feito recentemente por Chen, Muther e Faessler (1978). Eles efetuaram a integral (3.2.9) numericamente depois de calcular as matrizes  $\rho^j$ ,  $\kappa^j$ ,  $\sigma^j$  e  $\chi_j$  por métodos numéricos. Neste cálculo os parâmetros variacionais  $\Delta_{\pi\pi}$ ,  $\Delta_{\nu\nu}$  com  $\Delta_{\pi\nu} = 0$  e os potenciais químicos  $\lambda_{\pi}$  e  $\lambda_{\nu}$  foram determinados conforme a seção 2.3. Como resultado eles enfatizam a necessidade da projeção em estados com isospin e número bem definidos, através de comparação com a energia da solução exata, figura 3.1, que foi obtida conforme

está relatada no apêndice (A-1).

Esta comparação é feita no modelo simétrico de dois níveis, onde ambos os níveis tem mesmo  $j$  espaçados com uma energia  $\epsilon$  e número de partículas  $2N = 4\Omega_j$  com  $N_\pi = N_j$ . Na figura 3.1 as energias exatas e de BCS (eq. 2.3.5) para o estados fundamental do sistema em questão são representadas, contra a intensidade da interação de emparelhamento  $G$ , por triângulos cheios e cruze respectivamente. Comparando então as energias vê-se que dependendo da interação o erro da aproximação BCS sem projeção varia de 30 a 25 por cento diminuindo lentamente para os maiores valores de  $G$ . Os erros estão colocados no gráfico como função da interação de emparelhamento  $G$  na figura 3.2.

Estes erros podem ser parcialmente explicados ao calcularmos o valor esperado do operador de isospin  $T^2$  para a função de onda de BCS que tem o valor de 3.36 (veja tabela 3.1) em vez de  $T = 0$ . Entretanto se compararmos na tabela 3.1 a energia de BCS e de BCS com a "exata"  $E'$ , que foi obtida substituindo-se em (A-1.1) e (A-1.3), no valor da constante de simetria  $k$  da equação do tipo dispersão o termo de  $T(T+1)$  pelo valor 3.36. Significando que estamos comparando a energia de BCS a uma "solução exata" que tem como valor médio do isospin o mesmo de BCS, mas mesmo isto implica ainda num erro de 15%. Podendo ser explicado parcialmente pela flutuação do número de partículas.

Projetando-se o número total de partículas a função de onda de BCS, a energia obtida para o caso de  $2N = 8$  está representada na figura 3.1 em círculos abertos onde o erro é da ordem de 20% (veja figura 3.2). No entanto função de onda projetada em número também origina um valor esperado para  $T^2$  diferente de 0.0 comparando o resultado da "solução exata" com o valor 3.55 médio  $T(T+1)$  o erro é reduzido a 4% (veja tabela 3.1).

O passo seguinte de Chen, Muther e Faessler foi projetar em componentes com número de prótons  $N_\pi = 4$  e número de nêutrons  $N_\nu = 4$  e os resultados estão indicados em círculos cheios na figura 3.1. Estas energias estão em melhor concordância com a solução exata do que a anterior. A razão disso pode ser entendida a partir da função de onda, que contém somente componentes com  $N_\pi = N_\nu = 4$ , sendo portanto um autoestado do operador  $\hat{T}_z$  com autovalor 0. Além disso, o valor esperado de  $\hat{T}^2$  é drasticamente reduzido (veja tabela 3.1) quando comparado ao valor da função de onda projetada em N. Se no entanto formos ver a diferença, entre as energias da função de onda projetadas destas duas maneiras com as da "solução exata" E', elas serão da mesma ordem (4%).

Esta observação mostra claramente a necessidade em se projetar a componente de isospin, como já foi mencionado na seção 2.5. As energias para a projeção em  $T = 0$  da função de onda de BCS estão representadas na figura 3.1 em triângulos abertos. Pode-se notar aqui o erro devido a flutuação no número de partículas se compararmos o erro entre a "energia exata" E', com a projetada em  $T = 0$  e a de BCS com a equivalente "energia exata".

Portanto os melhores resultados deverão ser obtidos ao se projetar simultaneamente em isospin e número que estão representados por quadrados abertos na figura 3.1. Os erros são maiores para G próximo ao ponto crítico diminuindo até 5% para o limite de acoplamento forte, indicando que próximo a  $G_{crit}$  mesmo restaurando as simetrias a aproximação PBCS não é o melhor caminho.

#### 3.4. A projeção antes do cálculo variacional - FBCS

Até este momento usando o procedimento mais comum para restaurar as simetrias quebradas em soluções aproximadas da hamiltono

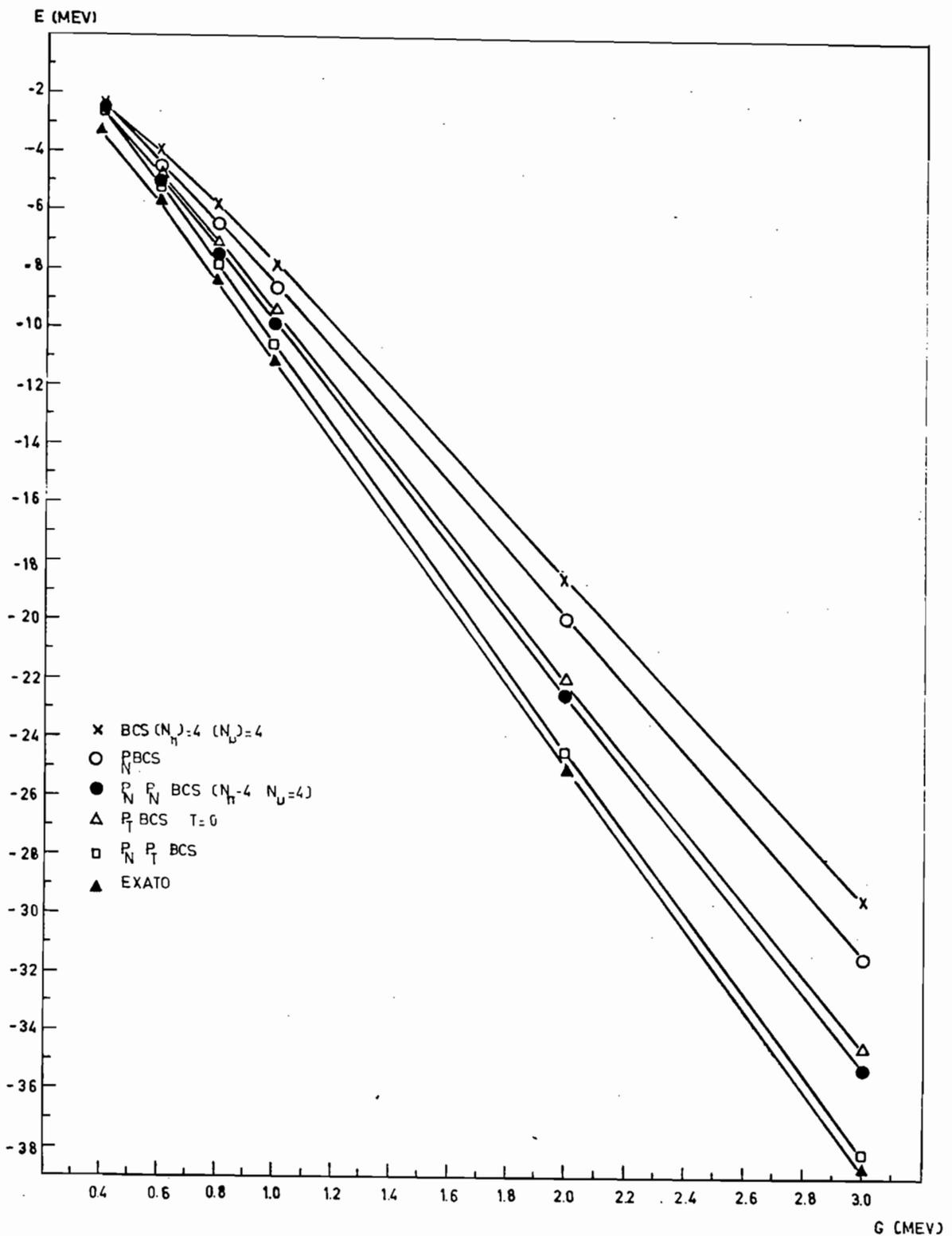


Figura 3.1 - A energia do estado fundamental é colocada como função da intensidade da interação de emparelhamento  $G$ , em um sistema com dois níveis de mesmo  $j=3/2$ , espaçamento  $\epsilon=1.0$  MeV e 8 partículas (4 protons e 4 neutrons). As cruces indicam a solução BCS com  $\Delta_{\pi\pi}=\Delta_{\nu\nu}$  e  $\Delta_{\pi\nu}=0$ . Os círculos abertos são resultado da projeção em número ( $2N=8$ ;  $P_N$ BCS). Os círculos cheios são os números da projeção em separada em protons e neutrons ( $P_N P_N$ BCS). Os triângulos abertos incluem a projeção em isospin  $T=0$  ( $P_T$ BCS). Os quadrados abertos são o resultado da projeção simultânea em isospin e número ( $P_N P_T$ BCS). Os triângulos cheios são os valores exatos obtidos a partir de técnicas de teoria de grupos (apêndice A-1).

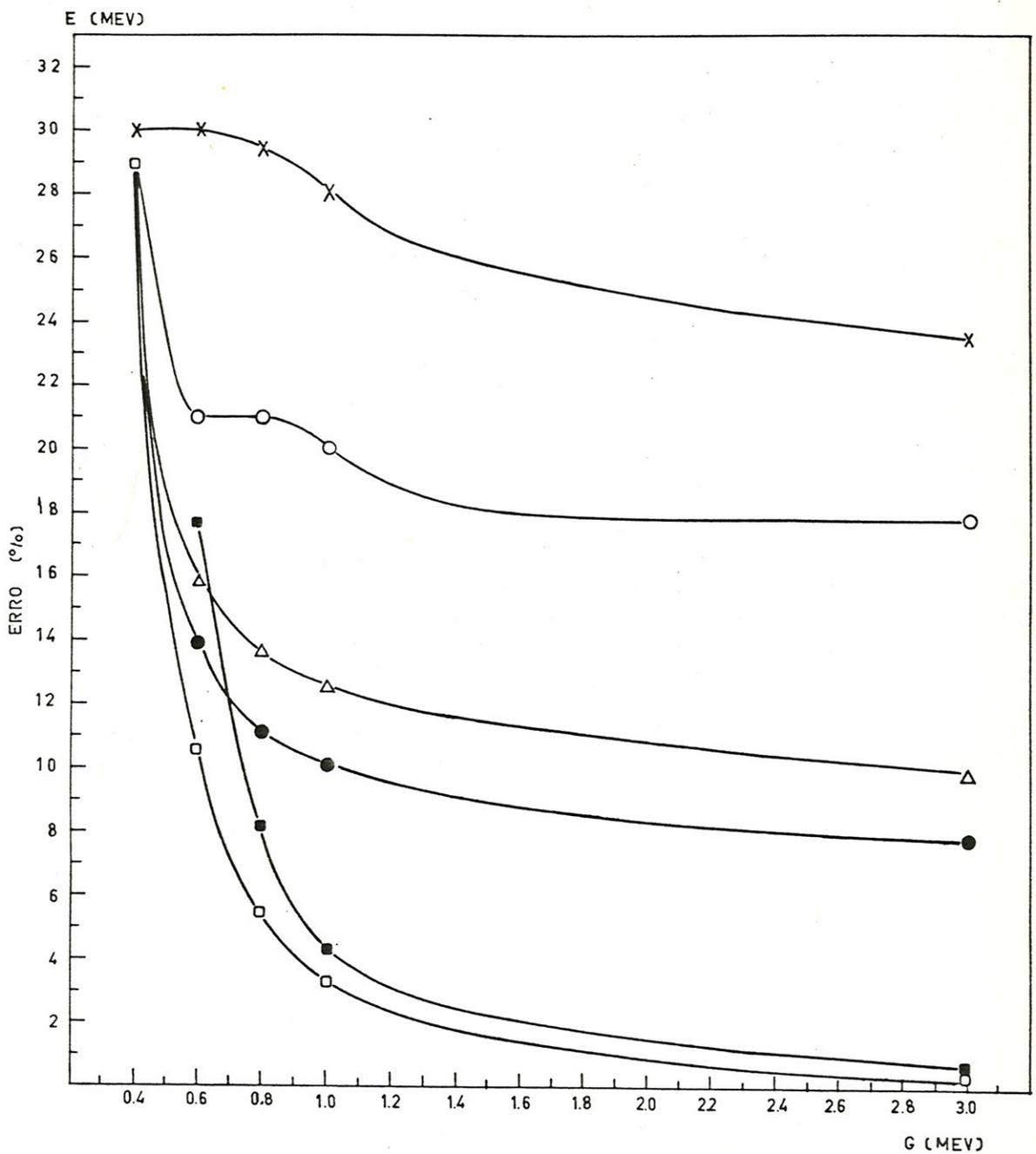


Figura 3.2 - Erro relativo ao resultado exato em porcentagem, das diferentes soluções em função da intensidade da interação de emparelhamento  $G$ .

|                             | BCS   | $P_N$ BCS | $P_{N_p N_n}$ BCS | $P_T$ BCS | $P_T P_N$ BCS |
|-----------------------------|-------|-----------|-------------------|-----------|---------------|
| $ \langle  BCS\rangle ^2$   | 1.    | 0.30      | 0.18              | 0.24      | .14           |
| $\langle \hat{T}^2 \rangle$ | 3.36  | 3.55      | 1.40              | 0.        | 0.0           |
| $\Delta \hat{N}$            | 2.59  | 0.        | 0.                | 2.75      | 0.            |
| $\Delta \hat{N}_p$          | 1.83  | 1.33      | 0.                | 1.37      | 0.            |
| E                           | -7.80 | -8.60     | -9.74             | -9.48     | -10.48        |
| E'                          | -9.06 | -8.98     | -10.11            | -10.84    | -10.84        |

Tabela 3.1 - Diversas soluções da projeção em número e isospin em modelo simétrico de dois níveis. A degenerescência de par de cada nível é  $\Omega = 2$ . A força de emparelhamento  $G$  é igual ao do espaçamento entre os níveis  $G = 1.0$ . O número de partículas é  $2N = 8$ . As colunas significam resultados para BCS ( $\Delta_{\pi_0} = 0$ ) e as diferentes projeções possíveis da função de onda de BCS. As diferentes linhas listam a superposição da solução com a função de onda de BCS, o quadrado do valor esperado do isospin total  $T^2$ , a flutuação  $\Delta N$  do número de partículas,  $\Delta N_p$  do número de prótons, energia do estado fundamental em unidades de espaçamento entre os níveis de partícula independente e a energia "exata" calculada para o isospin  $T$  definidos pela equação  $T(T+1) = \langle T^2 \rangle_{BCS}$  (Veja eq. A.1.1).

niana nuclear, ou seja restaurarmos a simetria  $S$  da função de onda aproximada usando operadores de projeção  $\hat{P}_S$ .

A restrição que se levanta a este procedimento é que a função projetada não mais satisfaz a equação variacional

$$\delta \langle \Phi | \hat{P}_S (\hat{H} - E) | \Phi \rangle \neq 0 \quad (3.4.1)$$

tornando duvidoso todo o procedimento onde se faz a projeção de pois do cálculo variacional, sugerindo-se imediatamente que deve-se efetuar a variação depois da projeção

$$\delta \langle \Phi' | \hat{P}_S (\hat{H} - E) | \Phi' \rangle = 0 \quad (3.4.2)$$

implicando que a equação variacional seja uma autofunção do operador de simetria.

Além disso, ao efetuar-se a projeção depois da variação, não se elimina os limites da solução para equação do hiato (2.4.5) e como seria de se esperar a energia não é boa próximo a  $G_{crit}$ . Então para que não tenhamos esta limitação a nova equação variacional a ser resolvida é:

$$\delta \langle \Phi_{TN} | \hat{H} | \Phi_{TN} \rangle = \delta \frac{\sum_{kk'} \int d\Omega D_{kk'}^{T*}(\Omega) \int d\theta \exp(-iN\theta) h(\Omega, \theta)}{\sum_{kk'} \int d\Omega D_{kk'}^{T*}(\Omega) \int d\theta \exp(-iN\theta) n(\Omega, \theta)} \quad (3.4.3)$$

As funções superposição  $h(\Omega, \theta)$  e  $n(\Omega, \theta)$  são nossas conhecidas. A única diferença é que as matrizes  $U$  e  $V$  obtidas através da aproximação BCS, tornam-se parâmetros livres variacionais sujeitos a condição que, a transformação de partículas a

quasipartículas seja canônica, isto é, mantenha as relações de ortogonalidade (2.2.13) e (2.2.14). O cálculo variacional após a projeção, sem isospin, foi feito por Dietrich, Mang e Pradal (1964) para o caso de nucleons idênticos, e uma comparação entre PBCS e FBCS foi feita por Mang e colaboradores (1966) no modelo simétrico de dois níveis. Especificamente estudaram o sistema de dois níveis com  $\Omega_j = 5$  e uma separação entre os níveis de  $\epsilon = 1.0$  MeV. O erro na energia do estado fundamental é representado na figura 3.3 contra a interação de emparelhamento. Pode-se observar que a discrepância é maior na região próxima a  $G_{\text{crit}}$ .

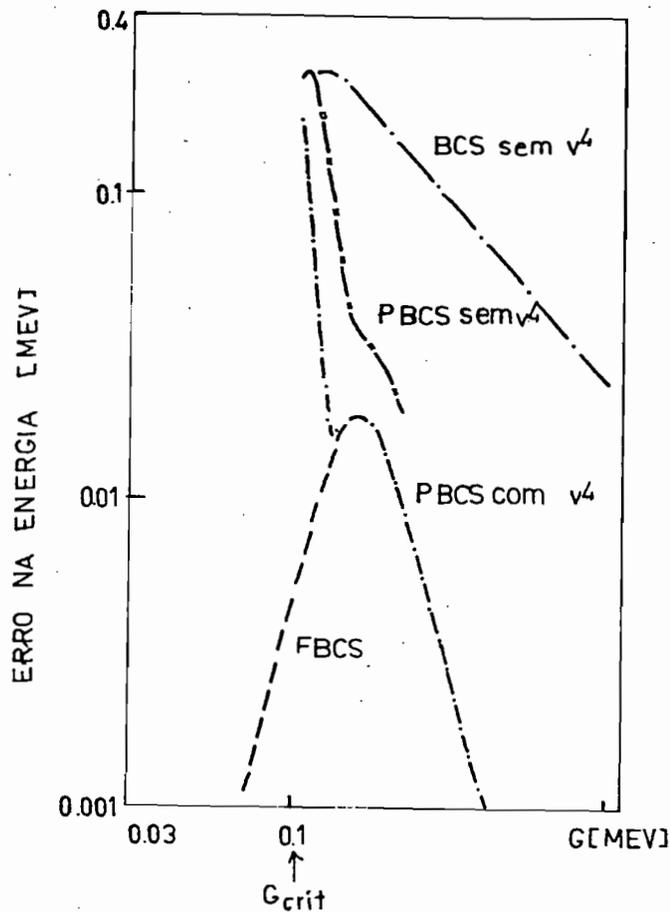


Figura 3.3 - Erro na energia do estado fundamental dos varios métodos variacionais quando comparados a energia exata. Os erros referem-se a cálculos feitos no modelo simétrico de dois níveis com  $\Omega = 5$  e  $\epsilon = 1.0$ , onde todos os nucleons são idênticos. A flecha indica o valor de  $G_{crit}$  abaixo do qual não temos mais a solução supercondutora. Figura tomada da ref. Mang e outros (1966)

#### 4. Método de Coordenadas Geradoras para emparelhamento isovetorial

##### 4.1. Introdução

Até este ponto foi considerado somente os estados de yrast de isospin com senioridade zero. Veremos a seguir como foram obtidos os estados excitados usando o método de coordenadas geradoras.

Este método foi elaborado inicialmente por Griffin-Hill e Wheeler (GHW) [Hill e Wheeler 1953 e Griffin e Wheeler 1957] para descrever os movimentos coletivos de núcleos. Servindo também como uma ponte de conexão entre as abordagens microscópicas tal como RPA e fenomenológica tal como a de Bohr-Mottelson. Na rotação o próprio projetor está fenomenologicamente ligado a rotação. GHW usaram o método variacional a partir da hamiltoniana nuclear geral, resultando numa equação integral que descreve o movimento coletivo de um sistema de muitos nucleons. A solução desta equação exige na maioria das vezes métodos numéricos, e um dos poucos casos em que pode ser resolvido é usando uma aproximação gaussiana para a função superposição.

Uma nova classe de movimento coletivo, baseado em campos que criam e aniquilam pares de partículas com  $J=0^+$  e  $T=1$ , denominado movimento coletivo de emparelhamento isovetorial, foi sugerido por Bohr (1968). Um tratamento fenomenológico deste movimento coletivo foi desenvolvido por Bés e outros (1970). Da mesma forma que existem abordagens microscópicas para os movimentos coletivos de massa nuclear, existem os análogos nos movimentos coletivos de emparelhamento, como a de Chen e Richardson (1973) para a região do Ni quel ou a de Sørensen B. (1969) que abrange uma grande série de iso

topos.

Entre estas várias abordagens o método de coordenadas geradoras deve ser adequado para tratar este novo tipo de movimento coletivo de emparelhamento, com a vantagem de manter o quadro bastante simples de Bohr "no qual o núcleo deve vibrar em torno do potencial mínimo de emparelhamento e ser ainda uma convincente abordagem microscópica e talvez servir como conexão entre os tratamentos microscópicos e macroscópicos.

Vários trabalhos nesta linha, foram feitos para sistemas com partículas idênticas [Justin, Mihailovic e Rosina 1969], [Sorensen R.A. 1972], [Faessler e colaboradores 1973]. Na descrição dos estados coletivos de emparelhamento, por GCM, são usados como função geradora, a função de onda de BCS com projeção em número e como coordenada geradora a energia de hiato.

Apesar do razoável sucesso deste tipo de cálculo foi incluído apenas um tipo de correlação de emparelhamento desprezando-se completamente as correlações entre neutron-proton. O efeito do emparelhamento neutron-proton no estado fundamental é reconhecido desde há algum tempo. O acúmulo de grande quantidade de dados em reações de transferência de dois nucleons (t,p), ( $^3\text{He}$ ,n) e ( $^3\text{He}$ ,p) e os correspondentes processos de remoção de um par do núcleo alvo na região de núcleos semi-pesados mostram a existência de uma simetria isobárica aproximada [Bés e outros, 1977]. Então para estudar os estados  $0^+$  com correlação neutron-proton, usando GCM, é necessário estender a coordenada  $\Delta$ , para três coordenadas geradoras  $\Delta_{pp}$ ,  $\Delta_{nn}$  e  $\Delta_{np}$ , que como vimos anteriormente significam respectivamente a quantidade de emparelhamento entre proton-proton, neutron-neutron e proton-neutron. É muito natural considerar a função de onda tipo BCS com os parâmetros mencionados como função gerado

ra, que deve ter as simetrias restauradas para se obter uma descrição razoável. Para isso deve-se usar o método de projeção do capítulo 3.

A seguir na secção 4.2 vamos resumidamente descrever se seguindo Chen et al (1978), a obtenção da equação de Griffin-Hill-Wheeler para o movimento coletivo de emparelhamento isovetorial e depois referir, na secção 4.3, como se conseguem as quantidades necessárias para a resolução desta equação. Na secção 4.3 descrevemos como é possível resolvê-la de forma numérica. Finalmente na secção 4.5 discutimos algumas aplicações do GCM em sistemas emparelhados.

#### 4.2. Equações de Griffin-Hill-Wheeler

Considera-se no método de coordenadas geradoras uma família de funções geradoras de muitos corpos  $|\phi(\alpha, \Delta)\rangle$  onde  $\alpha$  denota as coordenadas de partícula independente e  $\Delta$  refere-se em geral a um conjunto de parâmetros coletivos  $\Delta_1, \dots, \Delta_i$ . A partir desta função é gerada a função de onda de GCM, tomando-se uma combinação linear do tipo

$$|\Psi(\alpha)\rangle = \int d\Delta f(\Delta) |\phi(\alpha, \Delta)\rangle \quad (4.2.1)$$

onde  $f(\Delta)$ , a função peso, é uma função complexa. Para descrever as vibrações de emparelhamento de núcleos esféricos como algumas vibrações em torno de um mínimo de energia é bastante natural considerar uma função de onda do tipo BCS projetada como a função geradora  $|\phi(\alpha, \Delta)\rangle$  e o parâmetro  $\Delta$ , que mede a correlação de emparelhamento, como coordenada geradora.

Para um sistema de protons e neutrons correlacionados em

pares com  $T = 1$  é natural considerar 3 coordenadas geradoras a saber  $\Delta \{ \Delta_{nn}, \Delta_{jj}, \Delta_{nn} \}$  e como foi mencionado anteriormente, para uma boa descrição dos estados de interesse é necessário projetar em número e isospin a função geradora.

Assim o "ansatz" de GCM deve ter a seguinte forma:

$$|\Psi(x)\rangle = \int d\Delta f(\Delta) \hat{P}_T \hat{P}_N |BCS(x, \Delta)\rangle \quad (4.2.2)$$

onde  $\hat{P}_T$  e  $\hat{P}_N$  são operadores de projeção de isospin e número. Usando estes estados projetados de simetria correta, como funções geradoras de GCM, a função peso  $f(\Delta)$  em (4.2.2) é determinado para cada combinação dos números quânticos  $N$  e  $T$  pelo princípio variacional

$$\delta \frac{\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = 0 \quad (4.2.3)$$

aqui  $\hat{H}$  é a Hamiltoniana de muitos corpos do sistema. O princípio variacional leva a muito conhecida equação integral de GHW.

$$\int d\Delta^r f^{T,N}(\Delta^r) \{ H^{T,N}(\Delta^r, \Delta^s) - E I^{T,N}(\Delta^r, \Delta^s) \} = 0 \quad (4.2.4)$$

onde

$$H^{T,N} = \sum_{kk'} \int d\Omega D_{kk'}^{T*}(\Omega) \int d\theta \exp(-iN\theta) h_{rs}(\Omega, \theta) \quad (4.2.5)$$

$$I^{T,N} = \sum_{kk'} \int d\Omega D_{kk'}^{T*}(\Omega) \int d\theta \exp(-iN\theta) \eta_{rs}(\Omega, \theta) \quad (4.2.6)$$

daqui em diante  $H^{TN}(\Delta^r, \Delta^s)$  será chamado função superposição da energia e  $I^{TN}(\Delta^r, \Delta^s)$  simplesmente função superposição.

Existem poucas soluções analíticas para a equação de GHW, a mais conhecida é feita aproximando-se a função superposição por uma gaussiana. Normalmente a primeira tentativa é formular expressões analíticas para a função superposição da energia e para a função superposição.

#### 4.3. Cálculo das funções superposição $H^{TN}(\Delta^r, \Delta^s)$ e $I^{TN}(\Delta^r, \Delta^s)$

O cálculo da função superposição da energia e da função superposição é feito projetando-se simultaneamente em isospin e número da mesma forma do capítulo 3. Entretanto as fórmulas finais são ligeiramente diferentes, pois devemos levar em conta  $\Delta^r$  e  $\Delta^s$ , que implicam nos seguintes elementos não diagonais para

$$h_{rs}(\Omega, \theta) = \langle \phi_r | \hat{H} \hat{R}(\Omega) \hat{S}(\theta) | \phi_s \rangle \quad (4.3.1)$$

$$n_{rs}(\Omega, \theta) = \langle \phi_r | \hat{R}(\Omega) \hat{S}(\theta) | \phi_s \rangle \quad (4.3.2)$$

com as definições de  $\hat{R}(\Omega)$  e  $\hat{S}(\theta)$  dadas respectivamente em (3.2.6) e (3.2.7). As funções superposição acima podem ser expressas em termos da matriz densidade generalizada  $[\rho^j]_{rs}$  e dos tensores de emparelhamento  $[x^j]_{rs}$  e  $[\sigma^j]_{rs}$  que são:

$$[\rho^j]_{rs} = \frac{\langle \phi_r | C_{j m \mu}^+ C_{j m \mu} \hat{R}(\Omega) \hat{S}(\theta) | \phi_s \rangle}{\langle \phi_r | \hat{R}(\Omega) \hat{S}(\theta) | \phi_s \rangle} \quad (4.3.3)$$

$$[K_{tt'}^j]_{rs} = \frac{\langle \phi_r | C_{jmt}^+ C_{jmt'}^+ \hat{R}(\Omega) \hat{S}(\theta) | \phi_s \rangle}{\langle \phi_r | \hat{R}(\Omega) \hat{S}(\theta) | \phi_s \rangle} \quad (4.3.4)$$

$$[G_{tt'}^j]_{rs} = \frac{\langle \phi_r | C_{jmt}^+ C_{jmt'}^+ \hat{R}(\Omega) \hat{S}(\theta) | \phi_s \rangle}{\langle \phi_r | \hat{R}(\Omega) \hat{S}(\theta) | \phi_s \rangle} \quad (4.3.5)$$

Nestes termos a generalização de (3.2.14) para interação esquemática de emparelhamento é imediata e dada por:

$$\frac{h_{rs}(\Omega, \theta)}{\eta_{rs}(\Omega, \theta)} = \sum_{jt} 2 \epsilon_j \Omega_j [P_{tt'}^j]_{rs} - G \sum_{jtt'} \Omega_j \{ [P_{tt}^j]_{rs} [P_{t't'}^j]_{rs} + [P_{t't}^j]_{rs} [P_{tt}^j]_{rs} \} - G \sum_{\substack{j'j \\ t't}} \Omega_{j'} \Omega_j [K_{t't'}^j]_{rs} [G_{t't}^j]_{rs} \quad (4.3.6)$$

com

$$P_{rs}^j(\Omega, \theta) = R(\Omega) V_s^j e^{i\theta} X_{rs}^{j-1}(\Omega, \theta) V_r^{jT} \quad (4.3.7)$$

$$X_{rs}^j(\Omega, \theta) = - \{ R(\Omega) V_s^j e^{i\theta} X_{rs}^{j-1}(\Omega, \theta) U_r^{jT} \}^T \quad (4.3.8)$$

$$G_{rs}^j(\Omega, \theta) = - R^*(\Omega) U_s^j X_{rs}^{j-1}(\Omega, \theta) V_r^{jT} \quad (4.3.9)$$

$$X_{rs}^j(\Omega, \theta) = U_r^{jT} R^*(\Omega) U_s^j + V_r^{jT} R(\Omega) V_s^j e^{i\theta} \quad (4.3.10)$$

$$\eta_{rs}(\Omega, \theta) = \prod_j \{ \det X_{rs}^j(\Omega, \theta) \}^{\Omega_j} \quad (4.3.11)$$

onde  $V_r^j$ ,  $U_r^j$ ,  $V_s^j$  e  $U_s^j$  como seria de se esperar, são respectivamente as matrizes obtidas da transformação de quasipartículas generalizadas com os parâmetros de hiato  $\Delta^r$  e  $\Delta^s$ .

Colocando as expressões acima de  $h_{rs}(\Omega, \Theta)$  e  $n_{rs}(\Omega, \Theta)$  em (4.2.5), (4.2.6) e depois em (4.2.4) e resolvendo a equação de GHW, pode-se obter tanto a energia do estado fundamental como dos estados excitados para os diversos valores de T e N em um sistema de neutrons e protons.

#### 4.4. Solução numérica da equação de GHW

Para resolver numericamente a equação de GHW a substituímos por uma equação algébrica do seguinte modo como resultado de uma "discretização":

$$\sum_r [H^{T,N}(\Delta^r, \Delta^s) - E I^{T,N}(\Delta^r, \Delta^s)] f^{r,N}(\Delta^r) = 0 \quad (4.4.1)$$

que é resolvida, procurando-se em primeiro lugar uma transformação  $\square$  tal que  $\square^+ I^{T,N} \square$  fique na forma diagonal, ou seja:

$$\square^+ I^{T,N} \square = \epsilon = \begin{pmatrix} \epsilon_1 & & & 0 \\ & \dots & & \\ 0 & & & \epsilon_n \end{pmatrix} \quad (4.4.2)$$

Aplicando-se a transformação  $\square$  na versão "discretizada" da equação de GHW (4.4.1) tem-se:

$$[\square^+ H^{T,N} \square - E \epsilon] \square^+ f = 0 \quad (4.4.3)$$

ou 
$$[\epsilon^{-\frac{1}{2}} \square^+ H^{TN} \square \epsilon^{\frac{1}{2}} + E U] \epsilon^{\frac{1}{2}} \square^+ f = 0 \quad (4.4.4)$$

onde  $U$  é a matriz unitária.

Nesta última equação temos um problema bastante comum de autovalores, que pode ser facilmente resolvido. Se um dos autovalores  $\epsilon$  é zero temos estados redundantes que é eliminado retirando-se o correspondente auto-vetor, reduzindo a dimensão do problema.

#### 4.5. Aplicações do GCM para sistemas emparelhados

##### 4.5.1. Exemplo ilustrativo: GCM para o caso de nucleons idênticos

Uma aplicação do GCM é no caso de emparelhamento de nucleons idênticos, onde nas matrizes de (4.3.7) a (4.3.9), temos em cada uma delas apenas um elemento, sendo ainda simplificadas em razão de  $\Omega = 0$ . Assim:

$$P_{rs}^j(\theta) = v_j^s e^{i\theta} [X_{rs}^j]^{-1} v_j^r \quad (4.5.1)$$

$$X_{rs}^j(\theta) = -v_j^s e^{i\theta} [X_{rs}^j]^{-1} u_j^r \quad (4.5.2)$$

$$G_{rs}^j(\theta) = -u_j^s [X_{rs}^j]^{-1} v_j^r \quad (4.5.3)$$

$$X_{rs}^j(\theta) = [u_j^r u_j^s + v_j^r v_j^s e^{i\theta}] \quad (4.5.4)$$

o que tornam as funções superposição  $h_{rs}(\Omega, \theta)$  de (4.3.6) e  $n_{rs}(\Omega, \theta)$  (4.3.11) da seguinte forma:

$$h_{rs}(\theta) = n_{rs}(\theta) \left\{ \sum_{j,m>0} \frac{(2\xi_j - G) v_j^r v_j^s}{(u_j^r u_j^s + v_j^r v_j^s e^{i\theta})} e^{i\theta} - G \sum_{\substack{j,m>0 \\ j',m'>0 \\ m \neq m'}} \frac{u_j^s v_j^r u_{j'}^r v_{j'}^s e^{i\theta}}{(u_j^r u_j^s + v_j^r v_j^s e^{i\theta})(u_{j'}^r u_{j'}^s + v_{j'}^r v_{j'}^s e^{i\theta})} \right\} \quad (4.5.5)$$

$$n_{rs}(\theta) = \prod_{j,m>0} (u_j^r u_j^s + v_j^r v_j^s e^{i\theta}) \quad (4.5.6)$$

Para determinar  $H_{rs}^N(\Delta^r, \Delta^s)$  e  $I_{rs}^N(\Delta^r, \Delta^s)$  deve-se inserir as funções superposição acima em (4.2.5) e (4.2.6) respectivamente e efetuar as integrais no ângulo de "gauge". A integral pode ser aproximada por uma somatória [Sorensen R.A. 1972], que após algumas manipulações algébricas tornam-se:

$$I_{rs}^N(\Delta^r, \Delta^s) = \sum_{\xi=0}^{n-1} l_{\xi} P(\xi) \quad (4.5.7)$$

$$H_{rs}^N(\Delta^r, \Delta^s) = \sum_{\xi=0}^{n-1} l_{\xi} \left\{ \sum_{j,m>0} (2\xi_j - G) v_j^r v_j^s P_j(2) - G \sum_{\substack{j,m>0 \\ j',m'>0 \\ m \neq m'}} u_j^s v_j^r u_{j'}^r v_{j'}^s P_{j,j'}(2) \right\} \quad (4.5.8)$$

com

$$l_{\xi} = \begin{cases} n & \text{se } \xi = 0 \\ 2(n - \xi) & \text{se } \xi \neq 0 \end{cases} \quad (4.5.9)$$

e

$$P(k) = \prod_{j \neq 0} \left[ (u_j^r u_j^s)^2 + (v_j^r v_j^s)^2 + 2u_j^r u_j^s v_j^r v_j^s \cos\left(\frac{\xi}{n} 2\pi\right) \right]^{\frac{1}{2}} \times \cos \left[ \sum \arctan \left( \frac{\sin\left(\frac{\xi}{n} 2\pi\right)}{\frac{u_j^r u_j^s}{v_j^r v_j^s} + \cos\left(\frac{\xi}{n} 2\pi\right)} \right) - (2N - k) \frac{\xi}{n} \pi \right] \quad (4.5.10)$$

Os  $P_j(P_{jj},)$  são definidos por expressões análogas a  $P$ , com exceção aos termos com  $j$  ou  $(e)$ ,  $j'$  que não foram diferenciados dos correspondentes produtos e somas.

