

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA

ART. 23
Hélio Dias
30
Kunze
Lacortas

"ESTRUTURA DE NÚCLEOS ESFÉRICOS PAR-ÍMPAR UTILIZANDO AS APROXI-
MAÇÕES *BCS* E O MODELO *ACQPV*: APLICAÇÃO A ISÓTONOS COM $N = 82$ E
ISÓTOPOS DO NI, ZN E CS"

SBI-IFUSP



305M810T0803

LAERCIO LOSANO

Tese