Nestas expressões  $n$  é o número de pontos da aproximação numérica da integral de projeção. Tomando-se dois pontos ( $n=2$ ) são eliminadas as componentes com número de partículas  $2N \pm 2$ ,  $2N \pm 6$ ,  $2N \pm 10$  ... da função de onda de BCS. Quatro pontos eliminam  $2N \pm 2$ ,  $2N \pm 4$ ,  $2N \pm 6$ ,  $2N \pm 10$ ,  $2N \pm 12$ , ... Estudando extensivamente este tipo de projeção Faessler e outros (1973) concluíram que praticamente reproduziam-se os resultados exatos com 8 pontos.

Para resolver a equação integral de GHW numericamente Faessler e outros (1973) concluíram também que a escolha mais adequada é a de 3 pontos geradores.

#### 4.5.2. Exemplos ilustrativos: GCM para o caso de emparelhamento $T = 1$

O último ponto que pretendemos tocar nesta extensa revisão dos métodos de tratar o fenômeno de emparelhamento em núcleos, é a aplicação do GCM para o caso de emparelhamento  $T = 1$ . Para este caso as funções superposição (4.3.1) e (4.3.2) devem ser calculadas numericamente para cada conjunto de coordenadas gerado

ras  $\Delta_{nn}^r, \Delta_{nn}^s, \Delta_{jj}^r, \Delta_{jj}^s$  e  $\Delta_{nj}^r, \Delta_{nj}^s$  e depois efetuar a integral nos três ângulos de Euler e no de "gauge" e obtêm-se  $H^{TN}(\Delta^r, \Delta^s)$  e  $I^{TN}(\Delta^r, \Delta^s)$  que deve ser diagonalizada conforme (4.4.1) para fornecer as energias dos estados fundamental e excitado e as respectivas funções de onda.

Chen e outros (1978) usaram este procedimento para obter as energias, no modelo simétrico de dois níveis conforme tabela 4.1 e em modelos semi-realísticos na camada fp. tabela 4.2 e foram comparados aos resultados exatos. Pode-se ver que a abordagem feita coroou-se de relativo sucesso, mas que vai apresentar limitações que serão discutidos no capítulo seguinte, onde aproveitaremos a ocasião para uma nova abordagem ao problema.

Tabela 4.1

| T | GCM    | EXATO  |
|---|--------|--------|
| 0 | -10.75 | -10.84 |
|   | - 7.00 | - 6.62 |
|   | - 2.81 | - 2.58 |
| 2 | - 7.52 | - 7.65 |
|   | - 2.95 | - 3.81 |

Tabela 4.1 - Energias calculadas pelo método de coordenadas geradoras e pela solução exata (Veja apêndice A-1) em um modelo simétrico de dois níveis  $j = 3/2$ , com 8 nucleons. As energias são dadas em unidades do espaçamento entre os níveis. Aqui o valor de  $G = 1.0$ .

Tabela 4.2

|   | A = 48 |        | A = 52 |       | A = 56 |       |
|---|--------|--------|--------|-------|--------|-------|
|   | GCM    | EXATO  | GCM    | EXATO | GCM    | EXATO |
| 0 | -10.15 | -10.16 | -8.72  | -8.77 | -7.09  | -7.10 |
|   | - 0.12 | - 0.27 | -0.53  | -0.94 | -0.09  | -0.42 |
| 2 | - 8.16 | - 8.36 | -6.62  | -7.04 |        | -0.69 |

Tabela 4.2 - Resultados do cálculo de GCM para o modelo e quatro níveis com neutrons e protons correspondentes a camada  $fp$  ( $f_{7/2}, p_{3/2}, f_{5/2}, p_{1/2}$ ) são comparados com os valores exatos obtidos a partir de técnicas de teoria de grupos (Veja apêndice A-1). A intensidade da força de emparelhamento é  $G = 24/A$ . Os níveis de partícula independente são para  $A = 48$  (-0.12, 4.55, 5.45, 5.49), para  $A = 52$  (0.06, 4.26, 4.96, 5.34) e  $A = 56$  (0.00, 4.25, 5.03, 5.36).

## 5. Expressões analíticas para a projeção simultânea em isospin e número de funções de onda tipo BCS

### 5.1. Introdução

Neste capítulo apresentamos o objeto principal desta tese, ou seja, formulamos um método poderoso para tratar os movimentos coletivos de emparelhamento  $T = 1$ , que são evidenciados pelas reações de transferência de dois nucleons, com momento angular e paridade  $0^+$  altamente populadas.

Recentemente desenvolveu-se dois métodos [Chen e outros 1978] aproximação BCS projetada e método de coordenadas geradoras, que conservam o número de nucleons e o isospin, para tratar estes estados  $0^+$ . A dificuldade básica encontrada nestes métodos, é o sofisticado e dispendioso cálculo computacional necessário para restaurar as simetrias perdidas na função de onda geradora tipo BCS. Para eliminar as flutuações em isospin e número efetua-se uma integral de projeção em 4 dimensões, 3 em relação aos ângulos de Euler do espaço de isospin e 1 ao ângulo de "gauge" do espaço abstrato de mesmo nome. Conseqüentemente, os cálculos são em geral mais complicados do que a projeção em momento angular nos núcleos deformados, onde se considera apenas um dos ângulos de Euler ao se fazer a tradicional simplificação de simetria axial.

No presente trabalho buscamos a equivalente simetria axial no caso de isospin, a fim de simplificar os problemas numéricos e computacionais. Podemos dizer que foi proveitoso o esforço desenvolvido nesta direção, pois reconhecemos a existência de uma classe de funções de onda tipo BCS que apresenta simetria axial no espaço de isospin, que não só simplifica o problema, mas coloca-nos em um caminho para atacar a projeção de BCS analiticamente. Conse

quentemente economizamos muito tempo e dinheiro para efetuar a projeção. Inclusive para alguns casos conseguimos obter formas simples para energias de tal modo que algumas das características físicas começam a ficar transparentes.

Além disso, a nossa bem sucedida abordagem analítica facilita a obtenção do fator espectroscópico que é uma quantidade física importante para análise de reações de transferência de um par. Em relação a este ponto os empecilhos ao tratamento numérico foram tais que, não puderam ser superados até o momento [ H.Müther - comunicação particular ]

Com o método desenvolvido pudemos também projetar em  $N$  e  $T$  bem definidos a partir de componentes não dominantes da função de onda de tipo BCS, que foi impossível pelo procedimento numérico em razão das dificuldades técnicas. Portanto, estamos aptos para restaurar em uma só vez, estados de diferentes simetrias do ensemble de funções de onda.

O atual método é, sem aumentar a dificuldade, bem mais abrangente do que a complicada versão anterior, para tratar os diferentes casos, desde isospin mais baixos até os muito altos, de poucas a muitas partículas e permite também considerar as diferentes intensidades da força de emparelhamento  $G$ . Ainda mais, estamos em condições atacar o difícil problema que envolve mais de uma camada, ou seja obter os estados de Yrast de espalhamento das regiões do  ${}_{58}\text{Ce}^{140}$  ou  ${}_{40}\text{Zr}^{90}$  onde praticamente não é possível fazer cálculos do tipo modelo de camadas.

Por último apesar de não ser o fim, a facilidade da projeção torna perfeitamente possível uma cuidadosa investigação dos estados coletivos  $0^+$ , partindo de técnicas variacionais conhecidas como FBSC [Dietrich e outros 1964] com isospin, que não seria viável se para cada valor do parametro variacional necessitássemos de

muito tempo de processamento.

Antes de chegar ao ponto mais importante da tese, ou seja, dar ao conhecimento os pormenores do método. Lembrando que, embora nosso trabalho tenha se iniciado com a busca da simetria axial na função de onda em questão, algumas páginas são dedicadas a um problema mais geral, que com certeza é de interesse acadêmico e envolve o caso de simetria axial como um caso particular. Depois de esbarrarmos nesta questão mais geral concentraremos-nos ao caso de simetria axial, desenvolvendo-o de forma completa para aplicá-lo de maneiras diferentes.

Vamos a partir deste momento apresentar uma detalhada descrição do nosso trabalho, para isto consideremos um sistema de protons e neutrons em vários estados de partícula independente sujeitos a uma interação residual de emparelhamento  $G$ , que quanticamente é representado pela seguinte hamiltoniana:

$$H = \sum \epsilon_j c_{jmt}^+ c_{jmt} - G \sum_{\mu=0\pm 1} \sum_{JJ'} A_{j\mu}^+ A_{j\mu} \quad (5.1.1)$$

onde  $c_{jmt}^+$  ( $c_{jmt}$ ) são operadores de criação (aniquilação) de nucleons num estado de partícula independente com número quântico espacial e de spin  $jm$  e projeção de isospin  $t = \frac{1}{2}$  ( $-\frac{1}{2}$ ) ou  $t = \pi$  ( $0$ ) para protons (neutrons). A energia deste estado de partícula independente é simbolizada por  $\epsilon_j$  e não depende de  $t$  por ser o nosso sistema independente da carga. Finalmente  $A_{j\mu}^+$  ( $A_{j\mu}$ ) são operadores de criação (aniquilação) de pares de nucleons em um estado espacial  $j$  com  $J = 0$ ,  $T = 1$  e  $T_z = \mu$  ou seja:

$$A_{j\mu}^+ = \sqrt{\frac{1}{2} \Omega_j} \sum_{tm} \left( \frac{1}{2} t \pm \frac{1}{2} t' \mid \Delta \mu \right) (jm \ j-m \mid 00) c_{jmt}^+ c_{j-mt'}^+ \quad (5.1.2)$$

$$A_{j\mu} = \sqrt{\frac{1}{2}\Omega_j} \sum_{t\mu'} \left(\frac{1}{2}t \frac{1}{2}t' | 1\mu\right) (j\mu j-\mu | 00) C_{j-\mu t'} C_{j\mu t} \quad (5.1.3)$$

sendo  $\Omega_j = -j + \frac{1}{2}$  a semi-degenerescência de cada nível.

Para resolver a equação de Schrödinger, iniciemos com a seguinte função de onda tipo BCS que encontramos em (2.2.20)

$$|\phi\rangle = \prod_{j\mu>0} \left[ \mathcal{B}_4^j C_{j-\mu\pi}^+ C_{j\mu\pi}^+ C_{j-\mu\nu}^+ C_{j\mu\nu}^+ + \mathcal{B}_{\pi\pi}^j S_{j\mu} C_{j-\mu\pi}^+ C_{j\mu\pi}^+ + \right. \\ \left. \mathcal{B}_{\nu\nu}^j S_{j\mu} C_{j-\mu\nu}^+ C_{j\mu\nu}^+ + \mathcal{B}_{\pi\nu}^j S_{j\mu} (C_{j-\mu\pi}^+ C_{j\mu\nu}^+ + C_{j-\mu\nu}^+ C_{j\mu\pi}^+) + \mathcal{B}_0^j \right] |0\rangle \quad (5.1.4)$$

para calcular os coeficiente  $\mathcal{B}^j$ 's, vamos supor que esta função de onda é o estado do vácuo,  $a_{j\mu t} |\phi\rangle = 0$  das quasipartículas, onde  $a_{j\mu t}$  é o operador de aniquilação das quasipartículas definido como

$$a_{j\mu t} = \sum_t (C_{j\mu t} u_{t\tau}^j + S_{j\mu} C_{j-\mu t}^+ v_{t\tau}^j) \quad (5.1.5)$$

e podemos exprimir os coeficiente  $\mathcal{B}^j$ 's em termos de  $u_{t\tau}^j$ 's e  $v_{t\tau}^j$ ' como:

$$\begin{aligned} \mathcal{B}_4^j &= v_{\pi 1}^j v_{\nu 2}^j - v_{\nu 1}^j v_{\pi 2}^j \\ \mathcal{B}_0^j &= u_{\pi 1}^j u_{\nu 2}^j - u_{\nu 1}^j u_{\pi 2}^j \\ \mathcal{B}_{\nu\nu}^j &= u_{\pi 1}^j v_{\nu 2}^j - u_{\pi 2}^j v_{\nu 1}^j \\ \mathcal{B}_{\pi\pi}^j &= u_{\nu 2}^j v_{\pi 1}^j - u_{\nu 1}^j v_{\pi 2}^j \\ \mathcal{B}_{\pi\nu}^j &= u_{\pi 1}^j v_{\pi 2}^j - u_{\pi 2}^j v_{\pi 1}^j \end{aligned} \quad (5.1.6)$$

Como mostramos anteriormente (cap. 2), esta função de onda  $|\phi\rangle$  não conserva o número de nucleons  $2N$  e o isospin  $T$ . Para restaurar estas simetria perdidas vamos efetuar a projeção

$$|\phi_{NT}\rangle = \frac{\hat{P}_T \hat{P}_N |\phi\rangle}{[\langle\phi | \hat{P}_T \hat{P}_N | \phi\rangle]^{1/2}} \quad (5.1.7)$$

onde  $\hat{P}_T$  no contexto da técnica de projeção de Peierls-Yoccoz é o operador de projeção de isospin escrito como:

$$\hat{P}_T = \frac{2T+1}{8\pi^2} \sum_K \int d\Omega D_{M_K}^{T*}(\Omega) \hat{R}(\Omega) \quad (5.1.8)$$

sendo que  $\hat{R}(\Omega)$  é o operador de rotação dependendo nos três ângulos de Euler  $\Omega = (\alpha \beta \gamma)$  e  $D_{M_T K}^{T*}(\Omega)$  é a função D de Wigner e  $\hat{P}_N$  é o operador de projeção do número de partículas dado como:

$$\hat{P}_N = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta \exp(-iN\theta) \hat{S}(\theta) \quad (5.1.9)$$

sendo a transformação de Gauge definido como:

$$\hat{S}(\theta) = \exp(i\hat{N}\theta) \quad (5.1.10)$$

com  $\hat{N}$  o operador do número de pares de partículas.

Para calcular o valor médio de  $\hat{H}$  com esta função de onda projetada, seguimos o método desenvolvido por Chen, Muther e Faessler [Chen e outros 1978] que foi revisto em detalhes no capítulo 3 e reproduzido a seguir:

$$\langle \phi^{NT} | \hat{H} | \phi^{NT} \rangle = \frac{\langle \phi | \hat{H} \hat{P}_T \hat{P}_N | \phi \rangle}{\langle \phi | \hat{P}_T \hat{P}_N | \phi \rangle} = \frac{\sum_{KK'} \int d\Omega D_{KK'}^{T*}(\Omega) \int d\theta \exp(-iN\theta) h(\Omega, \theta)}{\sum_{KK'} \int d\Omega D_{KK'}^{T*}(\Omega) \int d\theta \exp(-iN\theta) n(\Omega, \theta)} \quad (5.1.11)$$

onde  $h(\Omega, \theta)$  e  $n(\Omega, \theta)$  são conhecidos com funções de superposição, que reescrevemos abaixo por questão de conveniência

$$\frac{h(\Omega, \theta)}{n(\Omega, \theta)} = \sum_{j \neq t} 2\Omega_j \epsilon_j \rho_{tt}^j - G \sum_{j \neq t'} \Omega_j [\rho_{tt}^j \rho_{t't'}^j + \rho_{t't}^j \rho_{t't'}^j] - G \sum_{j \neq t'} \Omega_j \Omega_{j'} [\chi_{tt}^j, G_{t't}^j] \quad (5.1.12)$$

e

$$n(\Omega, \theta) = \prod_j [\det X_j]^{\Omega_j} \quad (5.1.13)$$

onde  $\rho^j$ ,  $\chi^j$ ,  $G^j$  e  $X_j$  são as matrizes relevantes, expressas em termos dos coeficientes  $u_{tt}^j$ 's e  $v_{tt}^j$ 's e dos quatro ângulos  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  e  $\theta$ :

$$\rho^j = R(\Omega) V^j e^{i\theta} [X^j]^{-1} V^{j \dagger r} \quad (5.1.14)$$

$$\chi^j = - \left\{ R(\Omega) V^j e^{i\theta} [X^j]^{-1} U^{j \dagger r} \right\}^{\dagger r} \quad (5.1.15)$$

$$G^j = -R^*(\Omega) U^j [X^j]^{-1} V^{j \dagger r} \quad (5.1.16)$$

$$X_j = U^{j \dagger r} R^*(\Omega) U^j + v^{j \dagger r} R(\Omega) V^j e^{i\theta} \quad (5.1.17)$$

com as matrizes  $U^j$  e  $V^j$  da transformação de Bogoliubov generalizada dadas por

$$U^j = \begin{pmatrix} u_{\pi 1}^j & u_{\pi 2}^j \\ u_{\sigma 1}^j & u_{\sigma 2}^j \end{pmatrix} \quad V^j = \begin{pmatrix} v_{\pi 1}^j & v_{\pi 2}^j \\ v_{\sigma 1}^j & v_{\sigma 2}^j \end{pmatrix} \quad (5.1.18)$$

e a matriz  $R(\Omega)$  de rotação para spin 1/2 definida segundo a convenção dada por Edmonds (1957) é:

$$R(\Omega) = \begin{pmatrix} \exp \left[ \frac{i}{2}(\alpha + \gamma) \right] \cos \frac{\beta}{2} & \exp \left[ \frac{i}{2}(\alpha - \gamma) \right] \sin \frac{\beta}{2} \\ -\exp \left[ -\frac{i}{2}(\alpha - \gamma) \right] \sin \frac{\beta}{2} & \exp \left[ -\frac{i}{2}(\alpha + \gamma) \right] \cos \frac{\beta}{2} \end{pmatrix} \quad (5.1.19)$$

Essas três matrizes  $U^j$ ,  $V^j$  e  $R(\Omega)$  possibilitam a determinação dos elementos das matrizes  $X_j$ ,  $\rho^j$ ,  $\chi^j$  e  $G^j$ .

Estamos pois numa situação em que é possível divergir dos métodos tradicionais. Chen e outros (1978) calcularam (5.1.11) usando métodos numéricos, depois de obterem os valores dos elementos das matrizes (5.1.14) a (5.1.17) no computador. Entretanto nesta tese vamos efetuar (5.1.11) analiticamente, calculando de maneira explícita os elementos das matrizes mencionadas. Um trabalho tedioso e árduo, mas compensador, pois é possível daqui em diante analisar em detalhes suas propriedades para um posterior tratamento analítico de (5.1.11).

Para consecução desta linha de trabalho na secção 5.2 mostramos como as funções superposição  $h(\Omega, \Theta)$  e  $n(\Omega, \Theta)$  podem ser expressas em termos das matrizes relevantes do nosso problema, que serão usadas na secção 5.3, ao se efetuar analiticamente a integral multidimensional, nos três ângulos de Euler do espaço de Isospin e no ângulo de "gauge" do espaço abstrato de mesmo nome, que no entanto é simplificado na secção 5.4 a partir da identificação da simetria axial em uma determinada classe de funções de onda tipo BCS. Este reconhecimento da simetria axial facilita o problema de tal forma que obtemos expressões simples para a energia em modelos com vários níveis de partícula independente.

5.2. A obtenção das funções superposição  $h(\Omega, \Theta)$  e  $n(\Omega, \Theta)$  e um indício para solução geral.

Para calcular os elementos das matrizes em (5.1.14) a (5.1.17) lembremos que eles são essencialmente superposições, entre estados de BCS rodados nos espaços de "gauge" e isospin, indicando assim que os diversos termos devem envolver  $e^{\pm i\alpha}$ ,  $e^{\pm i\gamma}$   $\cos \frac{\beta}{2}$ .

$\text{sen} \frac{\beta}{2}$  e  $e^{i\theta}$  e os coeficientes  $b_0^j$ ,  $b_4^j$ ,  $b_{\pi}^j$ ,  $b_{\pi\pi}^j$  e  $b_{\pi\pi}^j$  da função de onda tipo BCS (5.1.4). Depois de algum trabalho e com o uso das relações de ortogonalidade (2.2.13) e (2.2.14) chegamos as seguintes expressões dos elementos das matrizes de  $\rho^j$ ,  $\chi^j$  e  $\sigma^j$  :

$$\begin{aligned}
 \rho_{tt'}^j = \frac{e^{i\theta}}{\det x_j} \left\{ b_{\bar{t}\bar{t}'}^j b_{\bar{t}\bar{t}'}^j \cos \beta + [b_4^j e^{i\theta}] \delta_{\bar{t}\bar{t}'} + b_{\bar{t}\bar{t}'}^j e^{2i\bar{t}\alpha} [b_{\bar{t}\bar{t}'}^j e^{2i\bar{t}\alpha} \cos^2 \frac{\beta}{2} + b_{\bar{t}\bar{t}\bar{t}}^j e^{2i\bar{t}\alpha} \text{sen}^2 \frac{\beta}{2}] \right. \\
 \left. + 2t b_{\bar{t}\bar{t}}^j b_{\bar{t}\bar{t}'}^j e^{2i\bar{t}\alpha} \text{sen} \beta + t b_{\bar{t}\bar{t}'}^j [b_{\bar{t}\bar{t}\bar{t}}^j e^{2i\bar{t}\alpha} - b_{\bar{t}\bar{t}}^j e^{2i\bar{t}\alpha}] \text{sen} \beta \right\}
 \end{aligned}
 \tag{5.2.1}$$

$$\begin{aligned}
 \chi_{\bar{t}\bar{t}'}^j = \frac{e^{i\theta}}{\det x_j} \left\{ 4t\bar{t}' b_4^j b_{\bar{t}\bar{t}\bar{t}}^j + b_0^j b_{\bar{t}\bar{t}'}^j \cos \beta \delta_{\bar{t}\bar{t}'} + b_0^j e^{2i\bar{t}\alpha} [b_{\bar{t}\bar{t}\bar{t}}^j e^{2i\bar{t}\alpha} \cos^2 \frac{\beta}{2} + b_{\bar{t}\bar{t}\bar{t}}^j e^{2i\bar{t}\alpha} \text{sen}^2 \frac{\beta}{2}] \delta_{\bar{t}\bar{t}'} \right. \\
 \left. - t b_0^j [b_{\bar{t}\bar{t}\bar{t}}^j e^{2i\bar{t}\alpha} - b_{\bar{t}\bar{t}\bar{t}}^j e^{2i\bar{t}\alpha}] \text{sen} \beta \delta_{\bar{t}\bar{t}'} + 2t b_0^j b_{\bar{t}\bar{t}\bar{t}}^j e^{2i\bar{t}\alpha} \text{sen} \beta \delta_{\bar{t}\bar{t}'} \right\}
 \end{aligned}
 \tag{5.2.2}$$

$$\begin{aligned}
 \sigma_{\bar{t}\bar{t}'}^j = \frac{1}{\det x_j} \left\{ b_0^j b_{\bar{t}\bar{t}'}^j - b_0^j b_{\bar{t}\bar{t}\bar{t}}^j e^{i\theta} \cos \beta \delta_{\bar{t}\bar{t}'} + b_4^j e^{i\theta} e^{2i\bar{t}\alpha} [b_{\bar{t}\bar{t}\bar{t}}^j e^{2i\bar{t}\alpha} \cos^2 \frac{\beta}{2} + b_{\bar{t}\bar{t}\bar{t}}^j e^{2i\bar{t}\alpha} \text{sen}^2 \frac{\beta}{2}] \delta_{\bar{t}\bar{t}'} \right. \\
 \left. + t b_0^j e^{i\theta} [b_{\bar{t}\bar{t}\bar{t}}^j e^{2i\bar{t}\alpha} - b_{\bar{t}\bar{t}\bar{t}}^j e^{2i\bar{t}\alpha}] \text{sen} \beta \delta_{\bar{t}\bar{t}'} + 2t b_4^j b_{\bar{t}\bar{t}\bar{t}}^j e^{i\theta} e^{2i\bar{t}\alpha} \text{sen} \beta \delta_{\bar{t}\bar{t}'} \right\}
 \end{aligned}
 \tag{5.2.3}$$

aqui  $t = \frac{1}{2}$  para  $\pi$  ou protons

$t = -\frac{1}{2}$  para  $\bar{0}$  ou neutron

e o símbolo  $\bar{t}$  tem os seguintes significados:  $\bar{\pi} = \bar{0}$  e  $\bar{0} = \pi$  .

Com o auxílio das relações de ortogonalidade (2.2.13) e (2.2.14) podemos verificar que estes elementos das matrizes são re

duzidas à (2.2.23), (2.2.24) e (2.2.25) para ângulos de Euler e "gauge" nulos.

O determinante da matriz  $X_j$  denotado por  $\det X_j$  em (5.2.1) à (5.2.3) é dado como segue:

$$\begin{aligned} \det X_j = & 2 \beta_{\pi 0}^j e^{i\theta} \cos \beta + \beta_4^{j^2} e^{2i\theta} + \beta_0^{j^2} + \beta_{\pi 0}^j [\beta_{\pi\pi}^j e^{i\alpha} - \beta_{\nu\nu}^j e^{-i\alpha}] e^{i\theta} \sin \beta \\ & - \beta_{\pi 0}^j [\beta_{\pi\pi}^j e^{i\alpha} - \beta_{\nu\nu}^j e^{-i\alpha}] e^{i\theta} \sin \beta + [\beta_{\pi\pi}^{j^2} e^{i(\alpha+\gamma)} + \beta_{\nu\nu}^{j^2} e^{-i(\alpha+\gamma)}] e^{i\theta} \cos^2 \beta_2 \\ & - \beta_{\pi\pi}^j \beta_{\nu\nu}^j [e^{i(\alpha-\gamma)} + e^{-i(\alpha-\gamma)}] e^{i\theta} \sin^2 \beta_2 \end{aligned} \quad (5.2.4)$$

Com (5.2.1) à (5.2.4), podemos exprimir as funções superposição  $n(\Omega, \theta)$  e  $h(\Omega, \theta)$  em termos dos coeficientes  $u_{tc}^j$ 's e  $v_{tc}^j$ 's para qualquer ângulos de Euler e "gauge".

Vamos em primeiro lugar aplicar estas expressões para calcular a norma da função de onda de tipo BCS projetada, necessária na obtenção do valor médio da hamiltoniana de emparelhamento (5.1.11).

Devido a independência de carga da nossa hamiltoniana, possuímos a liberdade de tomar o núcleo autoconjugado como o representante dos outros núcleos com o mesmo número de partículas. Para este núcleo  $M_T = 0$  podemos ter mais uma simplificação nas expressões (5.2.1) à (5.2.4) colocando  $\beta_{\pi\pi}^j = \beta_{\nu\nu}^j$  (5.1.4), a expressão do  $\det X_j$  em (5.2.4) pode ser reescrito da seguinte forma

$$\det X_j = \beta_0^{j^2} + \beta_4 e^{2i\theta} + 2 e^{i\theta} [\beta_{\pi\pi}^{j^2} \Theta(\Omega) + \beta_{\pi\nu}^{j^2} \Theta(\Omega) + i \beta_{\pi\pi}^j \beta_{\pi\nu}^j \Theta(\Omega)] \quad (5.2.5)$$

onde  $\Theta^{\pi\pi}(\Omega)$ ,  $\Theta^{\nu\nu}(\Omega)$  e  $\Theta^{\pi\nu}(\Omega)$  são funções dependentes dos ângulos de Euler e dadas como:

$$\Theta^{\pi\pi}(\Omega) = \cos(\alpha + \gamma) \cos^2 \frac{\beta}{2} + \cos(\alpha - \gamma) \sin^2 \frac{\beta}{2} \quad (5.2.6)$$

$$\Theta^{\pi\nu}(\Omega) = \cos \beta \quad (5.2.7)$$

$$\Theta^{\pi\pi'}(\Omega) = (\sin \alpha - \sin \gamma) \sin \beta \quad (5.2.8)$$

Como  $n(\Omega, \theta) = \prod_j [\det X_j]^{-\alpha_j}$  (5.1.13), a função superposição  $n(\Omega, \theta)$  pode ser colocada formalmente depois de uma expansão multinomial da seguinte forma:

$$n(\Omega, \theta) = \sum_{\xi_1 \xi_2 \xi_3 \xi_4} \sum_{\xi_1 \xi_2 \xi_3 \xi_4} [e^{i\theta}]^{\xi_1} [\Theta^{\pi\pi}(\Omega)]^{\xi_2} [\Theta^{\pi\nu}(\Omega)]^{\xi_3} [\Theta^{\pi\pi'}(\Omega)]^{\xi_4} \quad (5.2.9)$$

onde  $\sum_{\xi_1 \xi_2 \xi_3 \xi_4}$  são coeficientes da expansão.

Substituindo (5.2.9) na expressão da norma da função de onda projetada (5.1.11) temos:

$$\langle \phi | \hat{P}_T \hat{P}_N | \phi \rangle = \frac{2T+L}{46\pi^3} \sum_{kk'} \sum_{\xi_1 \xi_2 \xi_3 \xi_4} \int d\Omega D_{kk'}^{T*}(\Omega) (\Theta^{\pi\pi})^{\xi_2} (\Theta^{\pi\nu})^{\xi_3} (\Theta^{\pi\pi'})^{\xi_4} \int d\theta \exp[i(\xi_1 - N)\theta] \quad (5.2.10)$$

ou, depois de efetuar a integral no ângulo de "gauge".

$$\langle \phi | \hat{P}_T \hat{P}_N | \phi \rangle = \frac{2T+L}{8\pi^2} \sum_{kk'} \sum_{\xi_2 \xi_3 \xi_4} \sum_{N \xi_2 \xi_3 \xi_4} I_{kk'}^T(\xi_2 \xi_3 \xi_4) \quad (5.2.12)$$

onde

$$I_{kk'}^T(\xi_2 \xi_3 \xi_4) = \int d\Omega D_{kk'}^{T*}(\Omega) (\Theta^{\pi\pi})^{\xi_2} (\Theta^{\pi\nu})^{\xi_3} (\Theta^{\pi\pi'})^{\xi_4} \quad (5.2.12)$$

Em geral é bastante trabalhoso obter expressões explícitas para os coeficientes  $\sum_{\xi_1, \xi_2, \xi_3, \xi_4}$  e depois efetuar as integrais. Entretanto tudo será simplificado se considerarmos casos simples, tais como  $B_{no}^j = 0$  ou  $B_{jj}^j = B_{np}^j = 0$ . Como veremos, para estes casos as integrais ficarão reduzidas a funções bastante simples, ou seja, funções Gama.

De maneira semelhante podemos tratar o elemento de matriz diagonal  $\langle \phi | \hat{H} \hat{P}_T \hat{P}_N | \phi \rangle$  em (5.1.11), pois a expressão de  $\sum_{\tau} \rho_{\tau\tau}^j$ ,  $\sum_{\tau\tau'} [\rho_{\tau\tau}^j \rho_{\tau'\tau'}^j + \rho_{\tau\tau'}^j \rho_{\tau'\tau}^j]$  e  $\sum_{\tau\tau'} k_{\tau\tau'}^j G_{\tau\tau'}^j$  da função superposição  $h(\Omega, \Theta)$  podem ser colocadas de forma similar a (5.2.9). Isto ocorre pelo menos para os casos citados acima, os quais examinaremos cuidadosamente no decorrer desta tese. Portanto, com o artifício descrito acima, em princípio resolvemos analiticamente o problema mais geral.

Neste trabalho limitamo-nos aos casos simples que acabamos de mencionar, pois são os de maior interesse físico. Assim na próxima secção cuidaremos do primeiro caso  $B_{no}^j = 0$  com algum detalhe.

### 5.3. Cálculo da energia BCS projetada para os estados de Yrast de isospin $0^+$ .

Na secção anterior elaboramos os instrumentos necessários para obter  $h(\Omega, \Theta)$  e  $n(\Omega, \Theta)$  no caso mais geral, que eventualmente podem ser inseridos em (5.1.11) e integrados, resultando, por exemplo, na energia de um sistema de prótons e neutrons, se os parâmetros  $u_{\tau\tau}^j$ 's e  $v_{\tau\tau}^j$ 's fossem previamente determinados.

No tratamento mais geral do emparelhamento isovetorial com aproximação de quasipartículas reconheceu-se [Ginocchio e Weneser 1968], que no estado fundamental  $0^+$  do núcleo par-par o parâmetro

metro de hiato  $\Delta_{\pi 0}$ , ou o seu equivalente  $\mathcal{E}_{\pi 0}$  é sempre zero. Se projetarmos o número de nucleons  $2N$  e o isospin  $T$  deste estado, que representa o vácuo das quasipartículas e é um produto separado de duas funções de onda BCS de neutrons e protons ( 2.3.4 ), conseguimos os estados Yrast de Isospin,  $0^+$ .

Para calcular a energia desta classe especial de estados, podemos por conveniência tomar o núcleo autoconjugado como representante dos núcleos de mesmo número de massa, então temos neste caso como vimos no capítulo 2 os seguintes coeficientes

$$\mathcal{E}_{\pi\pi}^j = \mathcal{E}_{\nu\nu}^j = \mu_j \nu_j \quad \mathcal{E}_0^j = \mu_j^2 \quad \mathcal{E}_4^j = \nu_j^2 \quad (5.3.1)$$

que faz com que o  $\det X_j$  seja simplesmente:

$$\det X_j = u_j^4 + v_j^4 e^{2i\theta} + 2u_j^2 v_j^2 e^{i\theta} \Theta^{\pi}(\Omega) \quad (5.3.2)$$

Como  $n(\Omega, \theta) = \prod_j [\det X_j]^{\Omega_j}$  podemos expandi-la a partir de repetidas aplicações do binômio de Newton em polinômios de  $\Theta^{\pi}(\Omega)$  e  $e^{i\theta}$ , ou seja:

$$n(\Omega, \theta) = \prod_{j=1}^{1M} \left\{ \sum_{\substack{\ell_j = k_j \\ k_j = \Omega_j \\ \ell_j = 0}}^{\ell_j = k_j} F_j \exp [i(2k_j - \ell_j)\theta] [\Theta^{\pi}(\Omega)]^{\ell_j} \right\} \quad (5.3.3)$$

onde  $F_j = \binom{\Omega_j}{k_j} \binom{k_j}{\ell_j} (u_j^4)^{\Omega_j - k_j} (v_j^4)^{k_j - \ell_j} (2u_j^2 v_j^2)^{\ell_j}$ . Devemos advertir em relação aos símbolos  $\Omega$  e  $\Omega_j$ , significando respectivamente, notação coletiva dos ângulos de Euler e semidegenerescência do nível  $j$ , que não foram mudados devido a tradição com que são usadas, imaginando que o índice  $j$  seja suficiente para diferenciá-los.

Usando alguma manipulação algébrica, o cálculo da norma (5.2.10) neste caso de  $|\phi\rangle = |\text{BCS}\rangle$  ficará reduzido à

$$\langle BCS | \hat{P}_T \hat{P}_N | BCS \rangle = \frac{2T+1}{16\pi^3} \sum \sum [\prod F_j] \int d\Omega D_{kk'}^{T*}(\Omega) [\Theta^{\pi\sigma}(\Omega)]^{\sum \ell_j} \int d\theta \exp[i(2\sum k_j - \sum \ell_j - N)\theta] \quad (5.3.4)$$

ou, depois de efetuar a integral imediata no ângulo de "gauge"

$$\langle BCS | \hat{P}_T \hat{P}_N | BCS \rangle = \frac{2T+1}{8\pi^2} \sum \sum_{\substack{k_1, k_2, \dots, k_M \\ \ell_1 + \ell_2 + \dots + \ell_M = 2k - N}} [\prod F_j] I_{kk'}^{T(2k-N)} \quad (5.3.5)$$

onde  $k = \sum_j k_j$

e 
$$I_{kk'}^{T(2k-N)} = \int d\Omega D_{kk'}^{T*}(\Omega) [\Theta^{\pi\sigma}(\Omega)]^{2k-N} \quad (5.3.6)$$

Para calcular esta integral vamos aplicar o binômio de Newton em  $[\Theta^{\pi\sigma}(\Omega)]^{2k-N}$  assim:

$$[\Theta^{\pi\sigma}(\alpha\beta\gamma)]^{2k-N} = \sum_{\substack{q=0 \\ p=2k-N-m \\ m=2k-N}}^{q=m} \binom{2k-N}{m} \binom{2k-N-m}{p} \binom{m}{q} \left[\frac{1}{2} \cos^2 \frac{\beta}{2}\right]^{2k-N-m} \left[\frac{1}{2} \sin^2 \frac{\beta}{2}\right]^m \\ [e^{i\alpha}]^{2(k-p-q)-N} [e^{i\gamma}]^{2(k-m-p+q)-N} \quad (5.3.7)$$

Substituindo (5.3.7) em (5.3.6) o cálculo da norma (5.3.5) ficará reduzido a obtenção de várias integrais do tipo:

$$\mathcal{I}_{kk'}^{T(n_1, n_2, n_3, n_4)} = \int_0^\pi d\beta \sin\beta d_{kk'}^T(\beta) \left(\frac{1}{2} \cos^2 \frac{\beta}{2}\right)^{n_1} \left(\frac{1}{2} \sin^2 \frac{\beta}{2}\right)^{n_2} \times \\ \int_0^{2\pi} d\alpha e^{-i(k'-n_3)\alpha} \int_0^{2\pi} d\gamma e^{-i(k-n_4)\gamma} \quad (5.3.8)$$

onde  $n_1 = 2k - N - m$  ,  $n_2 = m$  ,  $n_3 = 2(k - p - q) - N$  ,  $n_4 = 2(k - m - p + q) - N$  e  $d_{kk'}^T(\beta)$  é a matriz de rotação dada em Edmonds [Edmonds 1957] como segue:

$$d_{kk'}^T(\beta) = \left[ \frac{(T+k')!(T-k)!}{(T+k)!(T-k')!} \right]^{\frac{1}{2}} (\cos \frac{\beta}{2})^{\frac{k'+k}{2}} (\sin^2 \frac{\beta}{2})^{\frac{k'-k}{2}} P_{T-k'}^{k'-k, k'+k} \quad (5.3.9)$$

com

$$P_{T-k'}^{k'-k, k'+k}(\cos \beta) = \sum_{\mu=0}^{T-k} \binom{T-k}{\mu} \binom{T+k}{T-k-\mu} (-1)^{T-k-\mu} (\sin^2 \frac{\beta}{2})^{T-k'-\mu} (\cos^2 \frac{\beta}{2})^{\mu} \quad (5.3.10)$$

que é o polinômio ortogonal de Jacobi, em que  $k'-k > 0$  e  $k'+k > 0$  quando  $k'-k < 0$  e  $k'+k < 0$  devemos usar as propriedades de simetria  $d_{kk'}^T(\beta)$  ou seja:

$$d_{kk'}^T(\beta) = (-1)^{k'-k} d_{k'k}^T(\beta) \quad (5.3.11)$$

$$d_{kk'}^T(\beta) = (-1)^{k'-k} d_{-k'-k}^T(\beta) \quad (5.3.12)$$

Agora (5.3.8) pode ser mais uma vez simplificada, observando que as integrais nos ângulos  $\alpha$  ,  $\gamma$  resultam em funções delta de Kronecker.

A integral em  $\beta$  parece ser um pouco mais complicada, mas não irá causar nenhum problema se notarmos que fazendo a seguinte mudança de variável  $x = \sin^2 \frac{\beta}{2}$  , a integral torna-se a própria definição de função beta, ou seja.

$$\int_T^{(n_1, n_2, k, k')} = \left[ \frac{(T+k')!(T-k)!}{(T+k)!(T-k')!} \right]^{\frac{1}{2}} \sum_{\mu} \binom{T-k}{\mu} \binom{T+k}{T-k-\mu} \left(\frac{1}{2}\right)^{n_1+n_2} (-1)^{T-k'-\mu} B\left(n_1 + \mu + 1 + \frac{k+k'}{2}, n_2 - \mu - T + 1 - \frac{k+k'}{2}\right) \quad (5.3.13)$$

que será colocado em tempos de função gama, bem mais familiar ao leitor:

$$\int_{k'k}^T (n_1 n_2 k k') = \left[ \frac{(T+k')!(T-k)!}{(T+k)!(T-k')!} \right]^{1/2} \sum \binom{T-k}{\mu} \binom{T+k}{T-k-\mu} \left(\frac{-1}{2}\right)^{n_1+n_2} (-)^{T-k-\mu} x$$

$$\frac{\Gamma(n_1 + \mu + 1 + \frac{k+k'}{2}) \Gamma(n_2 - \mu - T + 1 - \frac{k+k'}{2})}{\Gamma(n_1 + n_2 - T + 2)} \quad (5.3.14)$$

sendo obrigatoriamente:

$$2n_1 + k' + k + 2\mu + 2 > 0 \quad e \quad 2n_2 - k' - k - 2T - 2\mu + 2 > 0 \quad (5.3.15)$$

para este caso as condições acima sempre são satisfeitas, pois o integrando é sempre um produto de dois polinômios.

Usando (5.3.14), (5.3.6) e (5.3.5) finalmente chegamos a seguinte expressão para a norma da função de onda de BCS projetada:

$$\langle \text{BCS} | \hat{P}_T \hat{P}_N | \text{BCS} \rangle = \frac{2T+1}{8\pi^2} (-)^T (2)^N \sum \frac{\prod [F_j]}{(4)^k \Gamma(2k-N-T+2)} x$$

$k_{j_1}, k_{j_2}, \dots, k_{j_m}$   
 $l_{j_1}, l_{j_2}, \dots, l_{j_m}$   
 $(\sum l_j = 2k-N)$

$$\sum_{kk'} (-)^{k'} \sqrt{\frac{(T+k')!(T-k)!}{(T+k)!(T-k')!}} \sum_{\substack{m=2k-N \\ \mu=T-k' \\ m=0 \\ \mu=0}} (-)^{\mu} \binom{2k-N}{m} \binom{2k-N-m}{-k'-k+m} \binom{m}{-k'+k-m} x$$

$$\binom{T-k}{\mu} \binom{T+k}{2k+\mu} \Gamma(2k-N + \mu - m + \frac{k+k'}{2} + 1) \Gamma(-T - \mu + m - \frac{k+k'}{2} + 1)$$

(5.3.16)

Com o cálculo da norma já efetuado devemos obter uma expressão de  $\langle \text{BCS} | \widehat{H} \widehat{P}_T \widehat{P}_N | \text{BCS} \rangle$  usando o mesmo procedimento para alcançar  $\langle \text{BCS} | \widehat{P}_T \widehat{P}_N | \text{BCS} \rangle$ , precisamos então que  $h(\Omega, \Theta)$  esteja em forma polinômio em  $e^{i\Theta}$  e  $\binom{\pi}{+}(\Omega)$ . Para calcular  $h(\Omega, \Theta)$  necessitamos dos elementos das matrizes  $\rho^j$ ,  $\chi^j$  e  $G^j$  que são para este caso simplesmente:

$$\rho_{\pi\pi}^j = \frac{v_j^2 e^{i\Theta}}{\det x_j} \left\{ v_j^2 e^{i\Theta} + u_j^2 [e^{i(\alpha+\gamma)} \cos^2 \frac{\beta}{2} + e^{i(\alpha-\gamma)} \sin^2 \frac{\beta}{2}] \right\} \quad (5.3.17a)$$

$$\rho_{\nu\nu}^j = \frac{v_j^2 e^{i\Theta}}{\det x_j} \left\{ v_j^2 e^{i\Theta} + u_j^2 [e^{-i(\alpha+\gamma)} \cos^2 \frac{\beta}{2} + e^{-i(\alpha-\gamma)} \sin^2 \frac{\beta}{2}] \right\} \quad (5.3.17b)$$

$$\rho_{\pi\nu}^j = \frac{v_j^2 e^{i\Theta}}{\det x_j} \left\{ \frac{u_j^2}{2} (e^{i\gamma} - e^{-i\gamma}) \sin \beta \right\} \quad (5.3.17c)$$

$$\rho_{\nu\pi}^j = \rho_{\pi\nu}^j$$

$$\chi_{\pi\pi}^j = \frac{u_j}{v_j} \rho_{\pi\pi}^j \quad (5.3.18a)$$

$$\chi_{\nu\nu}^j = \frac{u_j}{v_j} \rho_{\nu\nu}^j \quad (5.3.18b)$$

$$\chi_{\pi\nu}^j = \frac{u_j}{v_j} \rho_{\pi\nu}^j \quad (5.3.18c)$$

$$\chi_{\nu\pi}^j = \chi_{\pi\nu}^j$$

e finalmente

$$G_{\pi\pi}^j = \frac{u_j v_j}{\det x_j} \left\{ u_j^2 + v_j^2 e^{i\Theta} [e^{i(\alpha+\gamma)} \cos^2 \frac{\beta}{2} + e^{i(\alpha-\gamma)} \sin^2 \frac{\beta}{2}] \right\} \quad (5.3.19a)$$

$$G_{\nu\nu}^j = \frac{u_j v_j}{\det x_j} \left\{ u_j^2 + v_j^2 e^{i\Theta} [e^{-i(\alpha+\gamma)} \cos^2 \frac{\beta}{2} + e^{-i(\alpha-\gamma)} \sin^2 \frac{\beta}{2}] \right\} \quad (5.3.19b)$$

$$G_{\pi\nu}^j = -\frac{v_j}{u_j} \rho_{\pi\nu} \quad (5.3.19c)$$

$$G_{\nu\sigma}^j = G_{\sigma\nu}^j$$

Tendo em mãos estes elementos das matrizes, podemos obter facilmente (5.1.12)  $h(\Omega, \theta)$ , que por questão de conveniência vamos reescreve-la da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \frac{h(\Omega, \theta)}{\eta(\Omega, \theta)} &= \sum_j 2\Omega_j \epsilon_j [\rho_{\pi\pi}^j + \rho_{\omega\omega}^j] - G \sum_j \Omega_j [(\rho_{\pi\pi}^j + \rho_{\omega\omega}^j)^2 - \rho_{\pi\pi}^j \rho_{\omega\omega}^j + \rho_{\pi\nu}^j \rho_{\nu\pi}^j] - \\ &G \sum_j \Omega_j \Omega_{j'} [k_{\pi\pi}^{jj'} G_{\pi\pi}^{j'} + k_{\omega\omega}^{jj'} G_{\omega\omega}^{j'} + 2k_{\pi\nu}^{jj'} G_{\nu\pi}^{j'}] \end{aligned} \quad (5.3.20)$$

Substituindo então os elementos das matrizes (5.3.17) - (5.3.19) na expressão acima temos um resultado compacto

$$\begin{aligned} \frac{h(\Omega, \theta)}{\eta(\Omega, \theta)} &= \sum_j \frac{\Omega_j}{\det x_j} \left\{ [4\epsilon_j - 3G] v_j^4 e^{2i\theta} + [2\epsilon_j - G \Omega_j] 2u_j^2 v_j^2 e^{i\theta} \Theta^{\pi\nu}(\Omega) \right\} - \\ &4G \sum_j \frac{\Omega_j(\Omega_j - 1)}{[\det x_j]^2} u_j^4 v_j^4 e^{2i\theta} \left\{ 1 - [\Theta^{\pi\nu}(\Omega)]^2 \right\} - \\ &2G \sum_j \frac{\Omega_j \Omega_{j'} u_j v_j u_{j'} v_{j'} e^{i\theta}}{\det x_j \det x_{j'}} \left\{ [v_j^2 u_{j'}^2 + u_j^2 v_{j'}^2] e^{2i\theta} + [v_j^2 v_{j'}^2 e^{2i\theta} + u_j^2 u_{j'}^2] [\Theta^{\pi\nu}(\Omega)] \right\} \end{aligned} \quad (5.3.21)$$

$$\text{onde } \eta(\Omega, \theta) = \prod_j [u_j^4 + v_j^4 e^{2i\theta} + 2u_j^2 v_j^2 e^{i\theta} \Theta^{\pi\nu}(\Omega)]^{\Omega_j} \quad (5.3.22)$$

e para deduzí-la usamos a seguinte identidade:

$$\det X_j [\Theta^{\pi}(\Omega)] - 2u_j^2 v_j^2 [\Theta^{\pi}(\Omega)]^2 = [u_j^4 + v_j^4 e^{2i\theta}] [\Theta^{\pi}(\Omega)] \quad (5.3.23)$$

A primeira conclusão a ser tomada desta expressão é que no limite de  $\alpha = \beta = \gamma = \theta = 0$  reincidimos na expressão (2.4.22) da energia de BCS do estado fundamental.

A seguir notemos que se mantivermos os ângulos  $\alpha$  e  $\gamma$  em  $\alpha = 0$  e  $\gamma = 0$  ou  $\alpha = \pi$  e  $\gamma = \pm\pi$  a expressão (5.3.22) produzirá energia de BCS projetada em número, quando  $\alpha = \pi$  e  $\gamma = 0$  implica que  $\Theta^{\pi}(\Omega) = -1$ . Como os valores de  $\Theta^{\pi}(\Omega)$  variam entre +1 e -1 pode ser facilmente provado que para um dado  $\theta$ , os valores de  $h(\Omega, \theta)$ , para os outros ângulos de Euler, estão entre  $e(\theta)$  e  $e(\theta + \pi)$ , onde  $e(\theta)$  é o valor de  $h(\Omega, \theta)$  em  $\Theta^{\pi}(\Omega) = 1$  ou seja:

$$e(\theta) = h(\Omega, \theta) \Big|_{\Theta^{\pi}(\Omega)=1}$$

$$e(\theta) = \prod_j [u_j^2 + v_j^2 e^{i\theta}]^2 \left\{ \sum_j \frac{\Omega_j}{(u_j^2 + v_j^2 e^{i\theta})^2} \left[ (4\epsilon_j - 3G) e^{2i\theta} v_j^4 + (2\epsilon_j - G\Omega_j) 2u_j^2 v_j^2 e^{i\theta} \right] - \right.$$

$$\left. G \sum \frac{\Omega_j \Omega_j' u_j v_j u_j' v_j' e^{i\theta}}{[(u_j^2 + v_j^2 e^{i\theta})(u_j'^2 + v_j'^2 e^{i\theta})]^2} \left[ (v_j^2 u_j'^2 + u_j^2 v_j'^2) e^{i\theta} + (v_j^2 v_j'^2 e^{2i\theta} + u_j^2 u_j'^2) \right] \right\}$$

(5.3.24)

onde usamos a relação

$$\det X_j = (u_j^2 + v_j^2 e^{i\theta})^2$$

Eventualmente análises deste tipo propiciem alguma inspiração sobre o procedimento numérico da integral de projeção (5.1.11).

Em último lugar observemos que (5.3.21) depois de multiplicado por  $n(\Omega, \theta)$ , encontra-se de forma bastante adequada pa

ra expansão binomial de  $h(\Omega, \theta)$  pela dependência óbvia nos ângulos de Euler na forma  $\Theta^{\pi}(\Omega)$ . Para se obter  $h(\Omega, \theta)$  em forma de polinômio de  $e^{i\theta}$  e  $\Theta^{\pi}(\Omega)$ , usamos o procedimento mencionado de repetidas aplicações do binômio de Newton, lembrando que  $n(\Omega, \theta) = \prod_j [\det X_j]^{\Omega_j}$ . Ao efetuar o desenvolvimento pode haver alguma dúvida em relação ao segundo termo de (5.3.21), que é, após feita a multiplicação citada, proporcional a  $\Omega_j(\Omega_j - 1) \prod_{j' \neq j} [\det X_{j'}]^{\Omega_{j'}} [\det X_j]^{\Omega_j - 2}$ , tornando impossível a expansão em  $e^{i\theta}$  e  $\Theta^{\pi}(\Omega)$  caso  $\Omega_j = 1$ . Felizmente aparece o fator  $\Omega_j(\Omega_j - 1)$  neste termo, que remove a dificuldade de maneira óbvia.

Estamos portanto em ótimas condições para usar o procedimento de repetidas aplicações do binômio de Newton na função superposição  $h(\Omega, \theta)$ , e determinar um polinômio nas variáveis angulares  $e^{i\theta}$  e  $\Theta^{\pi}(\Omega)$ . Para alcançar este objetivo, vamos inicialmente expandir o primeiro termo de  $h(\Omega, \theta)$  em (5.3.21), denotado por  $h_1$ , depois de multiplicado por  $n(\Omega, \theta)$ , assim:

$$h_1 = \sum_{\substack{k_{j1} k_{j2} \dots k_{jM} \\ \ell_{j1} \ell_{j2} \dots \ell_{jM}}} [\prod F_{j\mu}] \sum_{\Omega_j} \binom{\Omega_j - 1}{k_j} \binom{k_j}{\ell_j} \left\{ [4\epsilon_j - 3\Omega_j] (u_j^4)^{\Omega_j - (k_j + 1)} (v_j^4)^{k_j + 1 - \ell_j} (2u_j^2 v_j^2)^{\ell_j} \right. \\ \left. e^{i[2(k+1) - \ell]\theta} [\Theta^{\pi}(\Omega)]^{\ell} + [2\epsilon_j - \Omega_j] (u_j^4)^{\Omega_j - (k_j + 1)} (v_j^4)^{(k_j + 1) - (\ell_j + 1)} (2u_j^2 v_j^2)^{\ell_j + 1} \right. \\ \left. e^{i[2(k+1) - (\ell+1)]\theta} [\Theta^{\pi}(\Omega)]^{\ell+1} \right\} \frac{1}{F_j} \quad (5.3.25)$$

onde  $k = \sum k_j$  e  $\ell = \sum \ell_j$ .

Observando esta última expressão,  $h_1$ , as regularidades

ressaltam a primeira vista nos dois termos, tanto nos coeficientes como nas variáveis angulares temos a mesma ordem em  $k$  e  $l$  sugerindo fortemente que pode haver um rearranjo dos índices de tal forma que as variáveis fiquem claramente separadas dos coeficientes, ou seja:

$$h_l = \sum_{\substack{k_1, k_2, \dots, k_m \\ l_1, l_2, \dots, l_m}} \left[ \prod_{j=1}^m F_j \right] \sum_j \left\{ [4\epsilon_j - G][k_j - l_j] + [2\epsilon_j - G\Omega_j] l_j \right\} \times e^{i[2k-l]\theta} \Theta^{\text{TT}}(\Omega) \quad (5.3.26)$$

onde usamos a definição de  $F_j$  dada por:

$$F_j = \binom{\Omega_j}{k_j} \binom{k_j}{l_j} (u_j^4)^{\Omega_j - k_j} (v_j^4)^{k_j - l_j} (2u_j^2 v_j^2)^{l_j} \quad (5.3.27)$$

e os seguintes coeficientes binomiais

$$\binom{\Omega_{j-1}}{k_{j-1}} \binom{k_{j-1}}{l_{j-1}} = \frac{l_j}{\Omega_j} \binom{\Omega_j}{k_j} \binom{k_j}{l_j} \quad (5.3.28)$$

$$\binom{\Omega_{j-1}}{k_{j-1}} \binom{k_{j-1}}{l_j} = \frac{k_j - l_j}{\Omega_j} \binom{\Omega_j}{k_j} \binom{k_j}{l_j}$$

A mesma técnica pode ser adotada para tratar os outros termos de  $h(\Omega, \theta)$ , originando como resultado final a seguinte expressão:

$$\begin{aligned}
h(\Omega, \theta) = & \sum_{\substack{k_{j1}, k_{j2}, \dots, k_{jm} \\ l_{j1}, l_{j2}, \dots, l_{jm}}} \left[ \prod_{j=1}^m F_j \right] \left\{ \sum_j \left\{ [(4\epsilon_j - 3G) - 4G(\Omega_j - k_j)] (k_j - l_j) + \right. \right. \\
& (2\epsilon_j - G\Omega_j) l_j + G l_j (l_j - 1) - \sum_{j \neq j'} G \left\{ \frac{v_j^2 u_{j'}^2 (\Omega_j - k_j) + u_j^2 v_{j'}^2 (k_j - l_j)}{\mu_j v_j u_{j'} v_{j'}} l_{j'} + \right. \\
& \left. \left. \frac{u_j^2 v_{j'}^2 + v_j^2 u_{j'}^2}{2u_j v_j u_{j'} v_{j'}} l_j l_{j'} \right\} \right\} e^{i(2k - l)\theta} [\Theta^{\pi\pi}(\Omega)]^l
\end{aligned}$$

(5.3.29)

onde empregamos adicionalmente as seguintes identidades binomiais:

$$\binom{\Omega_j - 2}{k_j - 1} \binom{k_j - 1}{l_j} = \frac{(\Omega_j - k_j)(k_j - l_j)}{\Omega_j(\Omega_j - 1)} \binom{\Omega_j}{k_j} \binom{k_j}{l_j}$$

$$\binom{\Omega_j - 2}{k_j - 2} \binom{k_j - 2}{l_j - 2} = \frac{l_j(l_j - 1)}{\Omega_j(\Omega_j - 1)} \binom{\Omega_j}{k_j} \binom{k_j}{l_j}$$

(5.3.30)

Como a separação nas variáveis angulares é bastante explícita reescrevamos formalmente

$$h(\Omega, \theta) = \sum_{k, l} \left\{ Q_{k, l} e^{i(2k - l)\theta} [\Theta^{\pi\pi}(\Omega)]^l + Q'_{k, l} e^{i(2k - l)\theta} [\Theta^{\pi\pi}(\Omega)]^{l-2} \right\}$$

(5.3.31)

sendo  $Q_{k, l}$  e  $Q'_{k, l}$  coeficientes determinados pela nossa expansão e definidos como:

$$Q_{\mathbf{r}\ell} = \sum_{\substack{k_{j_1} k_{j_2} \dots k_{j_m} \\ \ell_{j_1} \ell_{j_2} \dots \ell_{j_m} \\ (\sum k_j = \mathbf{r}, \sum \ell_j = \ell)}} [\prod_j F_j] \left\{ \sum_j [(4\epsilon_j - 3G) - 4G(\omega_j - k_j)] (k_j - \ell_j) + \right. \\ \left. (2\epsilon_j - G\omega_j) \ell_j + G\ell_j(\ell_j - 1) - G \sum_{j \neq j'} \frac{v_j^2 u_{j'}^2 (\omega_j - k_j) + u_j^2 v_{j'}^2 (k_j - \ell_j)}{u_j v_j u_{j'} v_{j'}} \ell_{j'} \right\} \quad (5.3.32)$$

e

$$Q'_{\mathbf{r}\ell} = -\frac{G}{2} \sum_{\substack{k_{j_1} k_{j_2} \dots k_{j_m} \\ \ell_{j_1} \ell_{j_2} \dots \ell_{j_m}}} [\prod_j F_j] \left\{ \sum_{j \neq j'} \left( \frac{u_j v_{j'}}{v_j u_{j'}} + \frac{v_j u_{j'}}{u_j v_{j'}} \right) \ell_j \ell_{j'} \right\} \quad (5.3.33)$$

deste último coeficiente concluímos facilmente que  $Q'_{\mathbf{r}\ell} = 0$  quando  $\ell < 2$ , garantindo a forma polinomial para  $h(\Omega, \Theta)$  (5.3.21).

Finalmente depois de algum trabalho ficamos em condições de efetuar a última manipulação do elemento de matriz diagonal da hamiltoniana. Tendo em vista (5.1.11) exprimamos  $\langle \text{BCS} | \hat{H} \hat{P}_T \hat{P}_N | \text{BCS} \rangle$  em termos dos coeficientes  $Q_{\mathbf{r}\ell}$  e  $Q'_{\mathbf{r}\ell}$  depois de calcularmos a integral no ângulo de "gauge".

$$\langle \text{BCS} | \hat{H} \hat{P}_T \hat{P}_N | \text{BCS} \rangle = \frac{2T+1}{8\pi^2} \sum_{\mathbf{r}=0}^{\sum \Omega_j} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} [Q_{\mathbf{r}, 2\mathbf{r}-\mathbf{N}} + Q'_{\mathbf{r}, 2\mathbf{r}-\mathbf{N}-2} \eta^{(2\mathbf{r}-\mathbf{N}, T; \mathbf{k}\mathbf{k}')} ] \prod_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{T} \quad (5.3.34)$$

onde  $\eta(2k-N, T, k, k')$  e a relação entre

$$\eta(2k-N, T; k, k') = \frac{I_{kk'}^T(2k-N-2)}{I_{kk'}^T(2k-N)} \quad (5.3.35)$$

ou então em termos de função Gama através de (5.3.14), (5.3.7), (5.3.6) e (5.3.5).

$$\begin{aligned} \langle BCS | \hat{H} \hat{P}_T \hat{P}_N | BCS \rangle &= \frac{2T+1}{8\pi^2} (-)^T (2)^N \sum_{k=0}^{\sum \Omega_j} \left[ Q_{R, 2k-N} + \right. \\ & Q'_{R, 2k-N} \eta(2k-N, T; k, k') \left. \right] \sum_{k=0}^{\sum \Omega_j} (-)^{k'} \sqrt{\frac{(T+k')!(T-k)!}{(T+k)!(T-k)!}} \sum_{\substack{\mu=0 \\ \mu=0}}^{\substack{\mu=2k-N \\ \mu=T-k'}} (-)^\mu \binom{2k-N}{\mu} \times \\ & \binom{2k-N-m}{-k'-k+m} \binom{m}{-k'+k-m} \binom{T-k}{\mu} \binom{T+k}{2k+\mu} \frac{\Gamma(2k-N+\mu-m+1+\frac{k+k'}{2}) \Gamma(-T-\mu+m+1-\frac{k+k'}{2})}{(2)^{2k} \Gamma(2k-N-T+2)} \end{aligned} \quad (5.3.36)$$

Associando as expressões analíticas da norma  $\langle BCS | \hat{P}_T \hat{P}_N | BCS \rangle$  (5.3.16) e do elemento de matriz diagonal  $\langle BCS | \hat{H} \hat{P}_T \hat{P}_N | BCS \rangle$  (5.3.36), lembrando que a relação de energia média  $\bar{E} = \langle BCS | \hat{H} \hat{P}_T \hat{P}_N | BCS \rangle / \langle BCS | \hat{P}_T \hat{P}_N | BCS \rangle$  terminamos o tratamento analítico para as energias dos estados yrast de isospin.

Devido a interação de emparelhamento ser independente da carga a expressão de energia pode, sem nenhuma perda de generalidade, ser substituída pela fórmula mais simples e compacta, encontrada no caso axialmente simétrico. Por esta razão vamos adiar a discussão sobre as possíveis aplicações do presente tratamento.

5.4. Expressões analíticas para a projeção no espaço de isospin e de "gauge" com simetria axial

Demonstramos na secção anterior como é possível tratar os estados Yrast de Isospin projetando uma função de onda especialmente escolhida. Existe uma maior preferência nesta função de onda, que não mistura núcleos par-par e impar, justificada por considerações teóricas e investigações numéricas [Ginocchio e Weneser 1968]. A função de onda em questão é produto de duas funções de BCS para protons e neutrons, respectivamente, ou seja:

$$|BCS, I\rangle = \prod_{j>0} [u_{j1}^j + s_{jm} v_{j1}^j c_{j-m\pi}^+ c_{j m \pi}^+] [u_{j2}^j + s_{jm} v_{j2}^j c_{j-m\sigma}^+ c_{j m \sigma}^+] |0\rangle \quad (5.4.1)$$

onde os  $u_{t\tau}^j$ 's e  $v_{t\tau}^j$ 's são definidos pela transformação de quasipartículas

$$a_{j m \tau}^+ = \sum_t [u_{t\tau}^j c_{j m t}^+ + s_{jm} v_{t\tau}^j c_{j-m t}^+] \quad (5.4.2)$$

dos estados de partícula  $c_{j m t}^+$  para os de quasipartícula  $a_{j m \tau}^+$  com número quântico espacial e de spin  $jm$  e  $t = \pi$  para protons e  $t = \sigma$  para neutrons. Aqui  $\tau$  é um rótulo que distingue as duas espécies de quasipartículas.

Dentro do quadro da aproximação de quasipartículas a função de onda (5.4.1) é reconhecida como sendo a solução para os estados  $0^+$  mais baixos dos núcleos par-par. Matematicamente esta solução corresponde a escolha especial dos coeficientes (5.1.6) da função de onda BCS mais geral que encontramos anteriormente (por ex. veja 5.1.4), onde devemos colocar  $E_{n0} = 0$ . Para uma melhor visualização vamos reproduzir a função de onda mais geral e os coeficientes em questão.

$$|\phi\rangle = \prod_{jm>0} \left[ B_4^j c_{j-m\pi}^+ c_{j-m\pi}^+ c_{j-m\nu}^+ c_{j-m\nu}^+ + B_{\pi\pi}^j S_{jm} c_{j-m\pi} c_{j-m\pi} + B_{\nu\nu}^j S_{jm} c_{j-m\nu} c_{j-m\nu} + B_{\nu\nu}^j S_{jm} (c_{j-m\pi}^+ c_{j-m\nu}^+ + c_{j-m\nu}^+ c_{j-m\pi}^+) + B_0^j \right] |0\rangle \quad (5.4.3)$$

onde

$$\begin{aligned} B_4^j &= v_{\pi 1}^j v_{\nu 2}^j - v_{\nu 1}^j v_{\pi 2}^j \\ B_0^j &= u_{\pi 1}^j u_{\nu 2}^j - u_{\nu 1}^j u_{\pi 2}^j \\ B_{\nu\nu}^j &= u_{\pi 1}^j v_{\nu 2}^j - v_{\nu 1}^j u_{\pi 2}^j \\ B_{\pi\pi}^j &= v_{\pi 1}^j u_{\nu 2}^j - u_{\nu 1}^j v_{\pi 2}^j \\ B_{\nu\nu}^j &= v_{\nu 1}^j u_{\nu 2}^j - u_{\nu 1}^j v_{\nu 2}^j \end{aligned} \quad (5.4.4)$$

Observando a função de onda (5.4.1) podemos sentir que esta escolha é louvável, pois revisita-se as facilidades da teoria de BCS no caso de emparelhamento em um sistema de neutrons e protons. Entretanto, como mostramos de maneira explícita na secção precedente, a não existência de simetria axial é o alto preço que paga mos pela aparente simplicidade desta função de onda. Ficando o cálculo de integral de projeção de Hill-Wheeler, para restaurar as simetrias quebradas na função de onda, extremamente complicado.

Por outro lado sabemos da existência de uma forte analogia entre o momento angular total  $J$  e o isospin total  $T$ . Aprende mos também que em núcleos deformados é possível fazer a hipótese de simetria axial, ao se efetuar a projeção em momento angular. Prova velmente muito teríamos a ganhar se encontrássemos a equivalente simetria axial no espaço de cargas. O objetivo principal desta tese é

comunicar que atingimos a meta proposta, ou seja, reconhecemos como resultado de nossa pesquisa, a existência de uma classe de funções de onda tipo BCS que apresentam simetria axial no espaço de cargas.

Então com a esperança de encontrar a simetria axial observamos que colocando  $\beta_{\pi\pi}^j = \beta_{\nu\nu}^j = 0$ , a função de onda BCS generalizada (5.4.3) se reduz a:

$$|BCS, II\rangle = \prod_{j m \geq 0} \left[ \beta_4^j c_{j-m\pi}^+ c_{j m \pi}^+ c_{j-m\nu}^+ c_{j m \nu}^+ + \beta_{\pi\nu}^j (c_{j-m\pi}^+ c_{j m \nu}^+ + c_{j m \nu}^+ c_{j m \pi}^+) + \beta_0^j \right] |0\rangle \quad (5.4.5)$$

Embora esta função de onda, que mistura nucleons par-par e impar-impar, não conserve o número de nucleons ( $2N$ ) e o isospin ( $T$ ), podemos ver que ela é construída de blocos com cada um possuindo a terceira componente do isospin  $M_T = 0$ , ou seja, esta função de onda conserva a projeção  $z$  do isospin, pois representa uma mistura de núcleos autoconjugados. Portanto se aplicarmos o operador de isospin  $\hat{T}_z$  e esta função de onda devemos obtê-la com  $M_T$  fixo. Matematicamente temos:

$$\hat{T}_z |BCS, II\rangle = M_T |BCS, II\rangle \quad (5.4.6)$$

com  $M_T = 0$ . Sendo então trivial ver que:

$$e^{i\hat{T}_z \omega} |BCS, II\rangle = |BCS, II\rangle \quad (5.4.7)$$

implicando que esta classe de funções de onda BCS é invariante por rotação em torno do eixo  $T_z$ , possuindo assim as propriedades de simetria que estamos procurando.

Esta simetria pode também ser entendida pelo seguinte modo alternativo. Vimos que para o caso de núcleos autoconjugados

(cap. 2) que a solução  $\Delta_{\pi\pi} = \Delta_{jj} = \Delta$   $\Delta_{\pi 0} = 0$  não pode ser a única pela simples razão que a função de onda (5.4.1) é válida somente para núcleons par-par. Devido ao hamiltoniano de emparelhamento ser independente da carga deve haver uma outra solução que seja aplicável tanto para núcleos par-par como para impar-impar. Foi provado que tal solução existe e os parâmetros de hiato são

$$\Delta_{\pi\pi} = \Delta_{jj} = \Delta \quad \Delta_{\pi 0} = 0 \quad (5.4.8)$$

A partir desta função de onda (5.4.5), que não conserva o isospin  $T$  e o número de nucleons  $2N$  podemos idealizar o nosso sistema deformado num espaço quadridimensional, a saber espaço de carga e espaço de "gauge" e a função de onda intrínseca axialmente simétrica no sistema de coordenadas do corpo, orientado em relação ao sistema de laboratório com ângulos  $\alpha \beta \gamma \theta$ .

Para restaurar as simetrias quebradas usemos a técnica de Peierls-Yoccoz descrita no capítulo 3 e aplicada nas secções 5.2 e 5.3, permitindo-nos passar imediatamente ao cálculo de quantidades relevantes tais como  $h(\Omega, \theta)$ ,  $n(\Omega, \theta)$  a norma  $\langle \text{BCS} | \hat{P}_T \hat{P}_N | \text{BCS} \rangle$  e elemento de matriz diagonal  $\langle \text{BCS} | \hat{H} \hat{P}_T \hat{P}_N | \text{BCS} \rangle$  da hamiltoniana, usando as fórmulas (5.1.11), (5.1.14 a 5.1.17) e (5.2.1 a 5.2.4).

Para estas três últimas fórmulas substituindo os coeficientes  $B$ 's abaixo da simetria axial

$$B_0^j = -v_j^2 \quad B_u^j = u_j^2 \quad B_{\pi 0}^j = u_j v_j \quad B_{\pi\pi}^j = B_{jj}^j = 0 \quad (5.4.9)$$

onde denotamos  $u_j = u_{j2}^j = u_{\pi 1}^j$  e  $v_j = v_{\pi 2}^j = v_{j1}^j$ , vamos obter os seguintes elementos da matriz densidade (5.2.1)

$$\rho_{\pi\pi}^j = \frac{e^{i\theta} v_j^2}{\det X_j} \{ u_j^2 \cos \beta + v_j^2 e^{i\theta} \} = \rho_{jj}^j \quad (5.4.10a)$$

$$\rho_{\pi 0}^j = \frac{e^{i\theta} u_j^2 v_j^2}{\det X_j} e^{i\alpha} \sin \beta \quad (5.4.10b)$$

$$\rho_{0\pi}^j = -\frac{e^{i\theta} u_j^2 v_j^2}{\det X_j} e^{-i\alpha} \sin \beta \quad (5.4.10c)$$

a partir de (5.2.2) o seguinte tensor de emparelhamento

$$K_{\pi\pi}^j = \frac{u_j}{v_j} \rho_{\pi\sigma}^j \quad (5.4.11a)$$

$$K_{\sigma\sigma}^j = \frac{u_j}{v_j} \rho_{\sigma\pi}^j \quad (5.4.11b)$$

$$K_{\sigma\pi}^j = \frac{u_j}{v_j} \rho_{\pi\pi}^j \quad (5.4.11c)$$

$$K_{\pi\sigma}^j = K_{\sigma\pi}^j$$

e os últimos elementos de (5.2.3)

$$G_{\pi\pi}^j = -\frac{v_j}{u_j} \rho_{\sigma\pi}^j \quad (5.4.12a)$$

$$G_{\sigma\sigma}^j = -\frac{v_j}{u_j} \rho_{\pi\sigma}^j \quad (5.4.12b)$$

$$G_{\pi\sigma}^j = \frac{u_j v_j}{\det X_j} [u_j^2 + v_j^2 e^{i\theta} \cos \beta] \quad (5.4.12c)$$

$$G_{\sigma\pi}^j = G_{\pi\sigma}^j$$

Para o caso de simetria axial possuímos a liberdade de colocar  $\alpha = \gamma = 0$  nestas matrizes, entretanto mantivemos a presente forma para utilização no cálculo de amplitudes espectroscópicas onde necessitamos de ângulos diferentes de  $\beta$ . Resta-nos determinar o  $\det X_j$  que é justamente:

$$\det X_j = u_j^4 + v_j^4 e^{2i\theta} + 2u_j^2 v_j^2 e^{i\theta} \cos \beta \quad (5.4.13)$$

Do qual podemos concluir que a função superposição  $n(\Omega, \theta) = \prod_j [\det X_j]^{\Omega_j}$  depende apenas de  $\beta$  e  $\theta$ . Em seguida como no caso triaxial calculemos a função superposição  $h(\Omega, \theta)$  subs

tituindo diretamente os elementos das matrizes em (5.1.12) ou (5.3.20), obtendo:

$$\frac{h(\beta, \theta)}{n(\beta, \theta)} = \sum_j \left\{ \frac{\Omega_j v_j^2 e^{2i\theta}}{\det X_j} \left[ (4\epsilon_j - 3G) v_j^2 e^{2i\theta} + 2(2\epsilon_j - G\Omega_j) u_j^2 \cos\beta \right] - \right. \\ \left. 4G \frac{\Omega_j(\Omega_j - 1)}{[\det X_j]^2} u_j^4 v_j^4 e^{2i\theta} \sin^2\beta \right\} - \\ 2G \sum_{j,j'} \frac{\Omega_j \Omega_{j'} u_j u_{j'} v_j v_{j'} e^{i\theta}}{\det X_j \det X_{j'}} \left\{ (v_j^2 u_{j'}^2 + u_j^2 v_{j'}^2) e^{i\theta} + (u_j^2 u_{j'}^2 + v_j^2 v_{j'}^2 e^{2i\theta}) \cos\beta \right\} \quad (5.4.14)$$

onde  $\eta(\beta, \theta) = \prod_j [u_j^4 + v_j^4 e^{i\theta} + 2u_j^2 v_j^2 e^{i\theta} \cos\beta]^{-\Omega_j}$

Se compararmos esta expressão axialmente simétrica com a triaxial (5.3.21), vemos que as duas formas são idênticas. A única diferença é na parte angular, no caso triaxial temos  $\bigoplus_{\pi}^{\pi\pi}(\Omega)$  e no presente  $\cos\beta$ . Este fato é bem-vindo neste momento pois possibilita-nos a transferência de todas as fórmulas relevantes empregadas na secção anterior, substituindo-se simplesmente  $\bigoplus_{\pi}^{\pi\pi}(\Omega)$  por  $\cos\beta$ .

Por exemplo a norma  $\langle \text{BCS} | \hat{P}_T \hat{P}_N | \text{BCS} \rangle$ , pode ser reescrita imediatamente em vista de (5.3.5) como:

$$\langle \text{BCS} | \hat{P}_T \hat{P}_N | \text{BCS} \rangle = \frac{2T+1}{8\pi^2} \sum \sum [ \Pi F_j ]_{k k'}^T \quad (5.4.15)$$

sendo

$$F_j = \begin{pmatrix} \Omega_j \\ k_j \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k_j \\ \ell_j \end{pmatrix} (u_j^4)^{\Omega_j - k_j} (v_j^4)^{k_j - \ell_j} (2u_j^2 v_j^2)^{\ell_j} \quad (5.4.16)$$

e

$$\begin{aligned}
 I_{KK'}^T(2k-N) &= \int d\Omega D_{KK'}^{T*}(\Omega) [\cos\beta]^{2k-N} \\
 &= \delta_{k0}\delta_{k'0} 4\pi^2 \int_0^\pi d\beta \sin\beta P_T(\cos\beta) [\cos\beta]^{2k-N}
 \end{aligned}
 \tag{5.4.17}$$

onde usamos a propriedade  $D_{00}^T(\Omega) = P_T(\cos\beta)$  sendo  $P_T(\cos\beta)$  o Polinômio de Legendre que deve ser diferenciado em notação do operador de projeção de isospin pelo chapéu, isto é  $\hat{P}_T$ .

Em razão da simetria axial o cálculo da integral  $I_{KK'}^T(2k-N)$  é drasticamente simplificado. Em vez das horríveis expressões (5.3.7) a (5.3.14) do caso triaxial temos de maneira elementar

$$I_{KK'}^T(n) = \frac{n! \Gamma\left(\frac{n-T+1}{2}\right) \delta_{k0}\delta_{k'0}}{2^{T-1} (n-T)! (n+T+1) \Gamma\left(\frac{n+T+1}{2}\right)}
 \tag{5.4.18}$$

onde definimos  $n = 2k - N$ . As condições de existência da integral originam duas restrições  $n > T$  e  $n - T$  par, implicando que a função  $I_{KK'}^T(n)$  seja diferente de zero somente se

$$n = T, T+2, T+4, \dots
 \tag{5.4.19}$$

Usando (5.4.15) e (5.4.18) finalmente chegamos a seguinte expressão da norma da função de onda de BCS projetada para o caso axialmente simétrico:

$$\langle \text{BCS} | \hat{P}_T \hat{P}_N | \text{BCS} \rangle = \frac{2^{T+1}}{2} \sum_{n=T}^N C_n \sigma_T(n)
 \tag{5.4.20}$$

onde para simplificarmos definimos

$$\mathcal{F}_T^{(n)} = \prod_{k, k'}^T (n) \delta_{k,0} \delta_{k',0} \quad (5.4.21)$$

e

$$G_n = \sum_{\substack{l_1 + l_2 + \dots + l_m = n \\ k_1 + k_2 + \dots + k_m = \frac{n+N}{2}}} [\prod F_j] \quad (5.4.22)$$

A determinação do limite superior de  $n$  é feita a partir dos fatos;  $0 \leq l_j \leq k_j$ , devido a expansão binomial  $\sum_j l_j = 2k_j$  e  $\sum_j l_j = 2 \sum_j k_j - N$ , por causa da integral do ângulo de "gauge", originando:

$$n = \sum l_j - N \quad (5.4.23)$$

assim o limite superior é  $n = N$ , para não entrarmos em contradição com uma das condições de existência de  $\mathcal{F}_T^{(n)}$ , isto é,  $n \geq T$  quando  $T = N$ .

Efetuada o cálculo da norma passemos ao elemento de matriz diagonal  $\langle \text{BCS} | \hat{H}_T \hat{P}_N | \text{BCS} \rangle$ . Dada a identificação entre  $\oplus^{\pi}(\Omega)$  e  $\cos \beta$  e lembrando (5.3.29) podemos imediatamente escrever a função superposição  $h(\Omega, \theta)$  para o caso de simetria axial como:

$$h(\beta, \theta) = \sum_{\substack{k_1, k_2, \dots, k_m \\ l_1, l_2, \dots, l_m}} [\prod F_j] \left[ \sum_{j=1}^m \left\{ [(4\epsilon_j - 3G) - 4G(\Omega_j - k_j)] (k_j - l_j) + (2\epsilon_j - G)\Omega_j + G l_j (l_j - 1) - \sum G \left[ \frac{v_j^2 u_j^2 (\Omega_j - k_j) + u_j^2 v_j^2 (k_j - l_j)}{u_j v_j u_j v_j} l_j + \frac{u_j^2 v_j^2 + v_j^2 u_j^2}{2 u_j v_j u_j v_j \cos^2 \beta} l_j l_j \right] \right\} \right] e^{i(2k-l)\theta} [\cos \beta]^l \quad (5.4.24)$$

ou em termos de  $Q_{kl}$  e  $Q'_{kl}$  tomados de (5.3.31):

$$h(\beta, \theta) = \sum \left[ Q_{kl} e^{i(2k-l)\theta} \cos^\ell \beta + Q'_{kl} e^{i(2k-l)\theta} \cos^{\ell-2} \beta \right] \quad (5.4.25)$$

O elemento de matriz diagonal da hamiltoniana é facilmente calculado, se lembrarmos da expressão (5.1.11) e colocarmos a função superposição acima no local adequado, depois de efetuada a integral no ângulo de "gauge" temos:

$$\langle BCS | \hat{H} \hat{P}_T \hat{P}_N | BCS \rangle = \frac{2T+1}{2} \left\{ \sum_{n=T}^N [A'_n \mathcal{F}_T(n) + B'_n \mathcal{F}_T(n-2)] \right\} \quad (5.4.26)$$

onde

$$A'_n = \sum_{\substack{k_1+k_2+\dots+k_m = \frac{n+N}{2} \\ l_1+l_2+\dots+l_m = n}} [\prod F_j] \left[ \sum_{j=1}^m \left\{ [(4\epsilon_j - G) - 4G(\Omega_j - k_j)] (k_j - l_j) + (2\epsilon_j - G\Omega_j) l_j + G l_j (l_j - 1) \right\} - G \sum_{j \neq j'} \left\{ \frac{v_j^2 u_{j'}^2 (\Omega_j - k_j) + u_j^2 v_j^2 (k_j - l_{j'})}{u_j v_j u_{j'} v_{j'}} l_j \right\} \right] \quad (5.4.27)$$

e

$$B'_n = \sum_{\substack{k_1+k_2+\dots+k_m = \frac{n+N}{2} \\ l_1+l_2+\dots+l_m = n}} [\prod F_j] \left\{ \sum_{j \neq j'} \left[ \frac{u_j v_{j'}}{v_j u_{j'}} + \frac{v_j u_{j'}}{u_j v_{j'}} \right] l_j l_{j'} \right\} \quad (5.4.28)$$

Com auxílio da relação de recorrência da função isospin

$$\mathcal{F}_T(n-2) = \frac{n(n+1) - T(T+1)}{n(n-1)} \mathcal{F}_T(n) \quad (5.4.29)$$

e (5.4.20) e (5.4.26) chegamos a expressão para o valor médio da energia.

$$E = E_0 + \frac{\sum_{n=T}^N [A_n + B_n T(T+1)] \mathcal{F}_T(n)}{\sum_{n=T}^N C_n \mathcal{F}_T(n)} \quad (5.4.30)$$

onde  $E_0$  é a energia no limite do acoplamento forte expresso por:

$$E_0 = -GN \sum_j \Omega_j + \frac{G}{2} [N(N-3) + T(T+1)] \quad (5.4.31)$$

Os coeficientes  $A_n$  e  $B_n$  da fórmula acima estão relacionados com os parâmetros já conhecidos por:

$$A_n = A'_n + \frac{n+1}{n-1} B'_n + GN \sum_j \Omega_j - \frac{G}{2} N(N-3) \quad (5.4.32)$$

$$B_n = -\frac{B'_n}{n(n-1)} - \frac{G}{2} \quad (5.4.33)$$

Ao usarmos esta fórmula de energia projetada não devemos esquecer que  $n$  toma sempre os valores  $n = T, T+2, T+4 \dots N$ . Fisicamente isto significa que a função de onda de BCS não apresenta componentes com paridade  $(-)^{T+N} = -1$ . Temos o mesmo fato para o caso triaxial ou  $\mathcal{Q}_{nv}^j = 0$ , pois a função de onda de BCS para esta situação não mistura núcleos par-par e impar-impar.

A presente regra de seleção do caso de simetria axial impõe que existam somente componentes  $T = N, N-2, N-4, \dots 0$  ou  $1$  na função de onda de BCS, implicando que a função de onda axialmente simétrica (5.4.5) é a mistura de estados Yrast de núcleos

autoconjugados e não como a tradicional função de onda de BCS, que é geralmente a superposição de funções de onda de núcleos vizinhos.

Estes estados Yrast de isospin são totalmente simétricos na troca de carga, explicando melhor: A função isospin é invariante sob troca de coordenadas de carga entre dois pares com  $J = 0$  e  $T = 1$  e os isospin permitidos para esta simetria carga são justamente  $T = N, N - 2, T = N - 4 \dots$ . Portanto, a função de onda de BCS axialmente simétrica é a superposição de estados simétricos de carga mais baixos de núcleos autoconjugados vizinhos.

Este fato coloca uma limitação em nosso método, pois não conseguimos descrever estados com diferentes simetrias de carga por exemplo o estado  $T = 1$  do  $^{56}\text{Ni}$  está além do nosso trabalho.

A partir de (5.4.30) vemos que o cálculo da energia média é reduzida simplesmente a obtenção das quantidades  $A_n, B_n, C_n$  e  $\mathcal{F}_T(n)$ . Todos  $u_j$ 's e  $v_j$ 's que governam as misturas de configurações estão contidos em nestas quantidades exceto é claro em  $\mathcal{F}_T(n)$ . Uma vez  $A_n, B_n$  e  $C_n$  estejam calculadas podemos obter a energia de qualquer sistema de nucleons com  $N$  e  $T$  determinados, desde que sujeitos a restrição do princípio variacional.

A probabilidade de nosso sistema encontrar-se no estado com  $N$  e  $T$  definidos no ensemble de BCS é determinado pela norma  $\langle \text{BCS} | \hat{P}_T \hat{P}_N | \text{BCS} \rangle$  através do cálculo de  $\sum c_n \mathcal{F}_T(n)$ . Consequentemente de uma só vez podemos calcular quantidades físicas de diferentes simetrias. Na abordagem numérica [Chen e outros 1978]: este procedimento é muito difícil, principalmente para componentes com pouca probabilidade, significando norma pequena e portanto dificuldades técnicas. Na tabela 5.1 ilustramos este ponto pela decomposição de função de onda de BCS no modelo de um nível

e como vemos foram reproduzidos os coeficientes obtidos anteriormente, no capítulo 2 [Camiz e outros 1966].

| N | T | $C_{NT}$                          |
|---|---|-----------------------------------|
| 0 | 0 | $u_j^4$                           |
| 1 | 1 | $2u_j^3 v_j$                      |
| 2 | 0 | $u_j^2 v_j^2 \sqrt{\frac{10}{3}}$ |
| 2 | 2 | $u_j^2 v_j^2 \sqrt{\frac{8}{3}}$  |
| 3 | 1 | $2u_j v_j^3$                      |
| 4 | 0 | $v_j^4$                           |

Tabela 5.1 - Decomposição da função de onda de BCS para modelo de um nível com  $\Omega = 2$ .

Podemos apreciar a simplicidade da abordagem axialmente simétrica ao compararmos as nossas expressões mais relevantes com aquelas da secção precedente, que por sinal são de nossa elaboração. Ambas estão resumidas na tabela 5.2, as expressões da energia nos dois casos são bem semelhantes na forma. Quando colocamos em cada um deles os coeficientes da função superposição  $h(\Omega, \theta)$ .

Entretanto a facilidade de manuseio de um e a complexidade de outro advém principalmente da função isospin. Para o caso triaxial as complicadas expressões não motivam e até afugentam qualquer tentativa de simplificação.

No caso axial entretanto podemos encontrar uma fórmula de recorrência bastante útil para a função de isospin

$$f_T^{(n-2)} = \frac{n(n+1) - T(T+1)}{n(n-1)} f_T^{(n)} \quad (5.4.34)$$

|  |  |  |
|--|--|--|
| Energia média                              | $E = \frac{\sum_{n=T}^N \left\{ A'_n \sum_{k,k'} I_{k,k'}^{(n)} + B'_n \sum_{k,k'} I_{k,k'}^{(n-2)} \right\}}{\sum_{n=T}^N \sum_{k,k'} C_n I_{k,k'}^{(n)}}$  | $E = \frac{\sum_{n=T}^N \left\{ A'_n g_T^{(n)} + B'_n g_T^{(n-2)} \right\}}{\sum_{n=T}^N C_n g_T^{(n)}}$                     |
| função de Isospin                          | $I_{k,k'}^{(n)} = \sum_{m} \frac{(-)^{k'}}{(4)^k} \sqrt{\frac{(T+k')!(T-k)!}{(T+k)!(T-k)!}} \times$ $\sum \binom{n}{m} \binom{n-m}{-k-k+m} \binom{m}{k'+k-m} \binom{T-k}{\mu} \binom{T+k}{2k+\mu} \times$ $\Gamma \left( n + \mu - m + \frac{k+k'}{2} + 1 \right) \Gamma \left( -T - \mu + m - \frac{k+k'}{2} + 1 \right)$ | $g_T^{(n)} = \frac{n! \Gamma \left( \frac{n-T+1}{2} \right)}{2^{T-1} (n-T)! (n+T+1)! \Gamma \left( \frac{n+T+1}{2} \right)}$ |
| Fórmula de recorrência para função Isospin | $\sum_{k,k'} I_{k,k'}^{(n-2)} = \eta(n, T; k, k') \sum_{k,k'} I_{k,k'}^{(n)}$ $\eta(n, T; k, k') = ?$  | $g_T^{(n-2)} = \frac{n(n+1) - T(T+1)}{n(n-1)} g_T^{(n)}$   |

Tabela 5.2 - Comparação formal da solução triaxial com a axialmente simétrica. O lado esquerdo corresponde a solução triaxial. Os coeficientes  $A'_n$ ,  $B'_n$  e  $C'_n$  podem ser encontrados respectivamente em (5.4.27), (5.4.28) e (5.4.22)

do qual podemos construir o modelo de rotação-vibração para o sistema de neutrons e protons emparelhados. Vejamos então a dependência funcional em  $T(T+1)$  escrevendo os diversos termos  $\mathcal{F}_T(n)$  da expressão da energia (5.4.30) em termos do último termo da somatória  $\mathcal{F}_T(N)$ . Se usarmos a relação de recorrência acima (5.4.34) caímos em uma expressão que é o quociente de dois polinômios em  $T(T+1)$  e limitarmo-nos ao caso em que  $T \ll N$  ou aproximarmos a fórmula citada (5.4.30) por um número independente de  $T$  e finalmente efetuarmos uma expansão em Taylor no quociente mencionado seguiremos uma forma  $a + bT(T+1) + cT^2(T+1)^2$  análoga ao modelo de rotação-vibração de núcleos deformados.

Fica claro que a complicada fórmula de recorrência, se porventura existir, do caso triaxial não ajudará em nada para apresentar o quadro descrito acima, se o mesmo não for perdido.

Sabemos que uma das vantagens de obter expressões analíticas sobre métodos numéricos, é a possibilidade de interpretações físicas. Neste nosso caso algumas das discussões já foram feitas nas páginas precedentes, mas ainda existe um outro ponto de interesse, que é ver como ficam as nossas soluções no modelo de um nível ou modelo degenerado e ou ainda modelo de acoplamento forte.

Usando (5.4.27), (5.4.28), (5.4.32) e (5.4.33) podemos calcular  $A_n$  e  $B_n$ , tendo em mente que para o modelo de um nível  $B'_n = 0$  em (5.4.28), temos simplesmente:

$$A_n = C_n \left\{ \left[ (4\epsilon_j - G) - 4G \left( \omega_j - \frac{n+N}{2} \right) \right] \left[ \frac{N-n}{2} \right] + 2\epsilon_j n + G n(n-1) + \right. \\ \left. - \frac{G}{2} N(N-3) + G(N-n)\omega_j - \frac{G}{2} T(T+1) \right\} \quad (5.4.35)$$

$$B_n = -\frac{G}{2} \quad (5.4.36)$$

onde

$$C_n = \binom{\Omega_j}{\frac{n+N}{2}} \binom{\frac{n+N}{2}}{n} (u_j^2)^{2\Omega_j-n} (v_j^2)^n (2)^n \quad (5.4.37)$$

consequentemente o valor médio da energia (5.4.30) para  $\epsilon_j = 0$  é:

$$E = E_0 - \Delta E_0 \quad (5.4.38)$$

onde

$$\Delta E_0 = \frac{\sum_{n=T}^N \binom{\Omega_j}{\frac{n+N}{2}} \binom{\frac{n+N}{2}}{n} (2)^n \left[ \left( 1 - 2\Omega_j + \frac{n+N}{2} \right) \left( \frac{N-n}{2} \right) - n(n-1) + \frac{1}{2}N(N-3) + \frac{T(T+1)}{2} \right] \mathcal{F}_T^{\Omega_j}(n)}{\sum_{n=T}^N \binom{\Omega_j}{\frac{n+N}{2}} \binom{\frac{n+N}{2}}{n} (2)^n \mathcal{F}_T^{\Omega_j}(n)} \quad (5.4.39)$$

Nesta última expressão  $u_j$  e  $v_j$  desaparecem, não sendo necessário o tratamento variacional, portanto ela representa a energia do sistema. Abrindo a questão, se corresponde ou não a energia exata. Isto ocorre na verdade para o caso de nucleons idênticos, onde  $T = N$  e temos apenas um termo na somatória em (5.4.39), que resulta por simples inspeção em  $\Delta E_0 = 0$ . Para o caso de  $T = N - 2$  também a energia é exata, pois a identidade:

$$\frac{\sum_{n=N-2}^{n=N} C_n n \mathcal{F}_{N-2}^{\Omega_j}(n)}{\sum_{n=N-2}^{n=N} C_n \mathcal{F}_{N-2}^{\Omega_j}(n)} = \frac{N(2\Omega_j - 3) + 2}{2\Omega_j + 1} \quad (5.4.40)$$

faz com que  $\Delta E_0 = 0$ .

Para outros valores de  $T$  deve-se usar o método de indução e provar que

$$\frac{\sum_{n=T}^N \left( \frac{\Omega_j}{\frac{n+N}{2}} \right) \binom{\frac{n+N}{2}}{n} (2)^n n \mathcal{F}_T^{(n)}}{\sum_{n=T}^N \left( \frac{\Omega_j}{\frac{n+N}{2}} \right) \binom{\frac{n+N}{2}}{n} (2)^n \mathcal{F}_T^{(n)}} = \frac{N(2\Omega - N) + T(T+1)}{(2\Omega + 1)} \quad (5.4.41)$$

para reproduzir a solução exata. Infelizmente até aqui não fomos bem sucedidos nesta prova apesar da nossa convicção deste identidade, pelos casos acima e pelos experimentos numéricos.

Antes de terminar a secção vamos exprimir uma quantidade relacionada a energia, a probabilidade de ocupação do estado  $(p_{j\ell})$  que é neste caso é simplesmente:

$$P_{j\ell} = \langle \phi_{N_T} | c_{j\ell}^\dagger c_{j\ell} | \phi_{N_T} \rangle \quad (5.4.42)$$

que pode ser calculada facilmente pelas técnicas desenvolvidas nesta secção resultando:

$$P_{j\ell} = \frac{\sum_{n=T}^N q_n \mathcal{F}_T^{(n)}}{\sum_{n=T}^N c_n \mathcal{F}_T^{(n)}} \quad (5.4.43)$$

onde  $c_n$  é dado em (5.4.22) e  $q_n$

$$q_n = \frac{1}{\Omega_j} \sum_{\substack{k_{j_1} + k_{j_2} + \dots + k_{j_M} = \frac{n+N}{2} \\ \ell_{j_1} + \ell_{j_2} + \dots + \ell_{j_M} = n}} [\prod F_j] \left\{ \left( k_j - \frac{1}{2} \ell_j \right) \right\} \quad (5.4.44)$$

6 - Um tratamento simplificado de coordenadas geradoras com soluções analíticas da projeção de BCS

Recentemente o método de coordenadas geradoras (GCM), conservando o número de nucleons e isospin, foi desenvolvido para tratar os estados coletivos isovetorias de emparelhamento [Chen e outros 1978]. Na restauração das simetrias quebradas na função de onda tipo BCS foi necessário efetuar uma integral quadridimensional, 3 no espaço de isospin e 1 no espaço de "gauge". Além disso para incluir as correlações de neutron-proton usaram três parâmetros de hiato como coordenadas geradoras, adicionando maior complexidade ao cálculo feito.

Sabe-se por outro lado que o emparelhamento  $T = 0$  é pequeno e não competitivo com  $T = 1$  para a região que estamos considerando, mas ao incorporarmos este efeito de emparelhamento,  $\Delta_{T=0}$  deve ser complexo e a projeção a ser feita é em 5 dimensões, devido a adicional restauração em simetria rotacional. Se este projeto não for impossível, implicará certamente num trabalho exaustivo e excessivo, ficando tentador procurar uma simplificação no tratamento de emparelhamento  $T = 1$  de tal modo que, mesmo com a inclusão de  $T = 0$ , exista a possibilidade de uma solução factível.

No presente trabalho propomos uma classe de funções de onda geradoras, que conservam o isospin e número. Esta classe de funções geradoras é senão aquela, encontrada e apresentada no capítulo anterior.

A integral de Hill-Wheeler para projeção reduz-se a duas dimensões e o projeto de incluir o emparelhamento  $T = 0$  com a restauração de simetria rotacional é mais viável. Adicionalmente temos uma outra simplificação que é a necessidade de uma única coordenada geradora.

Certamente esta simplificação implicará em perdas sobre algumas informações físicas. Por exemplo: Da função de onda tipo BCS axialmente simétrica sô podemos calcular os estados com  $T = 0, 2, 4 \dots$  se  $N$  for par ou  $T = 1, 3, 5 \dots$  se  $N$  for ímpar, ou seja, obtemos apenas os estados simétricos de carga. Por sorte, para estes estados, a presente aproximação não fica longe do razoável e pode ser perfeitamente utilizada para explicar os casos de interesse físico.

Iniciando então com a função de onda construída de acordo com (5.4.5), que reproduzimos a seguir por questão de conveniência:

$$|BCS, II\rangle = \prod_{j>0} [B_j^+ c_{j-m\pi}^+ c_{j+m\pi}^+ c_{j-m\sigma}^+ c_{j+m\sigma}^+ + B_{j0}^+ (c_{j-m\pi}^+ c_{j+m\sigma}^+ + c_{j+m\sigma}^+ c_{j-m\pi}^+) + B_0] |0\rangle \quad (6.1)$$

como ela possui a projeção  $z$  do isospin  $M_T = 0$ , levando a simetria axial no espaço de isospin, tomamos os parâmetros  $u_j$  e  $v_j$  da seguinte forma tradicional

$$v_j^2 = \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{\epsilon_j - \lambda}{\sqrt{(\epsilon_j - \lambda)^2 + \Delta_{\pi j}^2}} \right) \quad (6.2)$$

$$u_j^2 = \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{\epsilon_j - \lambda}{\sqrt{(\epsilon_j - \lambda)^2 + \Delta_{\pi j}^2}} \right)$$

onde o potencial químico  $\lambda$  é definido pela equação de número

$$N = \sum_j 2 \Omega_j v_j^2 \quad (6.3)$$

Vamos agora usar  $\Delta_{\pi j}$ , retirando o rótulo  $\pi j$ , em  $u_j$  e  $v_j$  como a única coordenada geradora e  $\hat{P}_T \hat{P}_N |BCS, II\rangle$  como

a função de onda geradora. Escrevemos então o "ansatz" para a nos  
sa função de onda nuclear dentro do método de coordenadas gerado  
ras como:

$$|\Psi\rangle = \int d\Delta f(\Delta) \hat{P}_T \hat{P}_N |BCS II; \Delta\rangle \quad (6.4)$$

onde  $f(\Delta)$  é a função peso, determinada pela equação de Schroe  
dinger ou pelo seguinte princípio variacional:

$$\delta \frac{\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = 0 \quad (6.5)$$

que leva a conhecida equação integral de Griffin-Hill-Wheeler(GHW)

$$\int d\Delta^r f(\Delta^r) \left[ \langle P_T P_N BCS; \Delta^r | \hat{H} | P_T P_N BCS; \Delta^s \rangle - E \langle P_T P_N BCS; \Delta^r | P_T P_N BCS; \Delta^s \rangle \right] = 0 \quad (6.6)$$

Para obtermos a solução desta equação em primeiro lugar  
é necessário calcular a função superposição da energia  
 $\langle P_T P_N BCS; \Delta^r | \hat{H} | P_T P_N BCS; \Delta^s \rangle$  e a função superposição  
 $\langle P_T P_N BCS; \Delta^r | P_T P_N BCS; \Delta^s \rangle$ . Observemos que se  $\Delta^r = \Delta^s$   
estas quantidades são as expressões do valor esperado da hamilto  
niana e da norma, obtidas na secção passada. Portanto podemos esten  
der, sem perda de generalidade, as técnicas desenvolvidas na sec  
ção passada para o cálculo dos elementos de matrizes não diagonais,  
escrevendo sem a devida dedução, os elementos não diagonais da  
norma ou função superposição como é muitas vezes conhecido:

$$\langle P_T P_N BCS; \Delta^r | P_T P_N BCS; \Delta^s \rangle = \sum_{n=T}^N [C_n]_{rs} \mathcal{F}_T(n) \quad (6.7)$$

onde

$$[C_n]_{rs} = \sum_{\substack{k_{j1}+k_{j2}+\dots+k_{jm} = \frac{n+N}{2} \\ l_{j1}+l_{j2}+\dots+l_{jm} = n}} \prod_j [F_j]_{rs} \quad (6.8)$$

com

$$[F_j]_{rs} = \binom{-\Omega_j}{k_j} \binom{k_j}{l_j} (u_j^r u_j^s)^{2(\Omega_j - k_j)} (v_j^r v_j^s)^{2(k_j - l_j)} (2u_j^r u_j^s v_j^r v_j^s)^{l_j} \quad (6.9)$$

Aqui a função de isospin é definida como antes, da seguinte forma:

$$\mathcal{F}(n) = \frac{(n-T)! \Gamma\left(\frac{n-T+1}{2}\right)}{2^{T-1} (n-T)! (n+T+1) \Gamma\left(\frac{n+T+1}{2}\right)} \quad (6.10)$$

A função superposição da energia é simplesmente:

$$\langle P_T P_N BCS; \Delta^r | \hat{H} | P_T P_N BCS; \Delta^s \rangle = E_0 + \sum \left\{ [A_n]_{rs} + [B_n]_{rs} T(T+1) \right\} \mathcal{F}(n) \quad (6.11)$$

onde  $E_0$  é a energia no limite de acoplamento forte, preservada por questão de conveniência e é dada por:

$$E_0 = -NG \sum_j \Omega_j + \frac{G}{2} [N(N-3) + T(T+1)] \quad (6.12)$$

Os coeficientes de expressão acima estão relacionados com aqueles obtidos a partir da expansão da função superposição  $h(\Omega, \theta)$ ,  $A_n^0$  e  $B_n^0$  como

$$[A_n]_{rs} = [A_n^0]_{rs} + \frac{n+1}{n-1} [B_n^0]_{rs} + NG \sum \Omega_j - GN(N-1) \quad (6.13)$$

$$[B_n]_{rs} = -\frac{1}{n(n-1)} [B_n^0]_{rs} - \frac{G}{2} \quad (6.14)$$

onde

$$\begin{aligned}
 [A_n^0]_{rs} = & \sum_{\substack{k_1+k_2+\dots+k_m = \frac{n+N}{2} \\ l_1+l_2+\dots+l_m = n}} \prod [F_j]_{rs} \left\{ \sum_j [(4\epsilon_j - G) - 4G(\Omega_j - k_j)] (k_j - l_j) \right. \\
 & \left. + (2\epsilon_j - G\Omega_j) l_j + G l_j (l_j - 1) - \sum_{j \neq j'} \left[ \frac{v_j^r u_{j'}^r}{u_j^r v_{j'}^r} (\Omega_j - k_j) l_{j'} + \frac{u_j^s v_{j'}^s}{v_j^s u_{j'}^s} (k_j - l_j) l_{j'} \right] \right\}
 \end{aligned}
 \tag{6.15}$$

e

$$[B_n]_{rs} = \sum_{\substack{k_1+k_2+\dots+k_m = \frac{n+N}{2} \\ l_1+l_2+\dots+l_m = n}} \prod [F_j]_{rs} \left\{ \frac{u_j^r v_{j'}^r}{v_j^r u_{j'}^r} + \frac{v_j^s u_{j'}^s}{u_j^s v_{j'}^s} \right\} l_j l_{j'}
 \tag{6.16}$$

Desde que

$$\langle P_T P_N \text{BCS} ; \Delta^r | \hat{H} | P_T P_N \text{BCS} ; \Delta^s \rangle \quad e$$

$\langle P_T P_N \text{BCS} ; \Delta^r | P_T P_N \text{BCS} ; \Delta^s \rangle$  sejam obtidas analiticamente, a princípio é possível resolver a equação de GHW (6.6) sem auxílio de nenhum método numérico. Estamos adicionando pois, um exemplo àqueles casos [de Toledo Piza et al - 1978] em que é tentador resolver a equação de Hill-Wheeler analiticamente.

Entretanto sem esconder a nossa incompetência em seguir este caminho, resignamo-nos ao tratamento numérico usando a seguinte versão de discretização:

$$\sum \left[ \langle P_T P_N \text{BCS} ; \Delta^r | \hat{H} | P_T P_N \text{BCS} ; \Delta^s \rangle - E \langle P_T P_N \text{BCS} ; \Delta^r | P_T P_N \text{BCS} ; \Delta^s \rangle \right] f(\Delta^r) = 0
 \tag{6.17}$$

que pode ser tratada em dois passos. Em primeiro lugar diagonalizamos a função de superposição, de tal forma que a expressão acima possa ser transformada na forma comum de equação secular, facilmente manuseável. Os valores numéricos para a equação acima serão dei

xados para uma outra parte desta tese.

Antes de terminarmos este capítulo vamos resumidamente discutir a validade da aproximação de simetria axial para os estados excitados, hipótese da qual partimos para obter as fórmulas (6.7) e (6.11). Como a nossa função de onda é a superposição de estados simétricos de carga em núcleos vizinhos, esperamos que o modelo atual possa explicar os estados  $0^+$  com esta simetria de carga. Esperamos também que os resultados sejam melhores para os estados mais baixos de  $T = 0$  e  $T = 2$  com  $N$  par,  $T = 1$  e  $T = 3$  com  $N$  ímpar pois estão próximos a núcleos auto-conjugados. Como mostraremos mais tarde em modelos semi-realísticos, se compararmos o nosso modelo com aquele de três coordenadas geradoras ( $\Delta_{\pi\pi}$ ,  $\Delta_{\nu\nu}$ ,  $\Delta_{\pi\nu}$ ), os nossos resultados parecem ser favoráveis para  $T = 0$ . Isto é facilmente compreendido, pois estes estados só existem em núcleos auto-conjugados, onde a simetria axial deve prevalecer mesmo para estados excitados. Por esta mesma razão esperamos que o nosso modelo descreva bem os estados de vibração de emparelhamento.

No limite de rotação de emparelhamento a energia de nosso sistema de acordo com a equação (5.4.30) é aproximadamente proporcional a  $T(T+1)$  implicando que energia do nosso sistema é próxima ao axialmente simétrico. Entretanto ulteriores investigações da presente aproximação são necessárias para chegarmos a conclusões definitivas da natureza dos estados de senioridade zero.

Cálculos extensivos de uma série de estados  $0^+$  em núcleos e sua comparação com a experiência podem trazer alguma luz sobre os limites deste nosso modelo. Mas uma limitação já deve ser enfatizada, que é a nossa impossibilidade de atingir os estados diferentes de simétricos de carga.

7 - Expressões analíticas do fator espectroscópico para reações de transferência de duas partículas dentro do presente modelo.

### 7.1 - Introdução

A partir do reconhecimento de propriedades de simetria em uma classe de funções de onda tipo BCS, elaboramos nos capítulos anteriores, expressões analíticas que com técnicas variacionais pode descrever os estados coletivos de emparelhamento isovetorial  $0^+$ . Assim uma vez determinado os autovalores é fácil obter as funções de onda em termos dos parâmetros variacionais.

Estas funções de onda, que podem ser testadas em seguida ao calcularmos quantidades relacionadas, tais como probabilidade de ocupação e taxas de transição entre dois estados vizinhos de núcleos vizinhos, são expressas no caso axialmente simétrico da seguinte forma:

$$|\phi_{NT}\rangle = \frac{\int_0^\pi d\beta \sin\beta P_T(\cos\beta) \int_0^{2\pi} d\theta e^{-iN\theta} |BCS(\theta, \beta)\rangle}{\left[ \frac{2\pi H}{2} \sum_{n=1}^N C_n \mathcal{G}_T(n) \right]^{\frac{1}{2}}} \quad (7.1.1)$$

onde  $C_n$  e  $\mathcal{G}_T(n)$  estão expressos respectivamente em (5.4.21) e (5.4.22) e a função de onda de BCS  $|BCS(\theta, \beta)\rangle$  rodada é escrita como:

$$|BCS(\theta, \beta)\rangle = \prod_{j>0} (u_j^2) \prod_{j>0} \left\{ \exp \left[ e^{i\alpha} \sin\beta S_{jm} c_{jm}^+ c_{j-m}^+ + \cos\beta S_{jm} [c_{jm}^+ c_{j-m}^+ + c_{j-m}^+ c_{jm}^+] - e^{-i\alpha} \sin\beta S_{jm} c_{jm}^+ c_{j-m}^+ \right] \right\}^{\frac{e^{i\theta} v_j}{u_j}} |0\rangle \quad (7.1.2)$$

Esta função de onda escrita em forma integral por não en contrarmos outra alternativa, poderia ser um empecilho para chegar as quantidades relacionadas. Entretanto dentro de nosso esquema o cálculo da probabilidade de ocupação e taxas de transição é sim ples e imediato. Basta, como veremos usar um procedimento semelhan te ao que foi feito para dedução da fórmula da energia.

Já efetuamos o cálculo da probabilidade de ocupação no capítulo 5. Neste capítulo limitaremos-nos na dedução do fator es pectroscópico (secção 8.3), apresentando fórmulas simples em ter mos dos parâmetros variacionais, mas antes na secção 8.2 discuti remos em que contexto ele aparece na teoria das reações de trans ferência de um par.

## 7.2 - Informações sobre a estrutura nuclear a partir de rea ções de transferência de um par

Sabe-se muito bem que as reações nucleares fornecem mui tas informações sobre a estrutura nuclear. Em particular, as rea ções nucleares diretas que afetam poucos graus de liberdade do nú cleo alvo, são convenientes para análise de estados caracterizados por excitações simples, tais como os estados nucleares mais bai xos.

Assim, diferentes tipos de reações examinam diferentes modos de excitação. Por exemplo, uma importante característica da reação é a coerência ou a incoerência das contribuições de partícu las independente da reação. A reação estão excitará intensamente modos coletivos e de partícula independente. O primeiro caso ocor re em espalhamentos inelásticos e em certos tipos de reações de transferência de dois nucleons, enquanto que o segundo é caracte rístico de reações de transferência de um nucleon.

A teoria de reações nucleares diretas mostra que em muitos casos é possível escrever a secção de choque diferencial como um produto de dois fatores

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \beta \cdot G(\theta) \quad (7.2.3)$$

onde  $G(\theta)$  descreve a forma de distribuição angular como função do ângulo de espalhamento e  $\beta$  mede a magnitude absoluta da secção de choque. Em muitos casos encontra-se que a forma de  $G(\theta)$  é quase insensível aos detalhes da estrutura nuclear, ficando para a quantidade  $\beta$  denominada fator espectroscópico as informações dos estados finais e iniciais do núcleo em questão.

Normalmente esta informação é extraída das medidas de secção de choque absoluta e dos cálculos da distribuição angular por alguma aproximação, que pode ser por exemplo, a aproximação de Born de ondas distorcidas (DWBA). O fator é determinado normalizando-se os resultados experimentais e calculados. Os valores obtidos podem ser finalmente comparados aos calculados a partir de modelos nucleares adequados.

Vamos apenas considerar neste trabalho as reações diretas do tipo  $A(a,b)B$  onde as partículas  $a$  e  $b$  diferem de duas unidades. As diferentes espécies de reações de transferência de duas partículas estão consideradas na tabela a seguir:

| "Partículas" transferida | Varição de Isospin $\Delta T$ | Adição                  | Remoção                   |
|--------------------------|-------------------------------|-------------------------|---------------------------|
| ${}^2_n$ ou ${}^2_{He}$  | 1                             | (t,p) ( ${}^3_{He},n$ ) | (p,t) ; (n, ${}^3_{He}$ ) |
| d ou ${}^2_H$            | 0,1                           | (t,n) ( ${}^3_{He},p$ ) | (n,t) (p, ${}^3_{He}$ )   |
| d                        | 0                             | ( $\alpha$ ,d)          | (d, $\alpha$ )            |

TABELA 7.1.- *Reações de transferência de um par.*

Da mesma forma que as reações de transferência de uma partícula, as de duas também são caracterizadas pelo momento angular orbital transferido. No caso de transferência de um nucleon, o momento angular é carregado pelo nucleon e a intensidade da reação é proporcional a probabilidade que o nucleon tenha aquele momento angular no estado nuclear. Mas no caso de transferência de dois nucleons as diferentes configurações de dois nucleons podem contribuir para um determinado momento angular transferido. A coerência resultante pode levar a transições intensas para os níveis que são construtivos, isto é baseado nas correlações introduzidas pelo acoplamento de momento angular e a interação residual nucleon - nucleon. A interação residual é responsável pela mistura de configurações nas funções de onda e conseqüentemente as reações de transferência de um par fornecem um meio de estudo das funções de onda nucleares em pormenores não acessíveis a reações de transferência de uma partícula.

É bem conhecido que a secção de choque para reações de transferência de um nucleon pode ser fatorizado em duas partes; u

ma contém informações sobre a estrutura nuclear e a outra depende da cinemática. Para reações nucleares de transferência de um par tal fatorização nem sempre é possível, este fato deve-se aos problemas de coerência mencionados anteriormente. Entretanto Glendenning (1965) mostrou que para a transferência do momento angular relativo  $L = 0$  a secção de choque pode ser colocada na seguinte forma:

$$G_{i \leftrightarrow f}^{(L=0)} = \left| \sum_S G_S(i,f) G_S^{DWBA}(\theta) \right|^2 \quad (7.2.4)$$

$G_S(i,f)$  é um termo que aparece da expansão da parte radial da amplitude da reação na base do oscilador harmônico e depende apenas da estrutura nuclear. Para a reação de nosso interesse pode ser escrito como:

$$G_S(i,f) = \sum_{\substack{n l_j \\ M=2n+l-S}} \beta_j (-)^{l+T_f-M_{T_f}} \Lambda_M \begin{pmatrix} T_f & 1 & T_i \\ M_{T_f} & \mu & M_{T_i} \end{pmatrix} \sqrt{\frac{\Omega_j}{2\Omega_l}} \langle m_0, s_0, 0 | n l, n l, 0 \rangle \quad (7.2.5)$$

onde  $T_f(T_i)$  é o isospin do estado final(inicial),  $\mu = \pm 1$  refere-se a tipo de par  $\pi\pi$  ou  $\omega\omega$  que está sendo transferido  $M$  é o número quântico radial do movimento relativo das duas partículas transferidas,  $S$  é o do movimento do centro de massa  $\langle m_0, s_0, 0 | n l, n l, 0 \rangle$  é a transformação de Moshinsky e  $\Lambda_M$  é a integral de superposição do movimento relativo na partícula incidente ( $^3\text{He}$  ou  $t$ ) e no núcleo,  $G^{DWBA}$  é a secção de choque reduzida. Finalmente  $\beta_j$  é a amplitude de espectroscópica que calcularemos na secção seguinte.

7.3 - O fator espectroscópico de reações de transferência de um par dentro do presente modelo.

Usando as propriedades de simetria axial que encontramos no capítulo 5 vamos obter nesta secção as expressões analíticas para as amplitudes espectroscópicas de reações de transferência de um par.

Para calcular as taxas de transição de reações de transferência de um par  $j^2$  acoplado a um momento angular total, paridade  $J = 0^+$  e isospin  $T = 1$  precisamos obter a quantidade  $\beta_j$  da equação (7.2.5), que é o elemento de matriz reduzido do operador de criação de pares conhecido também por fator espectroscópico ou amplitude espectroscópica

$$\beta_j = \frac{1}{\sqrt{2T_f+1}} \langle \Phi_{T_f, N+1} \| A_j^+ \| \Phi_{T_i, N} \rangle \quad (7.3.1)$$

onde o índice  $f(i)$  se refere ao estado final (inicial) de um sistema com  $N+1(N)$  pares de nucleons.  $A_{j0}^+$  é o operador tensorial irreduzível de criação de um par com três componentes expressos por:

$$A_{j0}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ c_j^+ \otimes c_j^+ \right]_{M=0}^{J=0, T=1, M_T=0} \quad (7.3.2)$$

daqui em diante usaremos a notação  $|\phi_{NT}\rangle$  para a função de onda de tipo BCS projetada em  $N$  e  $T$ , ou seja:

$$|\phi_{NT}\rangle = \frac{\hat{P}_T \hat{P}_N |\phi\rangle}{\langle \phi | \hat{P}_T \hat{P}_N | \phi \rangle^{\frac{1}{2}}} \quad (7.3.3)$$

Para calcular (7.3.1) obtem-se em primeiro lugar o seguinte elemento de matriz entre dois estados projetados  $\langle \phi_{T_f, N+1} | A_{j0}^+ | \phi_{T_i, N} \rangle$  que denotamos por  $\delta_j(T_f, N+1, T_i, N)$ . Escre

vendo a função de onda projetada em termos das integrais de projeção (5.1.8) e (5.1.9) temos:

$$\mathcal{D}_j(\tau_f, N+1, \tau_i, N) = c_{\tau_f} c_{\tau_i} \sum \int d\Omega' \int d\Theta' \int d\Omega \int d\Theta D_{M_{\tau_f} k'}^{T_f(\Omega')} D_{M_{\tau_i} k}^{T_i(\Omega)} e^{i(N+1)\Theta'} e^{iN\Theta} \langle \phi_f | \hat{R}^+(\Omega') \hat{S}^+(\Theta') A_{j0}^+ S(\Theta) \hat{R}(\Omega) | \phi_f \rangle \quad (7.3.4)$$

$$e \quad c_{\tau_f} c_{\tau_i} = \frac{(2T_f+1)}{46\pi^3} \frac{(2T_i+1)}{46\pi^3} \left[ \langle \phi_f | \hat{P}_{T_f} \hat{P}_{N+1} | \phi_f \rangle \langle \phi_i | \hat{P}_{T_i} \hat{P}_N | \phi_i \rangle \right]^{\frac{1}{2}} \quad (7.3.5)$$

e  $\hat{R}(\Omega)$  e  $\hat{S}(\Theta)$  são os operadores de rotação no espaço de i spin e "gauge" respectivamente, dados em (3.2.6) e (3.2.7) como:

$$\begin{aligned} \hat{R}(\Omega) &= \exp(i\alpha \hat{T}_3) \exp(i\beta \hat{T}_y) \exp(i\gamma \hat{T}_y) \\ \hat{S}(\Theta) &= \exp(i\hat{N}\Theta) \end{aligned} \quad (7.3.6)$$

Não esqueçamos que no momento  $\hat{e}$  considerado o caso mais geral, ou seja, por enquanto nenhuma propriedade especial está sendo usada para a função de onda. Isto acontecerá mais tarde quando aplicarmos as fórmulas obtidas para os casos de maior interesse físico.

Para obter  $\mathcal{D}_j(\tau_f, N+1, \tau_i, N)$  observe que o operador não comuta com os operadores  $\hat{R}(\Omega)$  e  $\hat{S}(\Theta)$  como o operador hamiltoniano  $\hat{H}$ , mas possui as seguintes propriedades

$$\begin{aligned} S^+(\Theta') A_{j\nu}^+ &= e^{-i\Theta'} A_{j\nu}^+ \hat{S}^+(\Theta') \\ R^+(\Omega) A_{j\nu}^+ &= \sum_{\mu=0, \pm 1} A_{j\mu}^+ D_{\nu\mu}^+(\Omega) \hat{R}^+(\Omega) \end{aligned} \quad (7.3.7)$$

estas propriedades fazem com que (7.3.4) torne-se da seguinte forma

$$\mathcal{D}_j(T_f N+1, T_i N) = C_{T_f} C_{T_i} \sum \int d\Omega' \int d\theta' \int d\Omega \int d\theta D_{M_{T_f} K'}^{T_f}(\Omega') D_{\mu_j}^{T_i^*}(\Omega') D_{M_{T_i} K}^{T_i^*}(\Omega) e^{iN(\theta'-\theta)}$$

$$\langle \phi_f | A_{j\mu}^+ \hat{R}^+(\Omega') \hat{R}(\Omega) \hat{S}^+(\theta') \hat{S}(\theta) | \phi_i \rangle \quad (7.3.8)$$

que com auxílio das propriedades da matriz R e dos operadores  $\hat{R}$  e  $\hat{S}$  fica simplesmente:

$$\mathcal{D}_j(T_f N+1, T_i N) = C_{T_f} C_{T_i} \sum \int d\Omega'' \int d\theta'' (-)^{M_{T_f} - K} \begin{pmatrix} T_f & 1 & T_i \\ -M_{T_f} & \nu & M_{T_i} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_f & 1 & T_i \\ -K' & \mu & \xi \end{pmatrix} D_{\xi K}^{T_i^*}(\Omega'') e^{-iN\theta''}$$

$$\langle \phi_f | A_{j\mu}^+ \hat{R}(\Omega'') \hat{S}(\theta'') | \phi_i \rangle \quad (7.3.9)$$

Identificando este resultado com o elemento de matriz reduzido de  $\mathcal{D}_j(T_f N+1, T_i N)$  e usando adicionalmente as propriedades de ortogonalidade dos coeficientes de Clebsch-Gordon e a regra de seleção deste coeficientes temos:

$$\mathcal{B}_j = \frac{C_{T_f} C_{T_i}}{\sqrt{2T_f+1}} \sum_{kk'\mu} \int d\theta \int d\Omega e^{-iN\theta} (-)^{T_f - K'} \begin{pmatrix} T_f & 1 & T_i \\ -K' & \mu & K' - \mu \end{pmatrix} D_{K' - \mu, K}^{T_i^*}(\Omega)$$

$$\langle \phi_f | A_{j\mu}^+ \hat{R}(\Omega) \hat{S}(\theta) | \phi_i \rangle \quad (7.3.10)$$

ou, lembrando a definição de  $A_{j\mu}^+$  como

$$A_{j\mu}^+ = \sqrt{\frac{1}{2}\Omega_j} \sum_{tm} \left( \frac{1}{2} t \frac{1}{2} t' | 1 \mu \right) (j m j - m | 0 0) C_{j m t}^+ C_{j -m t'}^+ \quad (7.3.11)$$

temos:

$$\beta_j = \frac{2T_f + 1}{4\pi^3} C_{T_f} C_{T_i} \sqrt{(2T_f + 1)\Omega_j} \sum_{\substack{\kappa \kappa' \mu = 0, \pm 1}} (-)^{T_f - \kappa'} \begin{pmatrix} T_f & 1 & T \\ -\kappa' & \mu & \kappa \end{pmatrix} \int d\theta e^{-iN\theta} \times$$

$$\int d\Omega \left\{ D_{\kappa' - \mu, \kappa}^{T_i^*}(\Omega) n_{fi}(\Omega, \theta) \left\{ [G_{\pi\pi}^j]_{fi} \delta_{\mu 1} + [G_{\sigma\sigma}^j]_{fi} \delta_{\mu - 1} + \right. \right.$$

$$\left. \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ [G_{\pi\sigma}^j]_{fi} + [G_{\sigma\pi}^j]_{fi} \right] \delta_{\mu 0} \right\} \quad (7.3.12)$$

onde usamos a notação já definida anteriormente (4.3.5) e

(5.3.2) dados respectivamente como:

$$[G_{tt}^j]_{fi} = \frac{\langle \phi_f | C_{jmt}^+ C_{j-mt}^+ \hat{R}(\Omega) \hat{S}(\theta) | \phi_i \rangle}{\langle \phi_f | \hat{R}(\Omega) \hat{S}(\theta) | \phi_i \rangle} \quad e \quad (7.3.13)$$

$$[n(\Omega, \theta)]_{fi} = \langle \phi_f | \hat{R}(\Omega) \hat{S}(\theta) | \phi_i \rangle \quad (7.3.14)$$

Novamente estamos em um ponto onde é possível divergir do método que calcula numericamente a expressão (7.3.12). Em vez de transformar a integral acima em uma soma, vamos abordar o problema analiticamente. Reconhecendo semelhanças na estrutura da expressão acima com a equivalente da energia (5.1.11) e (5.1.12), podemos usar as mesmas técnicas já aplicadas, isto é, substituindo em em (7.3.12) os elementos de matriz do tensor emparelhamento  $[G_{t_1 t_2}^j]_{fi}$  de (5.2.3), que reescrevemos em seguida ligeiramente modificado por questão de conveniência:

$$\begin{aligned}
[G_{tt'}^j]_{fi} = \frac{1}{\det x_j^{fi}} & \left\{ [E_{\phi_0}^j]_i [E_{tt'}^j]_f - [E_{\phi_0}^j]_i [E_{tt'}^j]_f e^{i\theta} \cos \beta \delta_{\bar{t}\bar{t}'} + \right. \\
& [E_{\phi_4}^j]_f e^{i\theta} e^{2it\alpha} \left[ [E_{\bar{t}\bar{t}}^j]_i e^{2i\bar{t}\bar{t}\alpha} \cos^2 \frac{\beta}{2} + [E_{\bar{t}\bar{t}}^j]_i e^{2i\bar{t}\bar{t}\alpha} \sin^2 \frac{\beta}{2} \right] + \\
& \left. t [E_{\phi_0}^j]_i e^{i\theta} \left[ [E_{\bar{t}\bar{t}}^j]_f e^{2i\bar{t}\bar{t}\alpha} - [E_{\bar{t}\bar{t}}^j]_f e^{2i\bar{t}\bar{t}\alpha} \right] \sin \beta \delta_{\bar{t}\bar{t}'} + 2t [E_{\phi_4}^j]_i [E_{\bar{t}\bar{t}}^j]_i e^{i\theta} e^{2i\bar{t}\bar{t}\alpha} \sin \beta \delta_{\bar{t}\bar{t}'} \right\}
\end{aligned}
\tag{7.3.15}$$

e aplicando as adequadas expansões multinomiais podemos calcular as integrais multidimensionais. Portanto uma vez determinada a energia formalmente temos também o fator espectroscópico.

Mas restringiremo-nos como no capítulo 5 apenas aos casos de maior interesse físico ou seja o axialmente simétrico. Para este caso podemos tomar os resultados do tensor emparelhamento já simplificados de (5.4.12) também modificadas a saber:

$$[G_{rr}^j]_{fi} = \frac{v_j^f u_j^i}{\det x_j^{fi}} v_j^f v_j^i e^{-i\alpha} \sin \beta \tag{7.3.16a}$$

$$[G_{\theta\theta}^j]_{fi} = \frac{v_j^f u_j^i}{\det x_j^{fi}} v_j^f v_j^i e^{i\alpha} \sin \beta \tag{7.3.16b}$$

$$[G_{r\theta}^j]_{fi} = \frac{v_j^f u_j^i}{\det x_j^{fi}} [u_j^f u_j^i + v_j^f v_j^i e^{i\theta} \cos \beta] \tag{7.3.16c}$$

$$[G_{\theta r}^j]_{fi} = [G_{r\theta}^j]_{fi} \tag{7.3.16d}$$

Substituindo estes termos em (7.3.12) intui-se que a integral pode complicar conforme vimos na secção 5.3 quando temos os

três ângulos de Euler, mas isto não ocorrerá para este caso, como veremos em seguida.

Lembremos em primeiro lugar que a função superposição  $[n(\Omega, \theta)]_{fi}$  depende no caso presente caso apenas de  $\beta, \theta$  de pois que a representação da matriz  $D$  de Wigner é separada nos diversos ângulos de Euler como:

$$D_{k'k}^T(\alpha\beta\gamma) = e^{ik'\alpha} d_{k'k}^T(\beta) e^{ik\gamma} \quad (7.3.17)$$

que inserido em  $\beta_j$  o termo  $D_{k'-\mu}^{T*}(\Omega) [\sigma_{t_i, t_e}]_{fi} [n(\Omega, \theta)]_{fi}$

de (7.3.12) é o produto de  $e^{iK\gamma} e^{i(K' - 2\mu)\alpha}$  e outras funções dependentes de  $\beta$  e  $\theta$ . Depois de efetuada a integral em  $\alpha$  e  $\gamma$  teremos apenas as funções  $\delta_{k,0}$  e  $\delta_{k,2\mu}$ . Isto fornece uma forma conveniente de simplificar a expressão (7.3.12) projetando simplesmente em  $K$  e  $K'$  mesmo antes de efetuar a integral. Ficando (7.3.12) como:

$$\beta_j = \frac{2T_f + 1}{16\pi^3} C_{T_f} C_{T_i} \sqrt{(2T_f + 1)\Omega_j} \int d\Omega \int d\theta e^{-iN\theta} \eta^{fi}(\Omega, \theta) \frac{u_j^i v_j^t}{\det x^{fi}} (-)^{T_f} \left\{ \begin{aligned} & \begin{pmatrix} T_f & 1 & T_i \\ 0 & 1 & -1 \end{pmatrix} D_{-10}^{T_i*}(\Omega) v_j^t v_j^i e^{i\theta} e^{-i\alpha} \sin\beta + \begin{pmatrix} T_f & 1 & T_i \\ 0 & -1 & 1 \end{pmatrix} D_{10}^{T_i*}(\Omega) v_j^t v_j^i e^{i\theta} e^{i\alpha} \sin\beta + \\ & \begin{pmatrix} T_f & 1 & T_i \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} D_{00}^T(\Omega) \frac{2}{\sqrt{2}} [u_j^t u_j^i + v_j^t v_j^i e^{i\theta} \sin\beta] \end{aligned} \right\} \quad (7.3.18)$$

Com os coeficientes de Clebsh-Gordon simplificados em razão do artifício que mencionamos, tentemos melhorar mais ainda a ex

pressão acima levando em conta que:

$$D_{\mu 0}^T(\alpha \beta \gamma) = (-)^{\mu} \frac{(\tau - \mu)!}{(\tau + \mu)!} (\sin \beta)^{\mu} \frac{d^{\mu} P_{\tau}(\cos \beta)}{d(\cos \beta)^{\mu}} e^{i\mu\alpha} \quad (7.3.19)$$

onde  $P_{\tau}(\cos \beta)$  é um polinômio de Legendre. Substituindo esta forma de  $D_{\mu 0}^T(\alpha \beta \gamma)$  em (7.3.18) e usando a relação de recorrência:

$$(1 - \cos^2 \beta) \frac{d P_{\tau}(\cos \beta)}{d(\cos \beta)} = (\tau + 1) [\cos \beta P_{\tau}(\cos \beta) - P_{\tau+1}(\cos \beta)] \quad (7.3.20)$$

e a propriedade de simetria dos coeficientes de Clebsh-Gordon e integrando em relação aos ângulos  $\alpha$  e  $\gamma$  chegamos a seguinte expressão mais simplificada em termos de  $\beta$  e  $\theta$ , ou seja:

$$\begin{aligned} \mathcal{B}_J = & \frac{2T_i + 1}{4\pi} C_{T_f} C_{T_i} \sqrt{(2T_f + 1)\Omega_j} u_j^i v_j^f (-)^{T_f} \left\{ \right. \\ & \left. \begin{pmatrix} T_f & 1 & T_i \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \int_0^{2\pi} d\theta e^{-in\theta} \int_0^{2\pi} d(\cos \beta) P_{T_i}(\cos \beta) \frac{\eta^{fi}(\beta, \theta)}{\det \chi_j^{fi}} [u_j^f u_j^i + v_j^f v_j^i e^{i\theta} \cos \beta] - \right. \\ & \left. \begin{pmatrix} T_f & 1 & T_i \\ 0 & 1 & -1 \end{pmatrix} \left[ \frac{T_i + 1}{T_i} \right]^{\frac{1}{2}} z v_j^f v_j^i \int_0^{2\pi} d\theta e^{-i(N-1)\theta} \int_0^{\pi} d(\cos \beta) [\cos \beta P_{T_i}(\cos \beta) - P_{T_i+1}(\cos \beta)] \frac{\eta^{fi}(\beta, \theta)}{\det \chi_j^{fi}} \right\} \quad (7.3.21) \end{aligned}$$

Expandindo todos os termos da expressão acima em forma de um polinômio em  $\beta$  e  $\theta$ , usando os mesmos artifícios de rearranjo de índices elaborados para se chegar a expressão da energia. integrando-se exatamente em  $\beta$  e  $\theta$  com auxílio da seguinte identidade para função isospin:

$$\mathcal{F}_{T+1}^{(n-1)} = \frac{n-T}{n} \mathcal{F}_T^{(n)} \quad (7.3.22)$$

Conseguimos a seguinte fórmula para amplitude espectrocópica, que envolve somente somatórias:

$$\beta_j = \frac{2T_i+1}{4\pi} \sqrt{\frac{(2T_i+1) x_{T_i} x_{T_i}}{\Omega_j}} (-)^{T_i} \frac{v_j^f}{u_j^f} \sum_{n=T_i}^N \left\{ W_n^{(1)} \begin{pmatrix} T_i & 1 & T_i \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + W_n^{(2)} \begin{pmatrix} T_i & 1 & T_i \\ 0 & 1 & -1 \end{pmatrix} [T_i(T_i+1)]^{\frac{1}{2}} \right\} \tilde{f}_{T_i}^{(n)} \quad (7.3.23)$$

onde

$$\tilde{f}_T^{(n)} = \frac{n! \Gamma\left(\frac{n-T+L}{2}\right)}{2^{T-1} (n-T)! (n+T+L) \Gamma\left(\frac{n+T+1}{2}\right)} \quad (7.3.24)$$

$$\chi_{T_i(T_f)} = \frac{1}{\sum_{n=T_i(T_f)}^{N(N+L)} \sum_{\substack{\ell_1+\ell_2+\dots+\ell_m=n \\ k_1+k_2+\dots+k_m=\frac{n+N}{2}}} [\Pi(F_j)]_{T_i(T_f)} \tilde{f}_{T_i(T_f)}^{(n)}} \quad (7.3.25)$$

$$W_n^{(1)} = \sum_{\substack{\ell_1+\ell_2+\dots+\ell_m=n \\ k_1+k_2+\dots+k_m=\frac{n+N}{2}}} \left\{ \Pi(F_j)_{f_i} \right\} \frac{[2(\Omega_j - k_j) + \ell_j]}{\sqrt{2}} \quad (7.3.26)$$

$$W_n^{(2)} = -\frac{L}{n} \sum_{\substack{\ell_1+\ell_2+\dots+\ell_m=n \\ k_1+k_2+\dots+k_m=\frac{n+N}{2}}} \left\{ \Pi(F_j)_{f_i} \right\} \ell_j \quad (7.3.27)$$

com

$$[F(j)]_{f_i} = \binom{\Omega_j}{k_j} \binom{k_j}{\ell_j} (v_j^f v_j^i)^{2(\Omega_j - k_j)} (u_j^f u_j^i)^{2(k_j - \ell_j)} (2 u_j^f u_j^i v_j^f v_j^i)^{\ell_j} \quad (7.3.28)$$

Esta última expressão é a nossa forma final da amplitude espectrocópica para reações de transferência de pares. Assim, calculada a energia do sistema por meio de técnicas variacionais,

tais como PBCS ou FBCS, os coeficientes  $u_j$ 's e  $v_j$ 's tornam-se conhecidos e a partir destes resultados podemos obter as taxas de transição ou mesmo as secções de choque teóricas de acordo com (7.3.1) e (7.2.4). Apesar facilidades dos cálculos, o nosso esquema sofre a restrição de poder calcular apenas a amplitude espectroscópica apenas entre estados simétricos de carga. Explicando melhor, como as funções de onda de BCS axialmente simétricas apresentam apenas estados simétricos de carga e a transição  $T \rightarrow T$  está além do presente trabalho e as outras duas que podemos atacar são:

$$T_f = T_i + 1$$

$$T_f = T_i - 1$$

Aqui como no caso da energia podemos usar a vantagem de possuir expressões analíticas para a amplitude espectroscópica e fazer uma ilustração para o limite de acoplamento forte. Neste limite os coeficiente de  $W_n^+(y)$  e  $W_n^-(y)$  em (7.3.23) são:

$$W_n^+(y) = [F(y)]_f [2\Omega_j - N] \quad W_n^-(y) = - [F(y)]_f \quad (7.3.29)$$

Para o caso  $T_f = T_i + 1$  onde fizemos  $T = T_i$ , os coeficientes de normalização para os núcleo final  $\chi_{T+1}$  e inicial  $\chi_T$  são dados respectivamente por:

$$\chi_{T+1} = \left\{ \frac{2T+3}{2} \sum_{n=T+1}^{N+1} [C_n]_f \mathcal{F}_{T+1}^{(n)} \right\} \quad \chi_T = \left\{ \frac{2T+1}{2} \sum_{n=T}^N [C_n]_i \mathcal{F}_T^{(n)} \right\} \quad (7.3.30)$$

$$\text{onde } [C_n]_f = (u_j^f)^{2(2\Omega_j - N - 1)} (v_j^f)^{2(N+1)} \binom{\Omega_j}{\frac{n+N+1}{2}} \binom{\frac{n+N+1}{2}}{n} (2)^n \quad (7.3.31)$$

$$[C_n]_i = (\mu_j^i)^{2(2\Omega_j - N)} (\nu_j^i)^{2N} \binom{\Omega_j}{\frac{n+N}{2}} \binom{\frac{n+N}{2}}{n} (2)^n \quad (7.3.32)$$

e

$$[F_{ij}]_{fi} = (\mu_j^f \mu_j^i)^{2\Omega_j - N} (\nu_j^f \nu_j^i)^N \binom{\Omega_j}{\frac{n+N}{2}} \binom{\frac{n+N}{2}}{n} (2)^n \quad (7.3.33)$$

Substituindo as expressões (7.3.29) à (7.3.33) em (7.3.23) obtemos:

$$\beta_j = (2\Omega_j - N - T) \sqrt{\frac{(T+1)}{2\Omega_j(2T+3)}} y \quad (7.3.34)$$

onde

$$y = \left[ \frac{\sum_{n=T}^N \binom{\Omega_j}{\frac{n+N}{2}} \binom{\frac{n+N}{2}}{n} (2)^n \mathcal{J}_T(n)}{\sum_{n=T+1}^{N+1} \binom{\Omega_j}{\frac{n+N+1}{2}} \binom{\frac{n+N+1}{2}}{n+1} (2)^n \mathcal{J}_{T+1}(n)} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (7.3.35)$$

do qual vemos que a dependência nos parâmetros desaparecem como no caso da energia, e o resultado acima pode ser o exato:

$$\beta_j = \sqrt{\frac{(T+1)(2\Omega_j - N - T)(T+N+3)}{2\Omega_j(2T+3)}} \quad (7.3.36)$$

obtido por Hecht (1965). No caso de  $T = N$  temos apenas um termo na somatória em (7.3.35) simplificando a expressão para:

$$y = \left[ \frac{\binom{\Omega_j}{N} \binom{N}{N} 2^N \mathcal{J}_N(N)}{\binom{\Omega_j}{N+1} \binom{N+1}{N+1} 2^{N+1} \mathcal{J}_{N+1}(N+1)} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (7.3.37)$$

usando a seguinte relação entre as funções isospin ( 5.4.21 )

$$F_{NH}^{(N+1)} = \frac{N+1}{2N+3} F_N^{(N)} \quad (7.3.38)$$

e simplificando obtemos  $y = \sqrt{\frac{2N+3}{2\Omega_3 - 2N}}$ , reproduzindo o resultado exato. A afirmação continua válida para  $T = N - 2$  onde  $y = \sqrt{(2N+1)/(2\Omega_3 - 2N + 2)}$

Para os outros valores de  $T$  devemos usar o método de indução para provar que  $y = \sqrt{(T+N+3)/(2\Omega_3 - N - T)}$  com qualquer valor de  $T$ . Entretanto não insistiremos nesta prova pois estamos satisfeitos com a verificação dos casos acima e também com testes numéricos.

Até aqui consideramos somente amplitudes espectroscópicas entre estados fundamentais  $Y_{rast}$  de Isospin, ou seja podemos tratar teoricamente as reações altamente populadas de tipo  $^{58}\text{Ni}(p,t)^{56}\text{Ni}$ , onde o par removido tem momento angular e paridade  $J = 0^+$ . Entretanto verifica-se experimentalmente que alguns dos estados  $0^+$  do  $^{56}\text{Ni}$  também são altamente populados, isto é, apresentam secções de choque da mesma ordem de grandeza das transições entre estados fundamentais. Portanto é conveniente elaborar expressões para amplitudes espectroscópicas, a partir de funções de onda que descrevem estados excitados. Pode-se desenvolver facilmente esta linha de trabalho, supondo que estes estados sejam axialmente simétricos e usar o método de coordenadas geradoras descrito no capítulo anterior. Uma vez a seguinte função de onda de GCM

$$|\Psi\rangle = N_T \int f(\Delta) |\Phi_{NT}(\Delta)\rangle d\Delta \quad (7.3.39)$$

com  $N_T = \left[ \iint f(\Delta^r) f(\Delta^s) \langle \Phi_{NT}(\Delta^r) | \Phi_{NT}(\Delta^s) \rangle d\Delta^r d\Delta^s \right]^{-\frac{1}{2}}$  ou equivalente

a função peso  $f(\Delta)$  seja obtida. É imediato o cálculo de taxas de transição, se lembrarmos da seguinte relação:

$$\beta_j = \frac{N_{T_f} N_{T_i}}{\sqrt{2T_f + 1}} \iint f(\Delta_f) f(\Delta_i) \langle \Phi_{T_f, N+1}(\Delta_f) \| A_j^+ \| \Phi_{T_i, N}(\Delta_i) \rangle \quad (7.3.40)$$

onde no caso da transição  $T \rightarrow T + 1$  temos:

$$\langle \Phi_{T+1, N+1}(\Delta_f) \| A_j^+ \| \Phi_{T, N}(\Delta_i) \rangle = \sqrt{\frac{(2T+3)(2T+1)(T+1)}{8\Omega_j}} \times \frac{v_j^f}{\mu_j^f} \times \sum_{n \neq T}^N \left\{ [W_n^1(j)]_{fi} - T [W_n^2(j)]_{fi} \right\} \quad (7.3.41)$$

com

$$[W_n^1(j)]_{fi} = \sum_{\substack{l_1 + l_2 + \dots + l_m = n \\ k_1 + k_2 + \dots + k_m = \frac{n+N}{2}}} \prod_j \left[ \begin{pmatrix} \Omega_j \\ k_j \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k_j \\ l_j \end{pmatrix} (\mu_j^f \mu_j^i)^{2(\Omega_j - k_j)} (v_j^f v_j^i)^{2(k_j - l_j)} (2\mu_j^f \mu_j^i v_j^f v_j^i)^{l_j} \right] \times [2(\Omega_j - k_j) + l_j] \quad (7.3.42)$$

e

$$[W_n^2(j)]_{fi} = -\frac{1}{n} \sum_{\substack{l_1 + l_2 + \dots + l_m = n \\ k_1 + k_2 + \dots + k_m = \frac{n+N}{2}}} \prod_j \left[ \begin{pmatrix} \Omega_j \\ k_j \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k_j \\ l_j \end{pmatrix} (\mu_j^f \mu_j^i)^{2(\Omega_j - k_j)} (v_j^f v_j^i)^{2(k_j - l_j)} (2\mu_j^f \mu_j^i v_j^f v_j^i)^{l_j} \right] l_j \quad (7.3.43)$$

Similarmente na reação  $T \rightarrow T - 1$  temos:

$$\langle \phi_{T-L, N+L}(\Delta_f) || A_j^+ || \phi_{TN}(\Delta_i) \rangle = \sqrt{\frac{(2T+1)(2T-1) T}{8\Omega_j}} \frac{V_j^f}{u_j^f} (-)^{2T-1} \sum_{n=T}^N \left\{ [\omega_{n^{(j)}}^1]_{fi} + [T+1] [\omega_n^2]_{fi} \right\} \quad (7.3.44)$$

Se tivéssemos a função peso  $f(\Delta)$  através da solução analítica da equação integral de GHW poderíamos eventualmente chegar a expressões adequadas para amplitude espectroscópica também para estados excitados, pois temos em mãos os elementos de matriz reduzido. Mas impossibilitado de seguir este desafiante caminho, vamos como consequência da solução numérica da equação integral de GHW transformar a integral em uma soma, onde  $f(\Delta)$ 's são dados ao resolvermos (6.17).

Assim se a equação integral for transformada em uma de três pontos, a solução da equação de GHW nos fornecerá três conjuntos de  $f(\Delta)$ 's, correspondentes a função de onda aproximada do estado fundamental e de dois estados excitados. Substituindo estes conjuntos de  $f(\Delta)$ 's em (7.3.40) podemos obter as amplitudes espectroscópicas de nosso interesse, ou seja do estado fundamental para os estados excitados.

Depois de longas e tediosas deduções de expressões analíticas para energias de BCS projetadas e taxas de transição entre estados coletivos isovetoriais de emparelhamento, estamos em condições de colher os frutos dos instrumentos que elaboramos, aplicando-os a modelos simples e núcleos, que será feito nas páginas seguintes.

8 - Resultados e Discussões

8.1 - Introdução

Nos capítulos 5, 6 e 7, que formam a parte central desta tese, desenvolvemos um instrumento poderoso para estudar os movimentos coletivos de emparelhamento isovetoriais. Neste tratamento a equação de Schroedinger dos estados  $0^+$  com N e T definidos é reduzida, a partir do reconhecimento de certas propriedades de simetria nas funções de onda tipo BCS, à solução da seguinte equação variacional:

$$\delta E_{NT} = 0 \quad (8.1.1)$$

$$\text{com } E_{NT} = \frac{\iint d\Delta^r d\Delta^s f(\Delta^r) f(\Delta^s) \langle P_T P_N \text{BCS}(\Delta^r) | \hat{H} | P_T P_N \text{BCS}(\Delta^s) \rangle}{\iint d\Delta^r d\Delta^s f(\Delta^r) f(\Delta^s) \langle P_T P_N \text{BCS}(\Delta^r) | P_T P_N \text{BCS}(\Delta^s) \rangle} \quad (8.1.2)$$

onde  $f(\Delta)$  é a função peso da função de onda tentativa dada como:

$$\Psi_{NT} = \int d\Delta f(\Delta) \hat{P}_T \hat{P}_N | \text{BCS}(\Delta) \rangle \quad (8.1.3)$$

onde  $\Delta$  representa coletivamente um conjunto de parâmetros conhecidos por coordenadas geradoras e a função de onda  $\hat{P}_T \hat{P}_N | \text{BCS}(\Delta) \rangle$  é a função de onda tipo BCS projetada. A expressão da energia média pode ser colocada de maneira simples se iniciarmos com uma classe de funções de onda tipo BCS que conserva a terceira componente da projeção em isospin, ou seja  $M_T = 0$ , ou seja:

$$\frac{\langle P_T P_N BCS | H | P_T P_N BCS \rangle}{\langle P_T P_N BCS | P_T P_N BCS \rangle} = -NG \sum_J \Omega_J + \frac{1}{2} G [N(N-3) + T(T+1)] \\ + \chi_T \sum_{n=T}^N [A_n + B_n T(T+1)] \mathcal{F}_T(n) \quad (8.1.4)$$

com

$$\chi_T = \frac{1}{\sum_{n=T}^N C_n \mathcal{F}_T(n)} \quad (8.1.5)$$

A função isospin é dada por:

$$\mathcal{F}_T(n) = \frac{n! \Gamma\left(\frac{n-T+1}{2}\right)}{2^{T-1} (n-T)! (n+T+1) \Gamma\left(\frac{n+T+1}{2}\right)} \quad (8.1.6)$$

sendo  $n = T, T+2, T+4, \dots, N$  e os coeficientes de isospin  $A_n, B_n$  e  $C_n$  das equações acima são escritos de uma forma extensa em termos dos coeficientes da transformação de Bogoliubov conforme (5.4.27), (5.4.28) e (5.4.22).

Uma vez (8.1.1) esteja resolvida, em outras palavras, a transformação de Bogoliubov determinada, podemos calcular as taxas de transição entre estados simétricos de carga com emparelhamento  $T = 1$  através da seguinte fórmula deduzida na secção (7.2).

$$\mathcal{T}_{\beta_j} = \frac{N_{T_f} N_{T_i}}{\sqrt{2T_f + 1}} \left( \int \int d\Delta_f d\Delta_i f(\Delta_f) f(\Delta_i) \langle P_{T_f} P_{N+1} BCS(\Delta_f) | A_j^+ | P_{T_i} P_N BCS(\Delta_i) \rangle \right) \quad (8.1.7)$$

onde

$$N_{T_f} = \left[ \int \int d\Delta_f^r d\Delta_f^s f(\Delta_f^r) f(\Delta_f^s) \langle P_{T_f} P_{N+1} BCS(\Delta_f^r) | P_{T_f} P_{N+1} BCS(\Delta_f^s) \rangle \right]^{-\frac{1}{2}} \quad (8.1.8)$$

e  $N_{T_i}$  é o coeficiente de normalização da função de onda de GCM inicial com N pares e isospin  $T_i$ .

Explicitamente para  $T_f = T_i + 1$  temos:

$$\langle P_{T_i+1} P_{N+1} \text{BCS}(\Delta_f) \| A_J^\dagger \| P_{T_i} P_N \text{BCS}(\Delta_i) \rangle = \sqrt{\frac{(2T+3)(2T+1)(T+1)}{8\Omega_J}} \frac{v_J^f}{u_J^f} \times \sum_{n=T}^N \left\{ [W_n^1(\zeta)]_{f_i} - T [W_n^2(\zeta)]_{f_i} \right\} g_T^{(n)} \quad (8.1.9)$$

e para  $T_f = T_i - 1$  temos:

$$\langle P_{T_i-1} P_{N+1} \text{BCS}(\Delta_f) \| A_J^\dagger \| P_{T_i} P_N \text{BCS}(\Delta_i) \rangle = \sqrt{\frac{(2T+1)(2T-1)T}{8\Omega_J}} \frac{v_J^f}{u_J^f} (-)^{2T-1} \times \sum_{n=T}^N \left\{ [W_n^1(\zeta)]_{r_s} + [T+1][W_n^2(\zeta)]_{r_s} \right\} g_T^{(n)} \quad (8.1.10)$$

Os coeficientes  $W_n^1(\zeta)$ ,  $W_n^2(\zeta)$  são fórmulas extensas encontradas respectivamente em (7.3.42) e (7.3.43).

Encontrar a solução da equação variacional (8.1.1) significa resolver a equação integral de Hill-Wheeler do já tradicional método de coordenadas geradoras (GCM). Se tomássemos a função peso  $f(\Delta)$  como função  $\delta$  de Dirac, teríamos um tratamento variacional conhecido por BCS fixo (FBCS). Se ainda utilizássemos os valores do parâmetro variacional  $\Delta$  do tratamento de BCS e colocássemos em (8.1.2), (8.1.3) e (8.1.4) os resultados seriam aqueles do método conhecido como BCS projetado (PBCS).

Estes três métodos juntamente com as expressões analíticas deduzidas anteriormente formam um conjunto de instrumentos

poderosos para calcular uma classe de estados coletivos isovetoriais de emparelhamento, em núcleos acima do  $^{40}\text{Ca}$ , que poderão ser confrontados com dados experimentais, tanto em energia como em secções de choque.

Entretanto este plano ambicioso não será desenvolvido nesta tese, a nossa ênfase é mais no sentido de estabelecer os instrumentos elaborados do que na sua ampla aplicação. Vamos mostrar a utilizabilidade do nosso modelo em vários experimentos numéricos e paralelamente expor as vantagens do nosso método sobre os outros similares existentes e também sobre cálculos tipo modelos de camadas (diagonalização exata). Por esta razão nenhuma tentativa será feita para calcular quantidades relevantes tais como secções de choque. A comparação de fatores espectroscópicos é suficiente para o nosso propósito.

Antes de entrar na descrição e discussão dos nossos resultados vamos enfatizar novamente que as eventuais perdas em informações físicas para obter fórmulas analíticas simples são compensadas pela exatidão e facilidade dos cálculos em confrontação ao dispendioso método anterior [Chen e outros 1978]. Em outras palavras o reconhecimento da simetria axial em funções de onda tipo BCS permitiu maior liberdade quanto aos sistemas atacáveis. Aqueles com isospin muito altos e muito baixos, com poucas e muitas partículas, com intensidades de força de emparelhamento  $G$  fraca ou muito forte. É talvez a maior vantagem do presente esquema, que é a possibilidade concreta de tratar o difícil problema que envolve mais de uma camada ou seja obter os estados Yrast de emparelhamento nas regiões de  $^{140}_{58}\text{Ce}$  ou  $^{90}_{40}\text{Zr}$ .

Nas páginas seguintes vamos relatar as diversas formas com que testamos a validade, a limitação e as vantagens do presente modelo. Em primeiro lugar comparamos os nossos resultados com os cálculos que não supõem propriedades simetria na função de onda

tipo BCS (secção 8.2). Em seguida vamos comparar com a solução exata em modelos simples tentando reproduzir o comportamento da energia e da secção de choque. Nesta mesma secção à 8.3 entramos em territórios em que os cálculos existentes, ou não efetuaram ou mesmo não podem ser alcançados. Por fim tentamos reproduzir os resultados de cálculos tipos modelos de camadas para núcleos vizinhos do  $^{56}\text{Ni}$  (secção 8.4), onde a maleabilidade do nosso modelo permite a investigação do truncamento do espaço modelo aumentando o número de níveis ativos. Ao mesmo tempo demonstramos a capacidade da presente abordagem efetuando cálculos com número de níveis ativos onde o poder de métodos tipo diagonalização exata são drasticamente enfraquecidos.

Antes de terminarmos esta introdução, faz-se necessário uma referência sobre o número de pontos e o intervalo entre eles, usados para se resolver a versão "discretizada" (6.18) da equação integral de GHW. A partir de uma experiência acumulada no caso de emparelhamento com nucleons idênticos [Faessler e colaboradores - 1973], aplicada e testada para nosso caso, usamos a receita de três pontos  $0.5\Delta$ ,  $\Delta$  e  $1.5\Delta$  onde adicionamos a condição que deve ser o mínimo de FBCS, ou seja,  $\Delta_{\text{FBCS}}$ .

## 8.2 - Comparação com o trabalho precedente

Com o objetivo de demonstrar a simplicidade de nosso modelo efetuamos cálculos com o método de coordenadas geradoras para núcleos semi-realísticos na camada fp. Tomamos 4 níveis ativos e as energias de partícula independente são tomados da experiência ligeiramente modificados de acordo com Kisslinger e Sorensen (1963). A intensidade da interação de emparelhamento é tomada como  $G = 24/A$  para o número de massa  $A = 48$  e  $A = 52$  que correspon

dem a 8 e 12 partículas ativas.

Os nossos resultados estão na tabela 8.1 comparados aos cálculos de Chen, Muther e Faessler (1978), mostram uma concordância satisfatória com o método exato e também com o tratamento precedente ao nosso, onde se usava em vez de uma única, três coordenadas geradoras. Além dessa simplificação, a hipótese da manutenção da simetria axial para estados excitados possibilitou o cálculo exato da integral de projeção, em contrapartida ao tratamento numérico do esquema anterior. Estas duas simplificações reduziram o tempo de processamento em cerca de 100 vezes. Enfatizemos que, nos cálculos onde a projeção em isospin e número é feita numericamente, a precisão da integração está associada ao tempo de processamento. Ou seja, para evitar flutuações deve-se escolher o maior número de pontos possíveis, conseqüentemente isto significa maior consumo de tempo de processamento. Algum tempo poderia ser ganho se soubéssemos escolher os pontos mais adequados. Por outro lado o esquema que ora apresentamos, não sofre este dilema pois a integral é resolvida exatamente.

Depois desta ligeira digressão podemos observar pelos resultados da tabela 8.1 que a simetria axial vale também para os estados excitados de  $T = 0$ . Isto é facilmente compreendido em razão destes estados existirem apenas em núcleos autoconjugados, onde a simetria axial deve prevalecer. Por esta mesma razão esperamos que nosso modelo descreva bem os estados de vibração de emparelhamento, pois estão próximos a núcleos autoconjugados.

Para rotação de emparelhamento, a energia do sistema é aproximadamente proporcional a  $T(T+1)$  de acordo com a equação (5.4.30), significando que o nosso sistema se torna axialmente simétrico. Entretanto é prematuro chegar a qualquer conclusão definitiva sobre a natureza das simetrias no espaço de isospin dos esta

tados  $0^+$ . Esperamos que futuras comparações usando três coordenadas geradoras e uma  $s\tilde{o}$  elucidem este ponto.

| T | A = 48        |        |          | A = 42        |       |          |
|---|---------------|--------|----------|---------------|-------|----------|
|   | Chen e outros | Exato  | Presente | Chen e outros | Exato | Presente |
| 0 | -10.15        | -10.16 | -10.15   | -8.72         | -8.77 | -8.71    |
| 0 | - 0.12        | -0.27  | - 0.02   | -0.53         | -0.94 | -0.69    |
| 2 |               |        |          | -6.62         | -7.04 | -6.59    |

Tabela 8.1 - Comparação das energias entre o presente trabalho (Simetria axial, projeção analítica e uma coordenada geradora) e o de Chen e outros (projeção numérica e três coordenadas geradoras). Também temos resultados exatos obtidos a partir de técnicas de teoria de grupos. As energias são calculadas no modelo de 4 níveis com protons e neutrons correspondentes à camada fp ( $f_{7/2}$ ,  $p_{3/2}$ ,  $f_{5/2}$ ,  $p_{1/2}$ ). As energias de partícula independente para  $A = 48$  e  $A = 52$  são respectivamente (0.0, 4.25, 5.03, 5.36) e (0.06, 4.26, 4.96, 5.34). A intensidade da interação de emparelhamento é  $G = 24/A$ . No caso de  $A = 48$ , temos 8 nucleons ativos ( $N_{\pi} = N_{\nu} = 4$ ) e, no caso,  $A = 52$  12 nucleons ativos ( $N_{\pi} = N_{\nu} = 6$ ).

### 8.3 - Comparação com soluções exatas

Vimos resumidamente, na introdução deste capítulo, expressões analíticas para taxas de transição com funções de onda obtidas

a partir dos diferentes métodos variacionais à saber, PBCS, FBCS e GCM.

Como provavelmente cálculos seguindo a mesma linha de a bordagem para taxas de transição não existem, pois as tentativas an teriores esbarraram em dificuldades técnicas [H. Muther - Comunica ção particular], renunciemos a este tipo de comparações e confronta mos nossos resultados com os cálculos exatos existentes para o mo dêlo simétrico de dois níveis [Dussel e outros 1970].

Um sistema com dois níveis de mesmo  $j$ , espaçado de uma energia de partícula independente  $\epsilon$  e com número total de partí culas  $2N=4\Omega_j$ ; é muitas vezes conhecido como modelo simétrico de dois ní veis. Juntamente com o modelo degenerado, este modelo é conside rado um teste para as diversas soluções aproximadas da hamiltonia na de emparelhamento, pois nesta situação é mais fácil obter solu ções exatas com a qual as diversas aproximações podem ser compara das.

Neste modelo, o multiplicador de Lagrange  $\lambda$  calculado pe la equação de número  $N = \sum_j \Omega_j v_j^2$  é simplesmente  $\lambda = \epsilon/2$ , determinando os valores de  $u_j$  e  $v_j$  para cada nível como:

$$u^2 = u_1^2 = v_2^2 = \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{\epsilon}{2\sqrt{(\epsilon/2)^2 + \Delta^2}} \right) \quad (8.3.1)$$

$$v^2 = v_1^2 = u_2^2 = \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{\epsilon}{2\sqrt{(\epsilon/2)^2 + \Delta^2}} \right)$$

Para a solução BCS, o parâmetro variacional  $\Delta$  é deter minado pela equação do hiato (2.4.21), que no caso do modelo si métrico de dois níveis, é:

$$\Delta = G\Omega \sqrt{1 - \left( \frac{\epsilon}{2G\Omega} \right)^2} \quad (8.3.2)$$

Da expressão acima concluímos que ela só tem validade no campo real para  $\frac{\epsilon}{2G\Omega} < 1$  determinando o seguinte limite inferior para  $G$

$$G_{\text{crítico}} = \frac{\epsilon}{2\Omega} \quad (8.3.3)$$

Este nome,  $G_{\text{crítico}}$ , aparece em função da não existência da solução trivial de BCS para  $G < G_{\text{crit}}$ . Nos limites assintóticos de  $G \ll G_{\text{crit}}$  e  $G \gg G_{\text{crit}}$  temos respectivamente vibração e rotação de emparelhamento. A região em torno de  $G_{\text{crit}}$  é denominada região de transição [Bayman e outros 1969]

Dentro desse modelo, nosso objetivo é ilustrar em alguns experimentos numéricos, a validade, limitações e vantagens do método que desenvolvemos, calculando em primeiro lugar as energias e a norma  $\langle \text{BCS} | \hat{P}_T \hat{P}_N | \text{BCS} \rangle$ . Esta última quantidade relaciona-se com a decomposição da função de onda de BCS, que não é muito fácil de calcular pela abordagem numérica da integral de projeção, especialmente para componentes de reduzida porcentagem em relação aos dominantes.

Todos os nossos cálculos para o modelo de dois níveis, exceto nos pontos em que mencionaremos claramente, é feito para um sistema com  $\Omega = 10$  e a distância entre os níveis de  $\epsilon = 10.0$ . O número de partículas é tal que quando anulamos a força de emparelhamento o nível inferior fica completamente cheio. A razão primordial da escolha destes números é que, a partir deles, podemos comparar os nossos resultados com os cálculos exatos de Dussel e outros (1970).

Efetuada o cálculo de GCM com  $\Delta$  como coordenada geradora, obtemos as energias do estado fundamental  $T = 0$ , dos estados excitados para vários valores de  $G$ . Subtraindo a cada valor da energia, a energia do estado fundamental, obtemos a figura 8.1

bastante similar a de Dussel e outros (1978) exceto para os estados não simétricos de carga.

Na figura 8.1, podemos observar o espectro tipo vibracional para  $G/G_{\text{crit}} \ll 1$ , onde os estados  $T = 0^2, 2$  e  $T = 0^2, 2^2, 4^2$  são degenerados. Este resultado é bastante esperado de acordo com a demonstração de Jancovic e Schiff (1964) que provaram a conexão entre aproximação harmônica (RPA) e GCM neste limite. Os efeitos anarmônicos fazem com que os níveis de diferentes T's se dobrem ocorrendo segundo Bayman e outros (1969) uma transição de fase em  $G/G_{\text{crit}} = 1$ . Para  $G/G_{\text{crit}} \gg 1$ , os níveis tendem a formar bandas rotacionais. Na figura vamos encontrar duas bandas rotacionais. Para a banda do estado fundamental vamos encontrar a relação  $E(T=4)/E(T=2) = 3.34$  para  $G = 2.0$  valor bastante aproximado de  $4(4+1)/2(2+1) = 3.33$  característico da banda rotacional. Para a segunda banda vamos achar  $E(T=4^2) - E(T=0^2) / E(T=2^2) - E(T=0^2) = 3.31$ , que também confere.

Depois de convencer-mos que os resultados numéricos do nosso método são semelhantes ao resultado exato, vejamos o erro na energia devido à flutuação em número na função de onda de BCS, comparando os resultados de GCM com projeção apenas de T e com projeção simultânea de T e N. Na figura 8.2 são apresentados os erros relativos onde podemos notar que, na região próxima de  $G_{\text{crit}}$ , os erros são maiores. Para  $T = 4$  encontramos erros de até 400 %, e em  $T=0$  temos erros de 10 %, evidenciando a importância da restauração de todas as simetrias quebradas, se quisermos investigar os estados coletivos isovetoriais na região de transição entre rotação e vibração.

Para estudar o comportamento das energias na região de  $G_{\text{crit}}$ , seria assaz interessante comparar os resultados de PBCS e FBCS pois, no primeiro caso, temos a minimização com funções de on

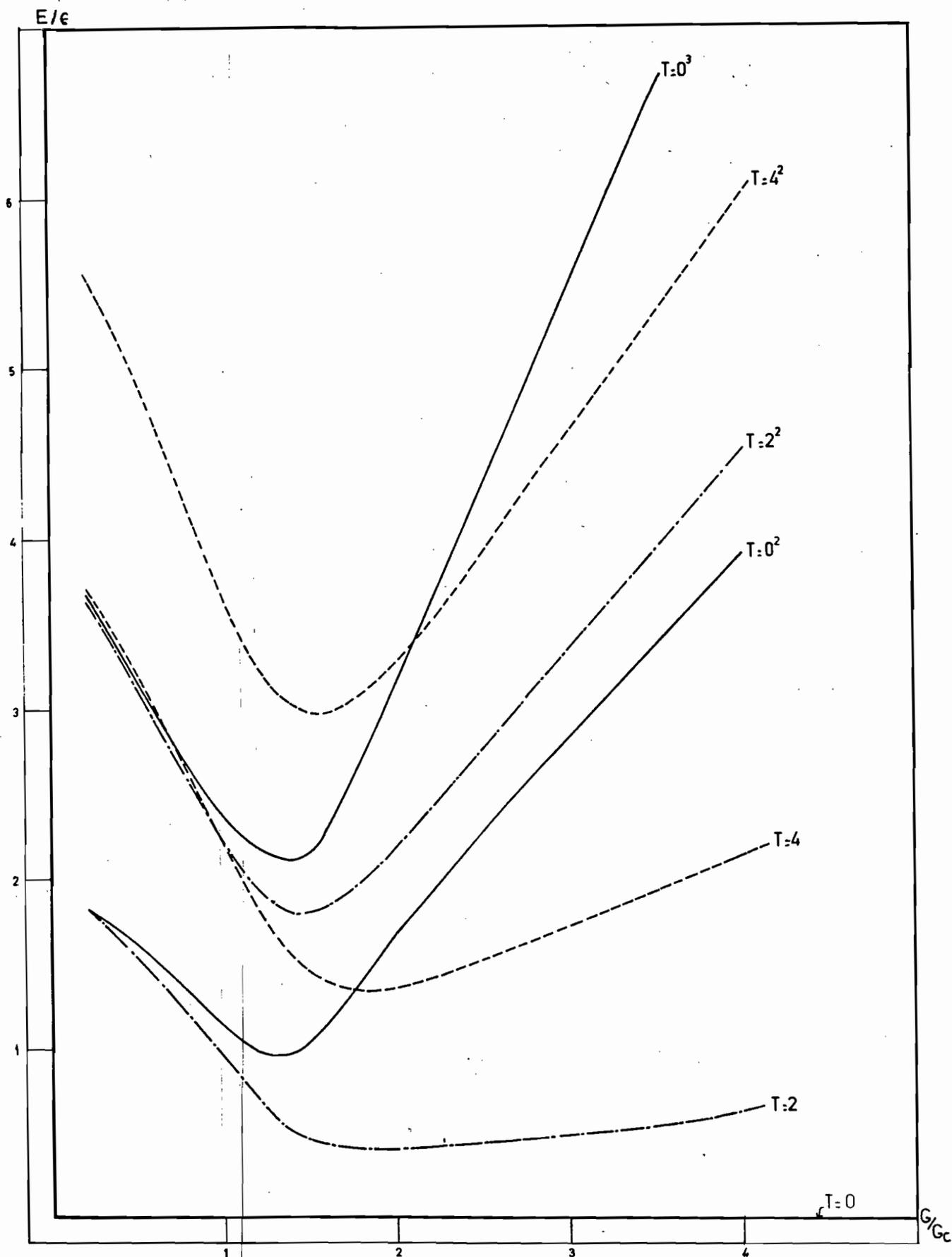


Figura 8.1- A energia dos estados  $0^+$  calculados por GCM em um modelo simétrico de dois níveis com  $\Omega = 10$ , dividido pelo espaçamento  $\epsilon = 10.0$  entre os níveis é apresentado contra  $G/G_{crit}$ .  $T^a$  onde  $a$  denota a primeira, segunda etc vez que aparece o estado de isospin  $T$ .

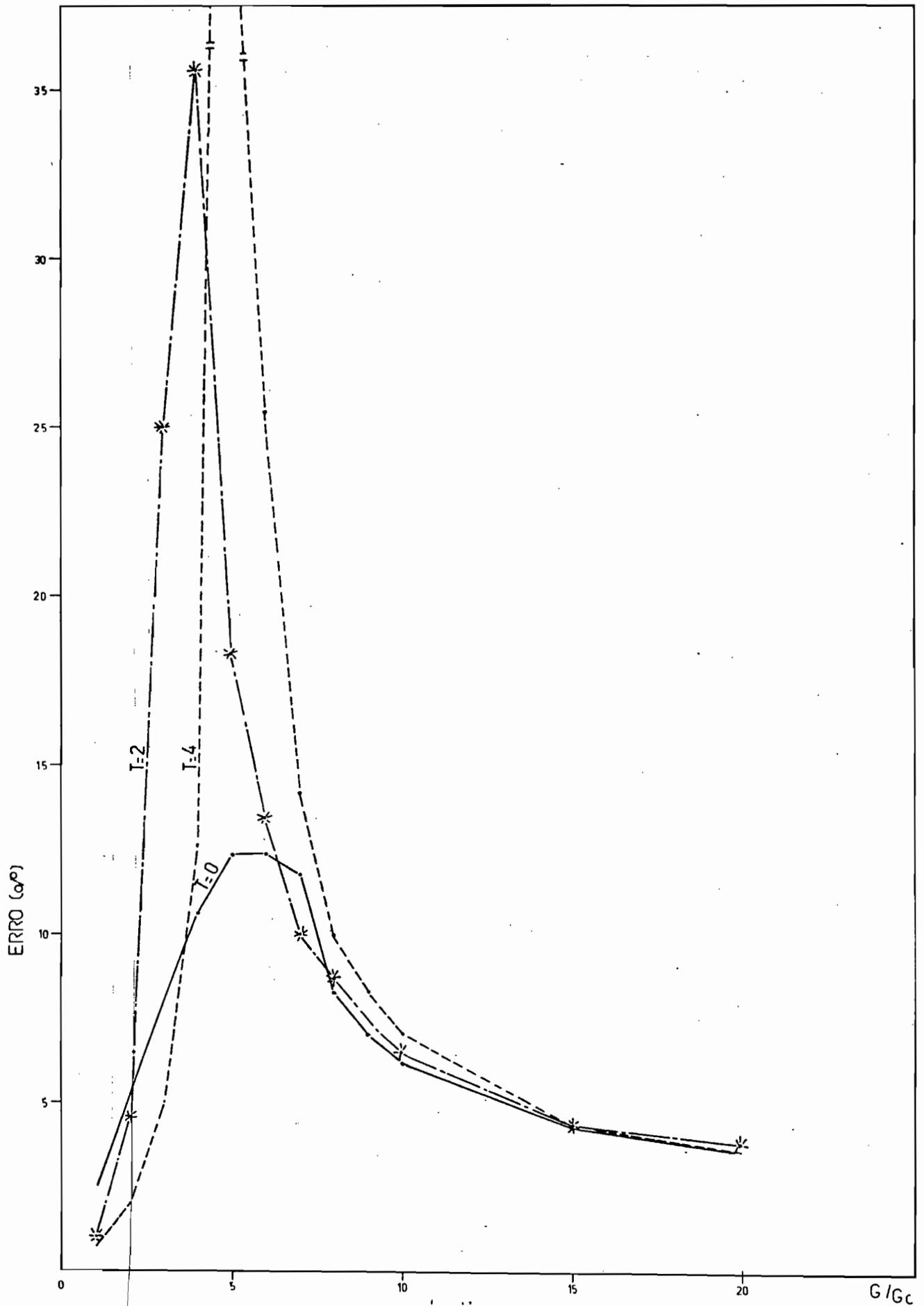


Figura 8.2 - Erro relativo entre os estados fundamentais de GCM com projeção simultânea de isospin e número e GCM com projeção em isospin contra  $G/G_{crit}$ , para diferentes valores de isospins em um modelo simétrico de dois níveis com  $\Omega = 10$  e  $\epsilon = 10.0$  Mev.

da sem simetria definida e no segundo as funções de onda tentativa possuem simetria definida.

É conveniente reafirmar, que o cálculo de FBCS implica na obtenção do valor médio da hamiltoniana (5.1.11) para muitos valores de  $\Delta$ , por isso a redução de tempo para o cálculo de cada parâmetro  $\Delta$  é valorizada, já que o ponto de mínimo pode ser atingido mais rapidamente. Desde que nosso método satisfaz plenamente esta condição, pouco tempo de cálculo para cada  $\Delta$ , a solução de FBCS com isospin torna-se factível. Se lembrarmos que o primeiro cálculo de FBCS para nucleons idênticos foi feito há mais de uma década, pode-se apreciar mais ainda as vantagens da presente abordagem.

A comparação entre PBCS e FBCS faz mais sentido ao concluirmos que tanto esta última aproximação quanto GCM não sofrem anomalias sensíveis a região de  $G_{crit}$ . Já confrontamos GCM com o resultado exato. Como os valores de GCM e FBCS são muito próximos, achamos redundante apresentar os resultados de GCM.

Iniciemos finalmente o cotejo entre PBCS e FBCS apresentando a figura 8.3, na qual os valores da energia média estão contra o parâmetro de hiato para vários valores de  $T$ . O valor da intensidade de emparelhamento é escolhido  $G=0.6$  bem próximo ao valor de  $G_c=0.5$ . A partir dela vemos que o valor médio da hamiltoniana (5.1.11) tem um mínimo de  $\Delta_{FBCS}$  diferente de  $\Delta_{BCS}$ . Aumentando a discrepância em função de  $T$ , por exemplo, para  $T=0$  temos uma diferença de 0.18 Mev e para  $T=16$ , 3.7 Mev. Mas isto não significa que a energia de PBCS fica pior em relação a FBCS para estados de alto isospin, pois a curva se achata com aumento de  $T$ , implicando que mesmo havendo uma grande diferença entre  $\Delta_{FBCS}$  e  $\Delta_{BCS}$  não existe a correspondente variação na energia.

A menor variação na energia em função de  $\Delta$ , para estados de alto isospin é provavelmente devido a princípio de Pauli, pois existe uma população obrigatória do nível superior com o aumento de  $T$ . Por exemplo para  $T = 20$  temos apenas um tipo de nucleon (neutron ou proton), preenchendo totalmente os níveis inferior e superior, não existindo a possibilidade de variação de  $\Delta$  e a curva de energia deve ser uma linha perpendicular ao eixo de  $\Delta = 0$ .

Outro ponto de interesse é ver que o próximo ao valor máximo isospin ( $T = N$ ), a situação energética ou melhor o comportamento da energia média em função de  $\Delta$  é similar à curva no limite de acoplamento forte, veja figura 8.4 onde  $G = 2.0$ . Portanto esperamos que os maiores erros devido a PBCS devem estar numa região intermediária entre  $T=0$  e  $T=N$ , atingindo o máximo em diferente  $T$  para cada valor de  $G$ , veja figura 8.6, onde as diferenças relativas de FBCS e PBCS são colocadas contra  $T$  para diversos valores de  $G$ . No caso de  $G=0.6$  temos erros da ordem de 100%.

Para ilustrarmos este ponto elaboramos a tabela 8.2 em que a energia de FBCS é apresentada para três valores de  $G = 0.6, 0.9$  e  $1.5$  e  $0 \leq T \leq 16$ . Podemos notar a maior diferença entre PBCS e FBCS é no menor valor de  $G = 0.6$ .

Devemos observar que este comportamento de PBCS e FBCS, torna-se claro somente quando temos a possibilidade de calcular estados de alto isospin. Os cálculos de tipo modelo de camadas (diagonalização exata) para obter estados de alto isospin implicam na diagonalização de matrizes extensas, que não ocorrem no presente tratamento analítico. Isto definitivamente adiciona outro mérito ao nosso método.

Este modo de expor graficamente a variação da energia com  $\Delta$  mostra de maneira clara a noção de vibração, rotação e re

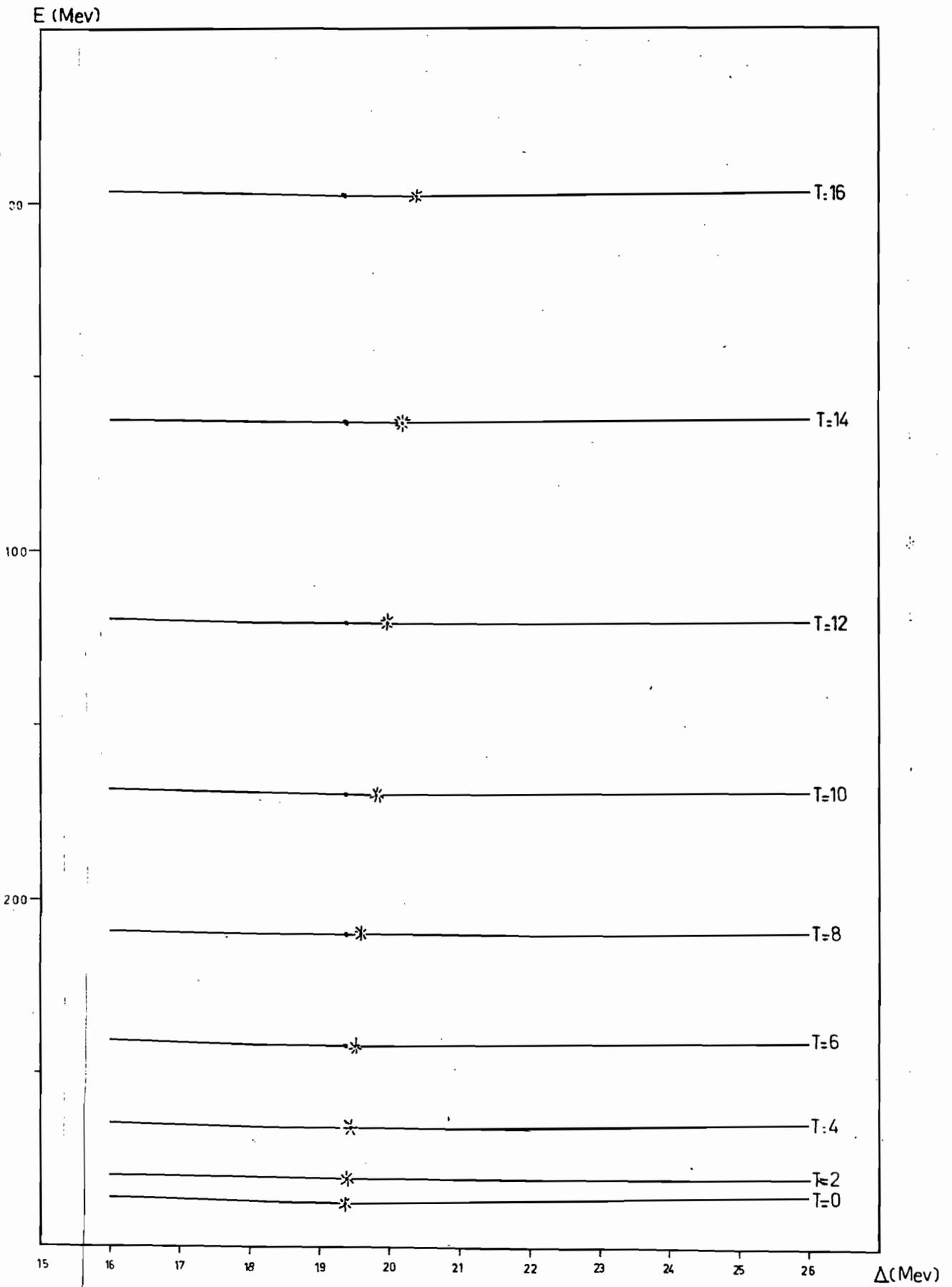


Figura 8.4 - Idem da figura 8.3 , agora  $G = 2.0$

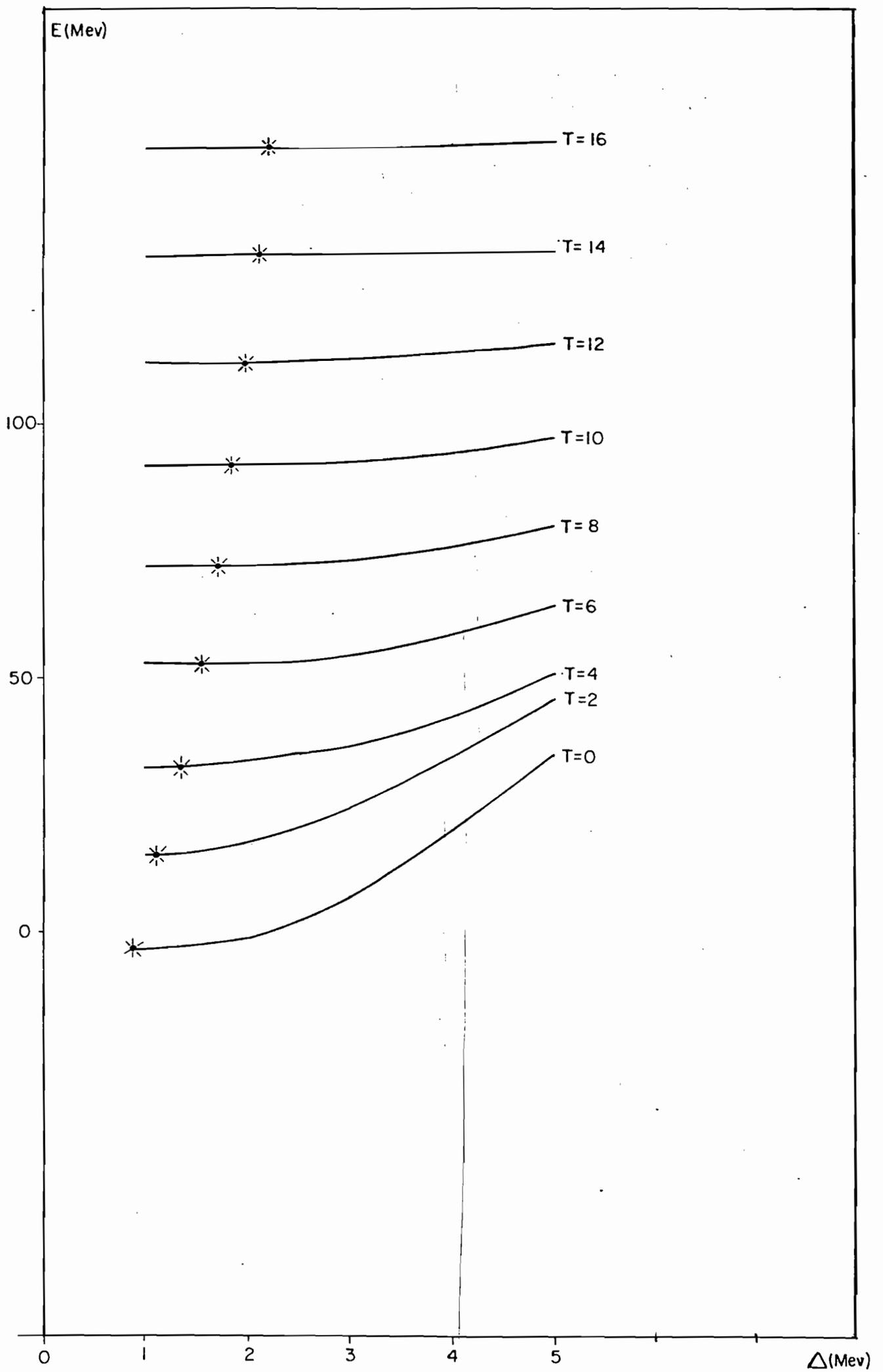


Figura 8.5 - Idem da figura 8.3 , agora  $G = 0.2$

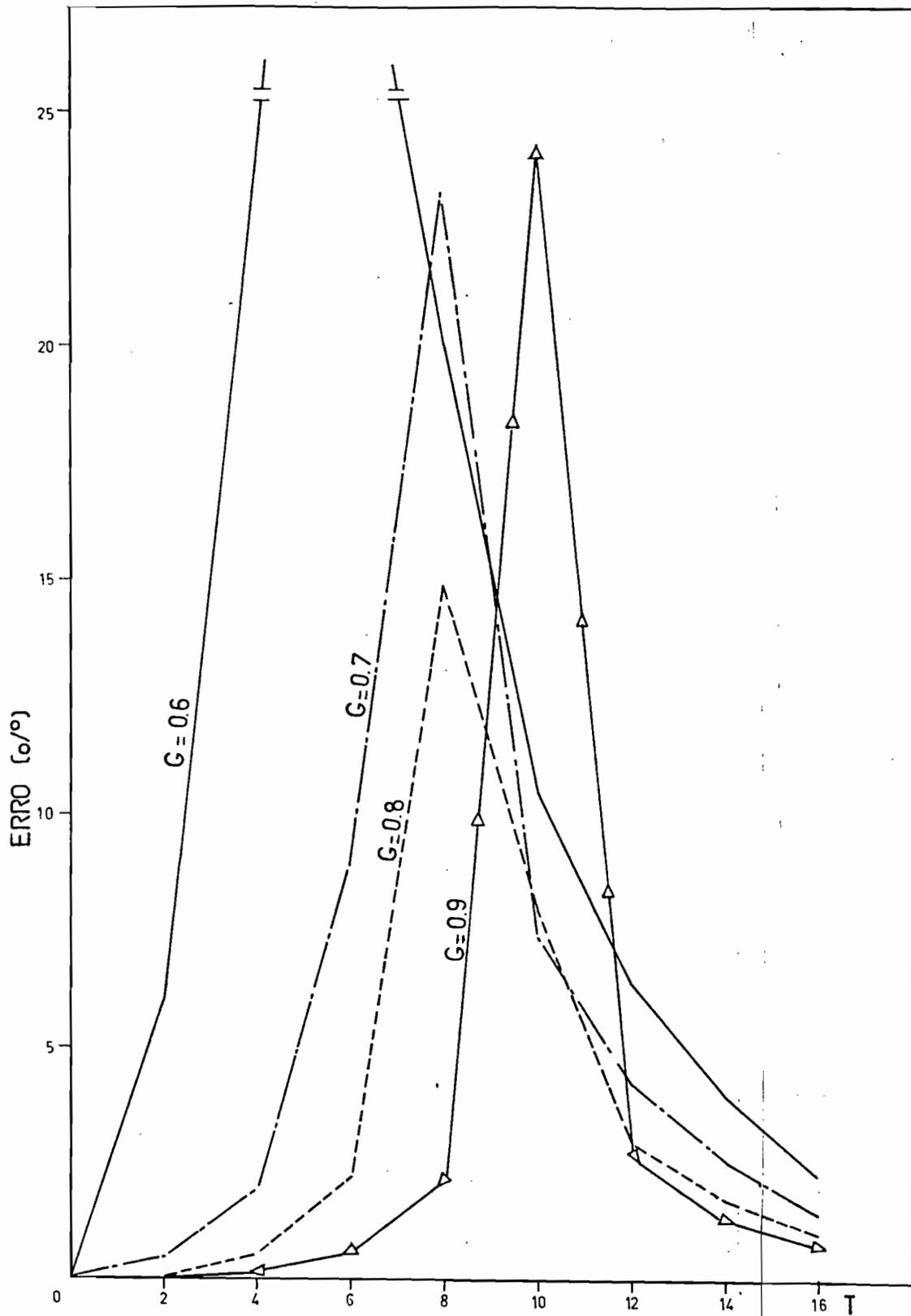


Figura 8.6 - Erro da aproximação PBCS em relação a FBCS em porcentagem contra o isospin T para diferentes valores de G no modelo simétrico de dois níveis com  $\Omega = 10$  e  $\epsilon = 10.0$

| T  | $G/G_{crit} = 1.2$ |                       | $G/G_{crit} = 1.8$ |                       | $G/G_{crit} = 3.0$ |                       |
|----|--------------------|-----------------------|--------------------|-----------------------|--------------------|-----------------------|
|    | $E_{FBCS}$         | $E_{PBCS} - E_{FBCS}$ | $E_{FBCS}$         | $E_{PBCS} - E_{FBCS}$ | $E_{FBCS}$         | $E_{PBCS} - E_{FBCS}$ |
| 0  | -28.70             | 0.04                  | -67.04             | 0.00                  | -180.96            | 0.00                  |
| 2  | -21.67             | 1.22                  | -62.95             | 0.00                  | -175.87            | 0.00                  |
| 4  | -10.81             | 2.60                  | -53.66             | 0.08                  | -163.99            | 0.00                  |
| 6  | 3.58               | 3.63                  | -39.47             | 0.24                  | -145.37            | 0.00                  |
| 8  | 21.20              | 4.24                  | -20.64             | 0.44                  | -120.05            | 0.02                  |
| 10 | 41.88              | 4.42                  | 2.64               | 0.64                  | - 88.79            | 0.76                  |
| 12 | 65.50              | 4.20                  | 30.24              | 0.81                  | - 49.49            | 0.07                  |
| 14 | 91.98              | 3.62                  | 62.05              | 0.79                  | - 4.34             | 0.07                  |
| 16 | 121.25             | 2.71                  | 97.99              | 0.68                  | 47.31              | 0.08                  |

Tabela 8.2 - Energia de FBCS e a diferença da energia de FBCS e PBCS são calculados para diferentes isospins e 3 valores de G no modelo simétrico de dois níveis com espaçamento entre os níveis  $\epsilon = 10.0$  e semi-degenerescência de par  $\Omega = 10$ .

giões transicionais de emparelhamento. Na figura 8.4 já mencionada, os primeiros níveis são comprimidos espaçando-se cada vez mais com aumento de  $T$ , seguindo a proporcionalidade  $T(T+1)$  característico da rotação. Por outro lado em 8.5 com  $G = 0.1$  os pontos de mínimo, que determinam a energia de FBCS, são equiespaçados com aumento de  $T$ , evidenciando muito bem a vibração. Por último a figura 8.3 representa um espectro da região transicional por não possuir as características acima bem definidas.

Este quadro unificado de rotação e vibração de emparelhamento pode ser melhor apreciado pelo gráfico 8.7, onde a energia de FBCS foi colocada contra o isospin  $T$ . Nele observa-se claramente a dependência linear em  $T$  para  $G = 0.1$  (vibração de emparelhamento), encurvando-se com o aumento de  $G$  até tomar a forma parabólica de  $T(T+1)$  para  $G = 2.0$  (rotação de emparelhamento).

Um outro resultado interessante de FBCS é o estudo da variação do parâmetro de hiato  $\Delta$  com isospin. Na figura 8.8 o resultado do ponto de equilíbrio de  $\Delta$  do cálculo de FBCS é desenhado contra  $T$  para vários valores da intensidade de emparelhamento  $G$ . Podemos notar que, quando o acoplamento é forte  $G = 2.0$  temos uma linha aproximadamente perpendicular ao eixo das ordenadas, confirmando que no limite de acoplamento forte o parâmetro de hiato  $\Delta$  independe de  $T$ . Quando  $G$  diminui a linha começa a curvar, sendo a curvatura mais acentuada para  $G_{crit}$ , reduzindo depois a uma outra linha reta com declividade diferente de zero no limite de acoplamento fraco.

Estas informações nos levam a supor que  $\Delta$  tem a seguinte forma:

$$\Delta^2 = aT^2 + bT + c \quad (8.3.4)$$

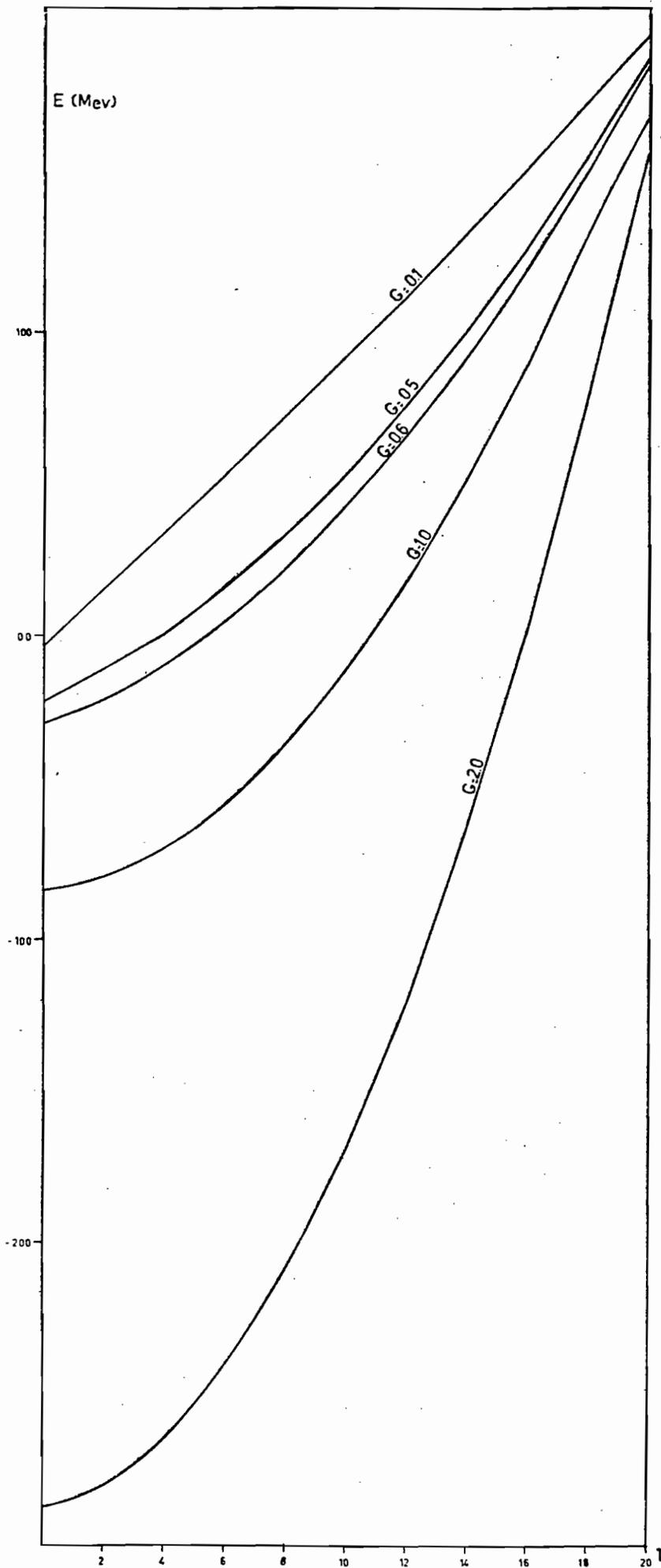


Figura 8.7 - Vibração e rotação de emparelhamento. A energia de FBCS é colocada contra o isospin  $T$  para diferentes valores de  $G$  no modelo simétrico de dois níveis com  $\Omega = 10$  e  $\epsilon = 10.0$

com  $b^2 - 4ac = 0$  para  $G \rightarrow \infty$  e  $G \rightarrow 0$  e aproximadamente  $a = 0$  para região de  $G = G_{\text{crit}}$ .

Devido à flexibilidade de nosso método ao contrário da dispendiosa abordagem anterior [Chen e outros - 1978] efetuamos até aqui cálculos de FBCS com isospin muito baixos e muito altos, do limite de acoplamento fraco ao forte. Investigando com as fórmulas que deduzimos os diversos aspectos da energia de um sistema de neutrons e protons com senioridade zero. Continuando vamos estudar a função de onda correspondente a estas energias.

Estamos interessados em analisar o comportamento da função de onda de BCS na região de transição, decompondo-a em  $N$  e  $T$ . Enfatizemos que este estudo está fora de alcance dos métodos que tratam a projeção numericamente, principalmente se for tentado análise de componentes com reduzida porcentagem.

Como o nosso interesse é ver todas as componentes da função de onda de BCS, escolhemos um sistema menor com  $\Omega = 2$  e  $\epsilon = 2.0$ . Na tabela 8.3 para 3 valores de  $G$ , apresentamos a porcentagem de probabilidade das componentes  $|C_{NT}|^2$  e  $|C_N|^2$  da função de onda tipo BCS, que descreve em média um sistema com 4 pares de nucleons.

Para a região de transição  $G/G_{\text{crit}} = 1.04$  vemos que a componente de maior porcentagem tem o número de pares igual a 4. Entre os diferentes valores de  $T$  possíveis, para esse número de pares, a maior componente é de  $T = 0$ . Este resultado é um pouco diverso de FBCS, onde a porcentagem de probabilidades das componentes é da mesma ordem para os vizinhos  $N = 3$  e  $N = 5$ . Portanto a transformação de Bogoliubov é diferente para FBCS e BCS na região de  $G_{\text{crit}}$  e a de FBCS bastante semelhante da região  $G$  grande.

Esta impressão de estarmos no limite de acoplamento fra

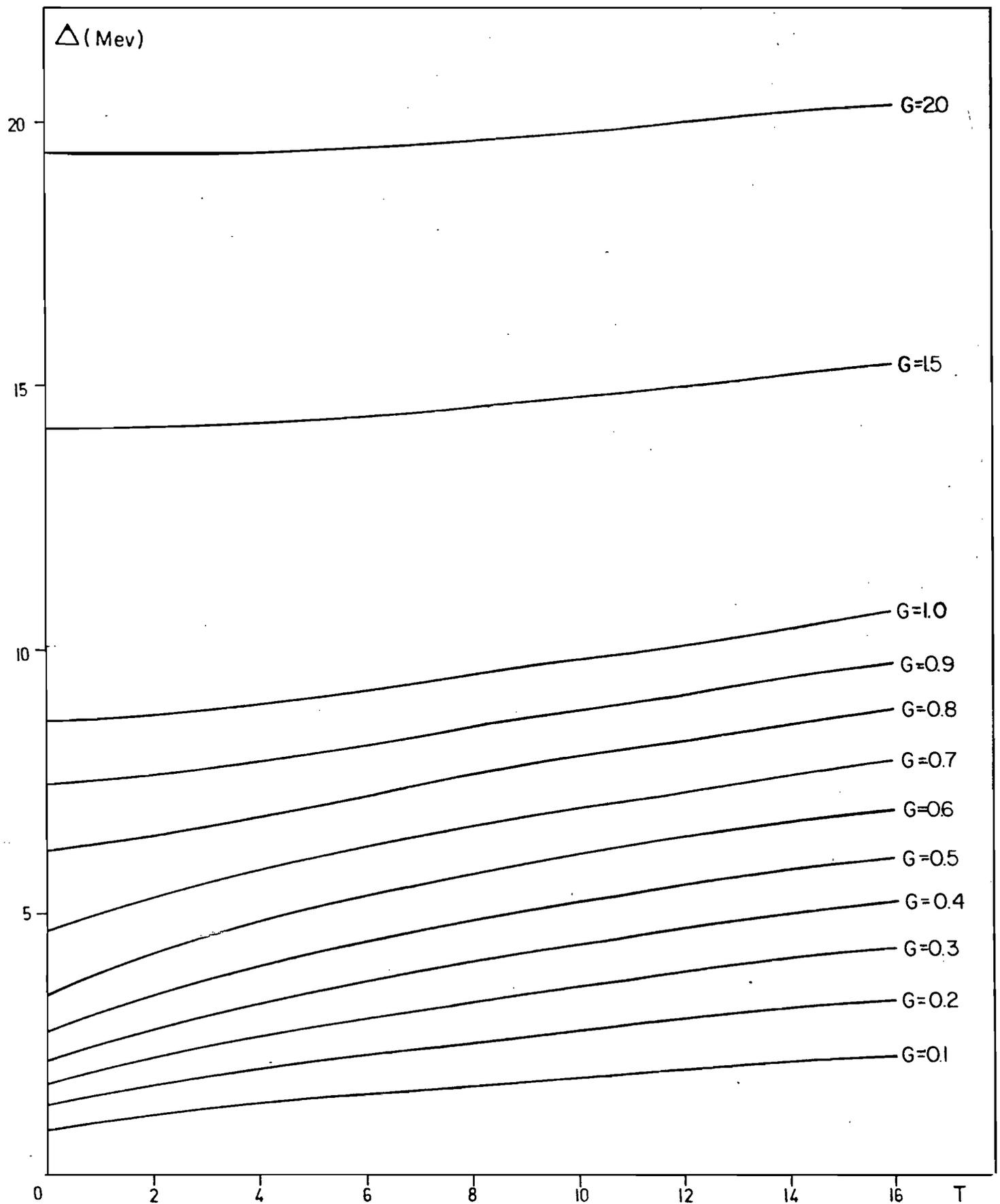


Figura 8.8 - Variação do parametro de hiato contra o isospin  $T$  para diferentes valores de  $G$  no modelo simétrico de dois níveis com  $\Omega = 10$  e  $\epsilon = 10.0$

| N | G/G <sub>crit</sub> = 1.04 |       |       | G/G <sub>crit</sub> = 2.0 |       |       | G/G <sub>crit</sub> = 4.0 |       |      | N | T     | G/G <sub>crit</sub> = 1.04 |       |       | G/G <sub>crit</sub> = 2.0 |       |       | G/G <sub>crit</sub> = 4.0 |       |      |
|---|----------------------------|-------|-------|---------------------------|-------|-------|---------------------------|-------|------|---|-------|----------------------------|-------|-------|---------------------------|-------|-------|---------------------------|-------|------|
|   | PBCS                       | FBCS  | FBCS  | PBCS                      | FBCS  | FBCS  | PBCS                      | FBCS  | FBCS |   |       | PBCS                       | FBCS  | PBCS  | FBCS                      | FBCS  | PBCS  | FBCS                      | PBCS  | FBCS |
| 0 | 0.00                       | 0.07  | 0.12  | 0.12                      | 0.19  | 0.31  | 0.30                      | 0.31  | 0    | 0 | 0.00  | 0.07                       | 0.12  | 0.19  | 0.30                      | 0.31  | 0.30  | 0.31                      | 0.31  |      |
| 1 | 0.00                       | 1.14  | 1.65  | 2.12                      | 2.12  | 2.78  | 2.74                      | 2.78  | 1    | 1 | 0.00  | 1.14                       | 1.65  | 2.12  | 2.74                      | 2.78  | 2.74  | 2.78                      | 2.78  |      |
| 2 | 0.21                       | 7.44  | 8.73  | 9.64                      | 9.64  | 10.56 | 10.52                     | 10.56 | 2    | 0 | 0.12  | 3.89                       | 4.41  | 4.68  | 4.77                      | 4.76  | 4.77  | 4.76                      | 4.76  |      |
| 3 | 6.89                       | 23.46 | 23.25 | 22.86                     | 22.86 | 22.21 | 22.26                     | 22.21 | 3    | 1 | 6.89  | 21.64                      | 20.62 | 19.47 | 17.88                     | 17.76 | 17.88 | 17.76                     | 17.76 |      |
| 4 | 85.78                      | 35.77 | 32.49 | 30.39                     | 30.39 | 28.25 | 28.38                     | 28.25 | 4    | 3 | 0.00  | 1.82                       | 2.63  | 3.39  | 4.38                      | 4.45  | 4.38  | 4.45                      | 4.45  |      |
| 5 | 6.89                       | 23.46 | 25.25 | 22.86                     | 22.86 | 22.21 | 22.26                     | 22.21 | 5    | 0 | 85.41 | 22.88                      | 17.59 | 14.22 | 11.19                     | 11.02 | 11.19 | 11.02                     | 11.02 |      |
| 6 | 0.21                       | 7.44  | 8.73  | 9.64                      | 9.64  | 10.56 | 10.52                     | 10.56 | 6    | 2 | 0.37  | 12.64                      | 14.45 | 15.58 | 16.08                     | 16.09 | 16.08 | 16.09                     | 16.09 |      |
| 7 | 0.00                       | 1.14  | 1.65  | 2.12                      | 2.12  | 2.78  | 2.74                      | 2.78  | 7    | 4 | 0.00  | 0.25                       | 0.45  | 0.69  | 1.11                      | 1.14  | 1.11  | 1.14                      | 1.14  |      |
| 8 | 0.00                       | 0.07  | 0.12  | 0.19                      | 0.19  | 0.31  | 0.30                      | 0.31  | 8    | 1 | 6.89  | 21.64                      | 20.62 | 19.47 | 17.88                     | 17.76 | 17.88 | 17.76                     | 17.76 |      |
|   |                            |       |       |                           |       |       |                           |       |      | 3 | 0.00  | 1.82                       | 2.63  | 3.39  | 4.38                      | 4.45  | 4.38  | 4.45                      | 4.45  |      |
|   |                            |       |       |                           |       |       |                           |       |      | 0 | 0.12  | 3.89                       | 4.41  | 4.68  | 4.77                      | 4.76  | 4.77  | 4.76                      | 4.76  |      |
|   |                            |       |       |                           |       |       |                           |       |      | 2 | 0.09  | 3.55                       | 4.32  | 4.96  | 5.75                      | 5.80  | 5.75  | 5.80                      | 5.80  |      |
|   |                            |       |       |                           |       |       |                           |       |      | 1 | 0.00  | 1.14                       | 1.65  | 2.12  | 2.74                      | 2.78  | 2.74  | 2.78                      | 2.78  |      |
|   |                            |       |       |                           |       |       |                           |       |      | 0 | 0.00  | 0.07                       | 0.12  | 0.19  | 0.30                      | 0.31  | 0.30  | 0.31                      | 0.31  |      |

Tabela 8.3 - O quadro das componentes em porcentagem da decomposição da função de onda de BCS é apresentado para 3 valores de G no modelo simétrico de dois níveis com  $j = 3/2$  e espaçamento  $G = 2.0 \cdot |C_N|^2$  significa a probabilidade da componente em número de partículas (2N), que é subdividido a seguir em  $|C_{NT}|^2$  pelas várias possibilidades do isospin (T). As diferentes colunas PBCS e FBCS significam que a transformação de Bogoliubov é obtida de forma diversa.

co, que a solução de BCS nos fornece, pode ser melhor entendido pela fórmula abaixo da dispersão em número para o modelo simétrico de dois níveis deduzida a partir de (2.5.1) e (8.3.1).

$$(\Delta N)^2 \approx 8\Omega \left(\frac{\Delta}{\epsilon}\right)^2 \quad (8.3.5)$$

onde vemos que quanto maior o parâmetro de hiato teremos uma maior dispersão. Assim temos um maior alargamento para BCS pois  $\Delta_{\text{FBCS}}$  é um fator de  $4.5 \times \Delta_{\text{BCS}}$ . Este maior alargamento em vários números de pares e isospin implica na necessidade de uma correta restauração das simetrias perdidas.

Passemos agora à discussão sobre as taxas de transição. Como não existem números a serem comparados no cálculo de Chen e outros (1978), a nossa única alternativa é a comparação com a solução exata no modelo simples de dois níveis. Como antes os cálculos foram feitos para um sistema de  $\Omega = 10$  e  $\epsilon = 10.0$ , 20 pares no núcleo alvo e 21 no núcleo residual ou vice-versa, as transições consideradas estão na figura a seguir:

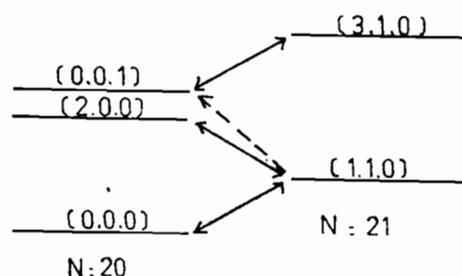


Figura 8.9

Nesta figura os estados foram rotulados por  $(T,m,a)$  onde  $a$  denota a primeira, segunda etc vez que aparece o estado de isospin  $T$  e número de pares  $N = 2\Omega + m$ . A dupla direção repre

senta as transições permitida-permitida para os estados fundamentais. A linha interrompida com uma única direção, indica a transição permitida-proibida populando o estado de vibração de emparelhamento do sistema com  $N = 20$ .

Na figura 8.10 o valor absoluto do elemento de matriz reduzido  $|\langle f | \sum_j A_j^+ | i \rangle|$  entre estados com 21 e 20 pares de partículas é representado contra intensidade da interação de emparelhamento  $G/G_{crit}$ . Tanto o estado final  $|f\rangle$  como o inicial  $|i\rangle$  podem ser obtidos pelos cálculos de GCM, FBCS e PBCS. O primeiro caso (GCM) é representado pela curva sólida, onde podemos notar que quase reproduz os resultados exatos [Dussel e outros - 1970]. A curva pontilhada são os resultados de FBCS e a tracejada de PBCS. Para valores de  $G/G_{crit} \gg 1$  os resultados de PBCS, FBCS e GCM são praticamente idênticos, entre os três o mais simples é PBCS, portanto o preferido para ser usado nesta região.

Na mesma figura apresentamos também os resultados do modelo vibracional de emparelhamento e do modelo rotacional de emparelhamento. No limite de acoplamento fraco  $G/G_{crit} \ll 1$  os resultados de GCM coincidem com o modelo vibracional. No outro limite, de acoplamento forte  $G/G_{crit} \gg 1$  a comparação com o resultado de GCM mostram uma diferença de 10%, fato este que será explicado mais tarde.

Na região de  $G_{crit}$ , os modelos de vibração e rotação de emparelhamento falham sobremaneira. Para  $G_{crit}$  o modelo rotacional tende a zero enquanto que o vibracional tende ao infinito, mas esta transição é alisada nas curvas de GCM e FBCS. Sendo que PBCS pode ser considerada uma representação do modelo rotacional.

O significado físico de nossas curvas, GCM, FBCS e

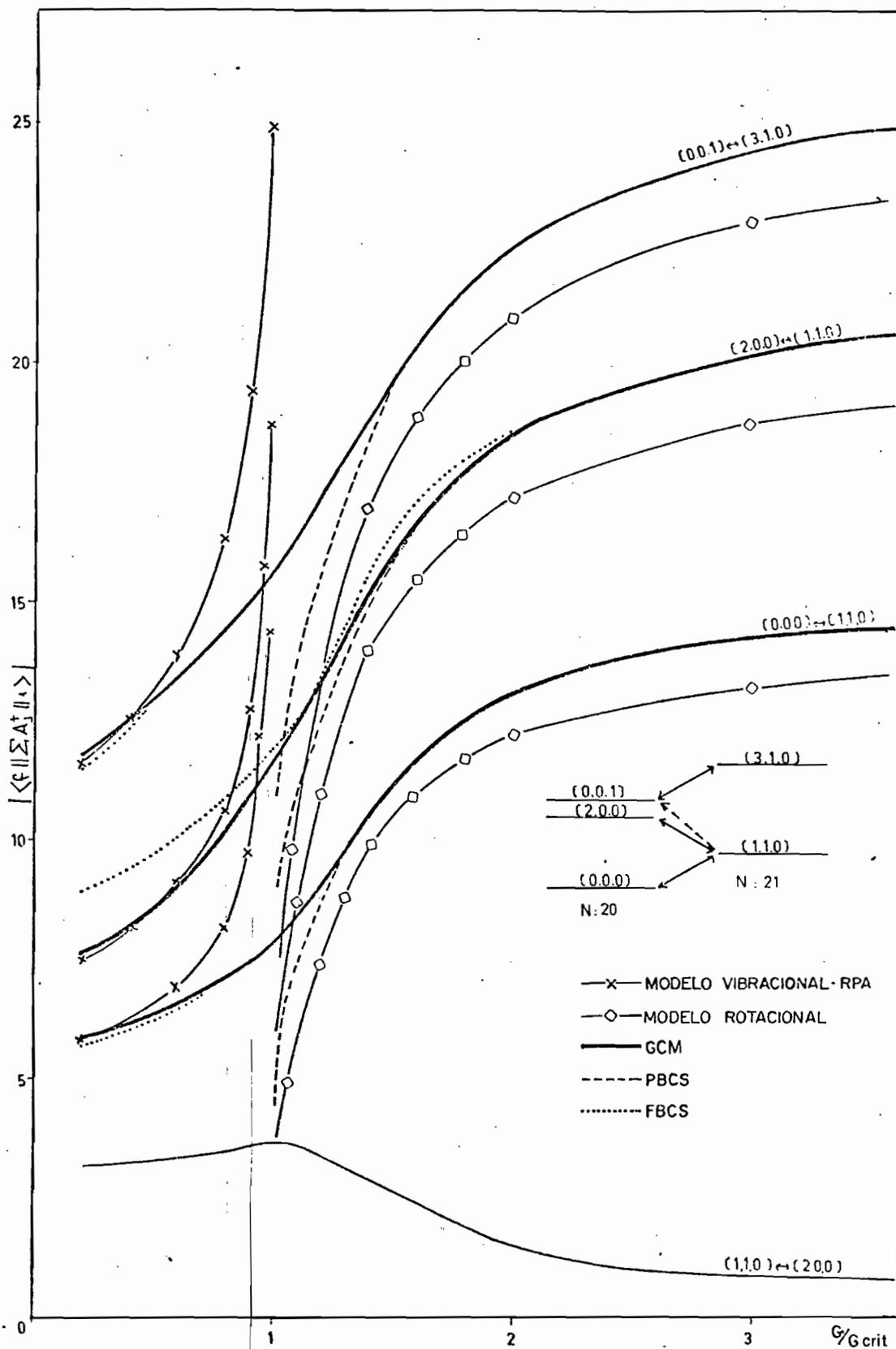


Figura 8.10 - Valor absoluto do elemento de matriz reduzido entre estados de 21 e 20 pares é apresentado contra  $G/G_{crit}$  em um sistema de dois níveis com  $\Omega = 10$  e  $\epsilon = 10.0$  para as diversas aproximações do presente trabalho. O esquema de níveis anexo esclarece as transições que estão sendo consideradas.

PBCS podem ser explicados ao tomarmos o limite de um ponto, nos ângulos  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  e  $\theta$ , na função de onda de BCS projetada e substituímos os operadores de rotação  $\hat{R}(\Omega)$  e  $\hat{S}(\Theta)$  por operadores unitários. Imediatamente obtemos a função de onda no modelo rotacional:

$$|NTK m_T; \Delta\rangle = \left[ \frac{2T+1}{16\pi^3} \right] \exp(i\eta\theta) D_{m_T K}^T(\alpha\beta\gamma) |BCS, \Delta; k\rangle \quad (8.3.6)$$

onde  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ ,  $\theta$  e  $\Delta$  são as coordenadas generalizadas do modelo rotacional. A nossa função de onda projetada (8.1.3) é a solução da equação integral de GHW se usarmos  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  e  $\theta$  como coordenadas geradoras e a função de onda acima (8.3.6), com a correlação entre a parte intrínseca e rotacional introduzida adequadamente através de  $\hat{R}$  e  $\hat{S}$ , como função de onda geradora.

Como a deformação de nosso sistema é medido por  $\Delta_\mu$  onde  $\mu = (1, 0, -1)$  significam  $(\pi\pi, \pi\sigma$  e  $\sigma\sigma)$ , exercendo o mesmo papel da deformação intrínseca no caso de deformação quadrupolar, o operador de transferência de um par no modelo rotacional pode ser o mesmo adotado no modelo rotacional de massa nuclear, ou seja:

$$\mathcal{P}_\mu = e^{2i\theta} \sum_{\mu'} \Delta_\mu D_{\mu' \mu}^1(\alpha\beta\gamma) \quad (8.3.7)$$

Em nosso caso temos  $\Delta_1 = \Delta_{-1} = 0$  e o operador conecta estados de mesmo  $K = 0$ . Para a transição do estado fundamental para o estado fundamental é trivial ver que:

$$\langle T_f N+1 || \mathcal{P} || T_i N \rangle = \sqrt{2T_i} \sum_j \Omega_j u_j v_j = \sqrt{2T_i} \left\{ 1 - \left[ \frac{6u_i+1}{6} \right] \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (8.3.8)$$

onde  $T_i$  é o maior valor entre os isospins da transição. Donde

podemos concluir facilmente que a nossa curva de GCM é proporcional a  $T$ , significando que quanto maior é o  $T$  maior é o incremento na transição.

É interessante notar que se fizermos o limite de um ponto na expressão (7.3.21) tomando  $\alpha = \beta = \gamma = \theta = 0$ , considerarmos ainda  $u_j^f u_j^i + v_j^f v_j^i = 1$  e somarmos sobre os níveis de partícula independente, obtemos o seguinte resultado bastante simples

$$\langle f \parallel \sum_j A_j^\dagger \parallel i \rangle = \sqrt{2T} \sum_j \Omega_j u_j^i v_j^f \quad (8.3.9)$$

que será a expressão (8.3.6) do modelo rotacional se aproximarmos  $v_j^f$  por  $v_j^i$ .

Esta expressão do limite de um ponto praticamente explica a diferença de 10 % entre o modelo rotacional e PBCS para  $G/G_{\text{crit}} \gg 1$ . Pois em PBCS além de termos a troca de  $v_j^f$  por  $v_j^i$ , consideramos todos os pontos em (7.3.21).

Sabendo que  $\sum_j \Omega_j v_j u_j = \frac{\Delta}{G}$  para o caso de BCS e considerando todos os pontos, podemos escrever de maneira qualitativa a soma das amplitudes espectroscópicas como:

$$\langle f \parallel \sum_j A_j^\dagger \parallel i \rangle \propto \sqrt{2T} \Delta(T) \quad (8.3.10)$$

Convém repetir que, no limite de acoplamento forte o valor de  $\Delta$  tem um valor próximo a  $\Delta_{\text{BCS}}$ , que exerce o papel de momento de emparelhamento intrínseco e assim a expressão acima é aquela do modelo de rotação.

Na região de transição sabemos que  $\Delta_{\text{FBCS}} > \Delta_{\text{BCS}}$  e também que  $\Delta_{\text{FBCS}}$  varia com  $T$ , levando para cima a curva de PBCS e mantendo o mesmo espaçamento para vários  $G$ , inclusive no limite de acoplamento fraco, mas o valor da soma das amplitudes es

pectroscópicas será sempre maior do que o calculado pelos métodos de GCM e FBCS.

Antes de terminarmos esta secção vamos fazer uma comparação entre os valores do parâmetro de hiato de do núcleo final  $\Delta_f$  e do núcleo inicial  $\Delta_i$  de FBCS e BCS com quantidade  $G \langle f \parallel \sum_j A_j^+ \parallel i \rangle / \sqrt{2T}$ , que deve medir a deformação no espaço quadridimensional de isospin e de "gauge". Na tabela 8.4 apresentamos os valores numéricos para estas quantidades onde dois conjuntos de valores são comparáveis. Primeiro no limite de acoplamento forte e depois na região de  $G_{crit}$ . No limite de acoplamento fraco a diferença entre os parâmetros de hiatos  $\Delta_f$  e  $\Delta_i$  com o parâmetro de deformação é acentuada, de tal forma que os parâmetros  $\Delta_f$  e  $\Delta_i$  superestimam o incremento da transição.

Estes resultados e aqueles da região de Níquel, que discutiremos mais tarde, parecem estabelecer uma forma de estimar as taxas de transição através da relação

$$\langle f \parallel \sum_j A_j^+ \parallel i \rangle = \sqrt{2T} \frac{\Delta}{G} \quad (8.3.11)$$

#### 8.4 - Modelos semi-realísticos na camada fp

Nesta secção nós vamos voltar a aplicação de nossas fórmulas a núcleos. Como o objetivo desta tese é apenas estabelecer uma ferramenta conveniente para estudar os estados coletivos de em parelhamento isovetorial em núcleos, não faremos nenhuma tentativa de estudo sistemático na região de  $40 \leq A \leq 70$  ou de outras regiões da tabela periódica, passíveis de serem calculadas pelo nosso modelo.

|                      | $G \langle P_{T_f} P_{N+1} \rangle_{BCS} \left  \left  \sum_j A_j^t \right  \right  P_{T_f} P_{N+1} \rangle_{BCS} / \sqrt{Z_{T_f}}$ |       |      |      |       |      | $\Delta_i$ |      |       |      |       |      | $\Delta_f$ |       |      |       |      |      |       |
|----------------------|---|-------|------|------|-------|------|------------|------|-------|------|-------|------|------------|-------|------|-------|------|------|-------|
|                      | PBCS  |       |      | FBCS |       |      | BCS        |      |       | FBCS |       |      | BCS        |       |      | FBCS  |      |      |       |
|                      |   |       |      |      |       |      |            |      |       |      |       |      |            |       |      |       |      |      |       |
| $\frac{G}{G_{crit}}$ | 1.04  | 4.00  | 0.20 | 1.04 | 4.00  | 1.04 | 4.00       | 1.04 | 4.00  | 1.04 | 4.00  | 0.20 | 1.04       | 4.00  | 1.04 | 4.00  | 0.20 | 1.04 | 4.00  |
| (001)<br>↓           | 2.13  | 20.77 | 0.39 | 2.83 | 20.77 | 1.45 | 19.37      | 1.45 | 19.37 | 2.85 | 19.37 | 0.87 | 2.25       | 19.34 | 2.25 | 19.34 | 1.43 | 3.15 | 19.36 |
| (111)<br>↓           | 2.43  | 20.76 | 0.38 | 3.42 | 20.76 | 1.45 | 19.37      | 1.45 | 19.37 | 3.59 | 19.38 | 1.12 | 2.25       | 19.34 | 2.25 | 19.34 | 1.43 | 3.15 | 19.36 |
| (201)<br>↓           | 2.53  | 20.54 | 0.48 | 3.66 | 20.54 | 1.45 | 19.37      | 1.45 | 19.37 | 3.59 | 19.38 | 1.12 | 2.25       | 19.34 | 2.25 | 19.34 | 1.78 | 3.18 | 19.36 |
| (311)                |   |       |      |      |       |      |            |      |       |      |       |      |            |       |      |       |      |      |       |

Tabela 8.4 - Momento de emparelhamento intrínseco comparado com os parâmetros variacionais obtidos por BCS e FBCS em um modelo simétrico de dois níveis, tanto nos núcleos finais como nos iniciais. A terceira linha corresponde a 2 valores de G para BCS e para FBCS e a quarta, quinta e sexta linha são as transições da figura (8.9)

Com este fim, vamos comparar em primeiro lugar os nos resultados de GCM com os cálculos de diagonalização exata de Bés e outros (1973), onde foram tomados os seguintes parâmetros ; para a intensidade da interação de emparelhamento  $G = 30/A$  , com  $A$  o número de massa do núcleo considerado;  $\epsilon_{f_{7/2}} = 0.0$  ,  $\epsilon_{p_{3/2}} = 3.97$  e  $\epsilon_{f_{5/2}} = 4.22$  são os níveis de partícula independente; consideramos o caroço inerte o núcleo de  $N_{\pi} = 20$  e  $N_{\nu} = 20$ .

Fizemos cálculos da energia para  $52 \leq A \leq 60$  que estão comparados na figura 8.11 aos cálculos de Bés e outros (1973) e também aos valores experimentais. Não devemos esquecer que todos os valores foram ajustados para reproduzir o espectro típico de vibração de emparelhamento proposto por Bohr (1968).

Como se pode notar pela comparação, os nossos resultados são bastante satisfatórios, tendo em vista a simplicidade de nossa aproximação devido à insistência em manter a simetria axial para os estados excitados.

Os resultados indicam que os estados da figura 8.11 são estados simétricos de carga, consequência da restauração das simetrias quebradas na função de onda axialmente simétrica..

A seguir apresentamos um cálculo de GCM para um sistema de 5 níveis ativos para vários núcleos. Nós não esperamos que as energias dos estados alterem crucialmente com a adição de dois níveis, pois estes estados são dominados pelas configurações mais baixas e mais populadas. Isto pode ser verificado pela tabela 8.5 , onde na primeira coluna temos o núcleo com seu respectivo número de massa, a seguir o isospin e a energia de ligação deste mesmo núcleo. Esta energia de ligação é usada para o cálculo de  $E_e$  em Mev , 4a. coluna, através da fórmula



$$EL(k,A,T,M_T) = [EL(56,0,0) - EL_{\omega}(56,0,0)] - [EL(k,A,T,M_T) - EL_{\omega}(A,T,M_T)] \quad (8.3.12)$$

onde  $EL(k,A,T,M_T)$  é a energia de ligação experimental associado ao  $k$ -ésimo estado  $J = 0^+$  com isospin  $T$  do núcleo  $(A,M_T)$ . As quantidades sem o índice  $k$  referem-se ao estado fundamental.  $EL_{\omega}$  é a fórmula semi-empírica de Weizsäcker determinada por:

$$EL_{\omega}(A,T,M_T) = b_{vol} A - 17 A^{2/3} - b_{sym} T(T+1)/A - 0.7 \tau^2 (1 - 0.76/\tau^{2/3}) / A^{1/3} \quad (8.3.13)$$

com todos os termos em Mev, sendo  $b_{vol} = 15.43$  Mev e  $b_{sym} = 25$  Mev [Bés e outros 1977]. As duas últimas colunas referem-se ao cálculo de 5 níveis e 3 níveis respectivamente, onde as diferenças são mínimas.

Neste cálculo de 5 níveis escolhemos como Bayman e Hintz (1968) os valores de partícula independente (-4.0, 0.0, 0.78, 1.08, 4.0) para os níveis ( $1f_{7/2}$ ,  $2p_{3/2}$ ,  $1f_{5/2}$ ,  $2p_{1/2}$ ,  $1g_{9/2}$ ) do  $^{56}\text{Ni}$ . Estes valores foram ligeiramente modificados para outros valores de  $A$  de acordo com o que foi formulado por Kisslinger e Sorensen (1963). A escolha da constante de interação de emparelhamento  $G = 24/A$  é feita de tal forma a reproduzir o primeiro estado experimental com  $T = 2$ . Esta forma de escolha é boa para um estudo detalhado e sistemático de toda a região de  $40 < A < 70$ , e como não temos a intenção de obter nenhuma característica nova neste nosso cálculo de  $52 < A < 60$ , o simples fato de obter números razoáveis para energias nesta região já é compensador, se lembrarmos da complexidade dos cálculos de diagonalização exata com o incremento do espaço modelo e da inclusão de isospin como variável.

Estes números obtidos para a energia com 5 níveis revelam que nosso método é um bom candidato para estudar sistematica

mente os estados  $0^+$  do  $^{40}\text{Ca}$  para cima. Esta preferência será reforçada se lembrarmos que a projeção pode ser obtida em questão de segundos por um computador de velocidade normal.

O erro de truncamento do espaço modelo nesta região é ilustrado na tabela 8.6 por alguns cálculos simples no núcleo de  $A = 56$ .

Para enfatizar a vantagem do presente método sobre o precedente, onde se usa o procedimento numérico para a projeção, efetuamos o seguinte experimento numérico. Em primeiro lugar calculamos com os mesmos parâmetros usados anteriormente, as solução de BCS com 3 níveis ativos. Então projetamos a partir dele de umasó vez os vários estados de T e N usando a transformação de quasipartículas obtida para o  $^{56}\text{Ni}$  pela aproximação BCS. Chamamos esta primeira aproximação de PBCS' cujos resultados estão na tabela 8.7, e comparando-se com GCM, são até razoáveis, pois aproximação feita é bastante grosseira. Este experimento numérico é interessante, principalmente porque projetamos estados de norma bastante pequena, que seria impossível no método precedente [Chen e outros 1978]. Um pequeno refinamento é efetuar o cálculo usual de PBCS, e os resultados são mais acurados. Devemos notar também que GCM e FBCS são indistinguíveis.

Talvez o cálculo de taxas de transição, que conectam os estados coletivos de emparelhamento isovetorial, seja um teste mais restrigente ao nosso método. Usando então funções de onda obtidas por GCM, FBCS e PBCS vamos calcular as amplitudes espectroscópicas na região do  $^{56}\text{Ni}$  e comparar os resultados obtidos com aqueles de diagonalização exata e modelo vibracional [Bés e outros - 1973] e modelo rotacional.

Na tabela 8.8, onde na primeira coluna colocamos a reação nuclear a ser considerada, depois a energia do estado que

| A                | T | $E_x$ (Mev) | EL (Mev) | $E_e$ (Mev) | $E_{t_1}$ (Mev) | $E_{t_2}$ (Mev) |
|------------------|---|-------------|----------|-------------|-----------------|-----------------|
| $^{56}\text{Ni}$ | 0 | EF          | 484.01   | 0           | 0               | 0               |
| $^{54}\text{Fe}$ | 1 | EF          | 471.78   | 2.75        | 2.90            | 2.88            |
| $^{58}\text{Ni}$ | 1 | EF          | 506.48   | 2.30        | 2.48            | 2.46            |
| $^{52}\text{Fe}$ | 0 | EF          | 447.72   | 2.38        | 4.55            | 4.77            |
| $^{52}\text{Cr}$ | 2 | EF          | 456.36   | 5.62        | 7.01            | 7.30            |
| $^{56}\text{Ni}$ | 0 | 5.23        | 478.78   | 5.23        | 6.36            | 5.94            |
| $^{56}\text{Fe}$ | 2 | EF          | 492.28   | 5.02        | 5.07            | 4.95            |
| $^{60}\text{Zn}$ | 0 | EF          | 515.02   | 2.36        | 3.93            | 4.01            |
| $^{60}\text{Ni}$ | 2 | EF          | 526.87   | 5.15        | 6.15            | 6.22            |
| $^{54}\text{Fe}$ | 1 | 5.68        | 466.10   | 8.43        | 9.36            | 8.91            |
| $^{54}\text{Cr}$ | 3 | EF          | 474.02   | 8.67        | 9.08            | 9.01            |
| $^{58}\text{Ni}$ | 1 | 3.55        | 502.93   | 5.80        | 9.00            | 8.48            |
| $^{58}\text{Fe}$ | 3 | EF          | 509.97   | 8.63        | 8.7             | 8.63            |
| $^{52}\text{Fe}$ | 0 | 4.63        | 443.09   | 7.01        | 12.64           | 12.20           |
| $^{52}\text{Cr}$ | 2 | 5.74        | 450.62   | 11.36       | 13.31           | 13.11           |
| $^{52}\text{Ti}$ | 4 | EF          | 451.98   | 12.71       | 14.03           | 14.68           |
| $^{56}\text{Fe}$ | 2 | 5.63        | 486.65   | 10.65       | 12.73           | 12.01           |
| $^{56}\text{Cr}$ | 4 | EF          | 488.50   | 13.50       | 12.69           | 14.68           |
| $^{60}\text{Ni}$ | 2 | 3.53        | 523.34   | 8.68        | 12.42           | 12.01           |
| $^{60}\text{Fe}$ | 4 | EF          | 525.39   | 13.18       | 13.44           | 13.52           |

Tabela 8.5 - Comparação entre as energias dos estados coletivos de emparelhamento isovetorial  $0^+$  "experimentais" e os calculados com modelo de 5 níveis e 3 níveis na camada fp, considerando o caroço inerte o núcleo de  $^{40}\text{Ca}$ . A primeira coluna indica em qual isotopo o estado  $0^+$  é encontrado, na coluna seguinte o isospin do isotopo. A terceira coluna e a quarta indicam a energia de excitação e a energia de ligação (Wapstra e Gove 1971) do estado  $0^+$ . A quinta coluna são as energias "experimentais" calculadas a partir da equação (8.4.1). Na sexta coluna temos as energias calculadas no presente trabalho para um sistema com 5 níveis ativos com os valores de (-4.0, 0.00, 0.78, 1.08, 4.00) para  $A=56$ , modificados de acordo com Kisslinger e Sorensen (1963),  $G=24/A$  e ajustadas para produzir um espectro de vibração de emparelhamento. A sétima e última coluna são as energias da figura 8.11 ligeiramente modificadas para ajustar os níveis do estado fundamental do  $^{54}\text{Fe}$  e  $^{58}\text{Ni}$ . As energias dos estados excitados foram tomados de Bés e outros (1977).

| Núcleo           | $E_e$<br>(MeV) | G = 24/A    |             |             | 30/A        |
|------------------|----------------|-------------|-------------|-------------|-------------|
|                  |                | 5<br>Níveis | 4<br>Níveis | 3<br>Níveis | 3<br>Níveis |
| $^{56}\text{Ni}$ | 0.0            | 0.0         | 0.0         | 0.0         | 0.0         |
| $^{56}\text{Fe}$ | 5.02           | 5.07        | 5.77        | 6.07        | 5.49        |
| $^{56}\text{Ni}$ | 6.58           | 6.36        | 6.59        | 6.79        | 6.46        |
| $^{56}\text{Fe}$ | 10.65          | 12.73       | 13.19       | 13.61       | 13.03       |
| $^{56}\text{Cr}$ | 13.50          | 12.69       | 13.71       | 14.27       | 13.69       |

Tabela 8.6 - Variação das energias dos estados  $0^+$  com o truncamento de níveis. Estes estados são calculados em primeiro lugar em um sistema de 5 níveis ativos ( $f_{7/2}, p_{3/2}, f_{5/2}, p_{1/2}, g_{9/2}$ ) com 16 nucleons ativos e energias de partícula independente dadas por (-4.00, 0.00, 0.78, 1.08, 4.00) e  $G = 24/A$ . A seguir elimina-se o nível superior até atingir 3 níveis. Por último são feitos cálculos com  $G = 30/A$ . Os valores da coluna  $E_e$  são explicados na tabela 8.5.

| Núcleo           | T | $E_{CCM}$ | $E_{FBCS}$ | PBCS       |                         | PBCS'       |                          |        | NORMA |
|------------------|---|-----------|------------|------------|-------------------------|-------------|--------------------------|--------|-------|
|                  |   |           |            | $E_{PBCS}$ | $ E_{FBCS} - E_{PBCS} $ | $F_{PBCS}'$ | $ E_{FBCS} - E_{PBCS}' $ |        |       |
| $^{52}\text{Fe}$ | 0 | -12.23    | -12.28     | -12.02     | 0.26                    | -10.78      | 1.45                     | 0.0961 |       |
| $^{52}\text{Cr}$ | 2 | -9.71     | -9.67      | -9.64      | 0.03                    | -8.87       | 0.84                     | 0.0310 |       |
| $^{52}\text{Ti}$ | 4 | -2.33     | -2.32      | -2.16      | 0.16                    | -1.31       | 1.02                     | 0.0015 |       |
| $^{54}\text{Fe}$ | 1 | -10.37    | -10.35     | -10.11     | 0.24                    | -9.51       | 0.86                     | 0.0879 |       |
| $^{54}\text{Cr}$ | 3 | -4.24     | -4.24      | -3.69      | 0.55                    | -3.68       | 0.56                     | 0.0054 |       |
| $^{56}\text{Ni}$ | 0 | -9.51     | -9.50      | -8.87      | 0.63                    | -8.87       | 0.64                     | 0.3081 |       |
| $^{56}\text{Fe}$ | 2 | -4.56     | -4.56      | -3.48      | 1.08                    | -3.48       | 1.08                     | 0.0183 |       |
| $^{56}\text{Cr}$ | 4 | -3.06     | 3.06       | 4.21       | 1.15                    | 4.21        | 1.15                     | 0.0002 |       |
| $^{58}\text{Ni}$ | 1 | -3.30     | -3.29      | -2.96      | 0.33                    | -2.67       | 0.63                     | 0.0947 |       |
| $^{58}\text{Fe}$ | 3 | 2.88      | 2.88       | 3.56       | 0.68                    | 3.86        | 0.90                     | 0.0044 |       |
| $^{60}\text{Zn}$ | 0 | 2.01      | 2.01       | 2.32       | 0.31                    | 2.97        | 0.96                     | 0.0984 |       |
| $^{60}\text{Ni}$ | 2 | 4.21      | 4.24       | 4.30       | 0.06                    | 4.69        | 0.48                     | 0.0319 |       |
| $^{60}\text{Fe}$ | 4 | 11.52     | 11.52      | 11.79      | 0.27                    | 12.28       | 0.76                     | 0.0012 |       |

Tabela 8.7 - As energias dos estados  $0^+$  da região de  $52 \leq A \leq 60$  são calculados pelas diferentes aproximações do presente trabalho. A coluna  $E_{PBCS}$  significa que os parâmetros variacionais de BCS do  $^{56}\text{Ni}$  foram usados para calcular as energias de outros núcleos são mostrados também as diferenças das aproximações PBCS e PBCS' em relação a PBCS e a norma da energia de PBCS'. O sistema considerado aqui é o mesmo da figura 8.11.

estã sendo populado e na terceira coluna o isospin do núcleo final, podemos ver que as amplitudes espectroscópicas de GCM e FBCS quase reproduzem os resultados de diagonalização exata. Para PBCS temos uma situação um pouco pior, mas isto é facilmente entendível, pois estamos numa região próxima a  $G_{crit}$  [Bés e outros 1973].

Fizemos também cálculos com GCM projetando apenas em  $i$  sospin e como mostramos anteriormente, os erros devido à flutuação em número se manifestam proeminentemente na região de transição. Como estamos na região de transição, não existe nenhuma concordância com o modelo rotacional, onde os resultados foram calculados a partir do limite de um ponto (8.3.9).

Para entender o papel de nosso parâmetro variacional  $\Delta$ 's elaboramos a tabela 8.8, onde comparamos a quantidade  $G \langle P_{T_f} P_{N+1} BCS(\Delta_f) \parallel \sum_j \parallel P_{T_i} P_N BCS(\Delta_i) \rangle / \sqrt{2T_s}$ , com os  $\Delta$ 's do núcleo final e inicial das várias reações de transferência. A conclusão que chegamos é que podemos estimar as taxas de transição a partir dos parâmetros  $\Delta$ 's, pois em geral  $\Delta_{FBCS}$  superestimam a deformação de emparelhamento enquanto que  $\Delta_{BCS}$  subestimam. Assim  $\Delta_{FBCS}$  e  $\Delta_{BCS}$  podem servir como limite superior e inferior para estimar a taxa de transição e desta forma auxiliar no entendimento qualitativo de algumas das características dos estados coletivos de emparelhamento.

Apesar do parâmetro de hiato  $\Delta_{FBCS}$  existir tanto no limite de rotação de emparelhamento como no de vibração de emparelhamento, a nossa estimativa não é adequada para esta última região, pois  $\Delta_{FBCS}$  superestima o valor de taxa de transição.



| REAÇÃO  | $T_f$ | $T_i$ | $G \langle P_T P_{N+1}^{BCS}   \sum_j^+   P_{T_1} P_{N_1}^{BCS} \rangle / \sqrt{2T_1} \rangle$ |      | $\Delta_i$ |      | $\Delta_f$ |      |
|---|-------|-------|--|------|------------|------|------------|------|
|   |       |       | PBCS   | FBCS | BCS        | FBCS | BCS        | FBCS |
| $^{54}\text{Cr}(p, t) ^{52}\text{Cr}$           | 2     | 3     | 1.76   | 1.90 | 1.52       | 2.32 | 1.72       | 2.22 |
| $^{54}\text{Fe}(^3\text{He}, n) ^{56}\text{Ni}$ | 0     | 1     | 1.61   | 1.89 | 1.52       | 1.95 | 1.24       | 1.82 |
| $^{54}\text{Fe}(t, p) ^{56}\text{Fe}$           | 2     | 1     | 1.81   | 2.18 | 1.52       | 1.95 | 1.24       | 2.23 |
| $^{54}\text{Cr}(t, p) ^{56}\text{Cr}$           | 4     | 3     | 1.93   | 2.01 | 1.52       | 2.32 | 1.24       | 3.06 |
| $^{58}\text{Ni}(p, t) ^{56}\text{Ni}$           | 0     | 1     | 1.02   | 1.15 | 1.37       | 1.86 | 1.24       | 1.83 |
| $^{56}\text{Fe}(t, p) ^{58}\text{Fe}$           | 3     | 2     | 1.79   | 2.07 | 1.24       | 2.23 | 1.37       | 1.86 |
| $^{58}\text{Ni}(^3\text{He}, n) ^{60}\text{Zn}$ | 0     | 1     | 1.63   | 1.84 | 1.37       | 1.86 | 1.48       | 2.01 |
| $^{58}\text{Ni}(t, p) ^{60}\text{Ni}$           | 2     | 1     | 1.80   | 1.93 | 1.37       | 1.86 | 1.48       | 1.70 |
| $^{58}\text{Ni}(t, p) ^{60}\text{Fe}$           | 4     | 3     | 1.77   | 1.93 | 1.37       | 2.24 | 1.48       | 2.09 |

Tabela 8.9 - Momento de emparelhamento intrínseco são comparados com o parâmetro variacional  $\Delta$  das aproximações BCS e FBCS para várias reações de transferência de um par. Os valores acima foram calculados a partir das amplitudes espectroscópicas da tabela 8.8.

APÊNDICE A-1 - Tratamento exato para hamiltoniana de emparelhamento  $T = 1$

Usando técnicas de teoria de grupos Chen e Richardson (1973) mostraram que a obtenção dos estados de senioridade zero da hamiltoniana de emparelhamento  $T = 1$  (2.2.1) e (2.2.3) podem ser reduzidas a solução do seguinte sistema de equações não lineares com  $N$  variáveis, as energias de emparelhamento  $E_i$ , para um sistema nuclear consistindo de  $N$  pares de partículas:

$$\frac{1}{G} + \sum_{j \neq i}^N \frac{k_{ij}}{E_j - E_i} = \sum_{m=1}^M \frac{\Omega_m}{2\epsilon_m - E_i} \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (\text{A.1.1})$$

onde  $M$  se refere ao número de níveis ativos e  $\epsilon_m$  as energias de partícula independente. A energia do estado fundamental e dos estados excitados de senioridade zero são dados pela soma total das energias de emparelhamento  $E_i$

$$E = \sum_{i=1}^N E_i \quad (\text{A.1.2})$$

As constantes de simetria  $k_{ij}$  em (A.1.1) caracterizam a simetria dos estados sob a troca entre as coordenadas de carga dos pares  $J = 0$ ,  $T = 1$ . Para os estados simétricos de carga  $T$  pode ser expresso em termos do número total de pares  $[N]$  e do isospin total  $T$  como:

$$k_{ij} = K = \frac{N(N-3) + T(T+1)}{N(N-1)} \quad (\text{A.1.3})$$

## REFERÊNCIAS

- BANERJEE B. e PARIKH J.C., 1965 Phys.Rev. 138 B303.
- BARANGER M., 1961 Phys.Rev. 122 992.
- BARDEEN J., COOPER L.M. e SCHRIEFFER J.R., 1957 Phys.Rev. 108 1175.
- BAYMAN B.F., 1960 Nucl.Phys. 15 33.
- BAYMAN B.F., BÉS D.R. e BROGLIA R.A., 1969 Phys.Rev.Lett. 23 1299.
- BAYMAN B.F. e HINTZ N.M., 1968 Phys.Rev. 172 1113
- BÉS D.R., BROGLIA R.A., HANSEN O. e NATHAN O., 1977, Phys.Rep. 34.
- BÉS D.R., BROGLIA R.A., PERAZZO R.P.J. e KUMAR K., 1970 Nucl. Phys. A143 1.
- BÉS D.R., MAQUEDA E.E. e PERAZZO R.P.J. 1973 Nucl.Phys. A199 143.
- BLOCH C. e MESSIAH A., 1962 Nucl.Phys. 39 95.
- BOGOLIUBOV N.M., 1958 Nuov.Cim. 7 794.
- BOHR A., MOTTELSON B. e PINES D., 1958 Phys.Rev. 110 936.
- BOHR A., 1968 Int.Symp. on Nuclear Structure Dubna (IAEA - Viena 1969).
- CAMIZ P., COVELLO A. e JEAN M., 1966 Nuov.Cim. 62B 199.
- CHEN H.T. e RICHARDSON R.W., 1973 Nucl.Phys. A212 317.
- CHEN, H.T., MUTHER H. e FAESSLER A., 1978 Nucl.Phys. A297 445
- De TOLEDO PIZA A.F.R. e PASSOS E.J.V., 1978 Nuov.Cim. 45B 1
- DIETRICH K., MANG H.J. e PRADAL J.H., 1964 Phys.Rev. 135 B22.
- DUSSEL G.C., MAQUEDA E. e PERAZZO R.P.J., 1970 Nucl.Phys. A153 469.

- FAESSLER A., GRÜMMER F. e PLASTINO A., 1973 Z.Phys. 260 305.
- FAESSLER A., GRÜMMER F., PLASTINO A. e KRMPOTIĆ F., 1973 Nucl.Phys. A217 420
- GINOCCHIO J.N. e WENESER J.A., 1968 Phys.Rev. 170 859.
- GLENDENNING N., 1965 Phys.Rev. 137 B102.
- GOEKE K., 1971 - Tese de Doutorado, Universidade de Muenster, Alemanha Federal.
- GOEKE K., FAESSLER A. e WOLTER H.H., 1972 Nucl.Phys. A183 352.
- GOEKE K., GARCIA J. e FAESSLER A., 1973 Nucl.Phys. A208 477.
- GOSWAMI A., 1964 Nucl.Phys. 60 228.
- GRIFFIN J.J. e WHEELER J.A., 1957 Phys.Rev. 108, 320.
- HAXEL O., JENSEN J.H.D. e SUESS H.E., 1949 Phys.Rev. 75 1766
- HECHT K.T., 1965 Phys.Rev. 139 B794.
- HILL P.L. e WHEELER J.A., 1953 Phys.Rev. 89 1102.
- IWAMOTO F. e ONISHI H., 1967 Prog.Theo.Phys. 37 682.
- JANCOVIC B. e SCHIFF D.H., 1964 Nucl.Phys. 58 678.
- JUSTIN D., MIHAILOVIC M.V. e ROSINA M., 1969 Phys.Lett. 29B 458.
- KERMAN A.K., LAWSON R.D. e MACFARLANE M.H., 1961 Phys.Rev. 135 162.
- KISSSLINGER L.S. e SORENSEN R.A., 1963 Rev.Mod.Phys. 35 853.
- KYOTOKU M. e CHIEN H.T., 1979 Journal of Phys. a ser publicado no número de dezembro
- MANG H.J., RASMUSSEN J.O. e RHO M., 1966 Phys.Rev. 141 941.
- MAYER M.G., 1949 Phys.Rev. 75 1969.

NATHAN O. e NILSSON S.G., 1965 Alpha-, Beta- and Gamma-Ray Spectroscopy, Vol. 1 (North-Holland, Amsterdam, 1966).

ONISHI N. e YOSHIDA S., 1966 Nucl.Phys. 80 367.

PEIERLS R. e YOCCOZ J., 1957 Proc.Phys.Soc. A70 381.

RIPKA G., 1968 Advances in Nuclear Physics (Plenum Press, New York)

SØRENSEN B., 1969 Nucl.Phys. A143 1.

SORENSEN R.A., 1972 Phys.Lett. 38B 376

VALATIN J.G., 1958 Nuov.Cim. 7 843.

WAPSTRA A.H. e GOVE N.B., 1971 Nuclear Data Tables 9 265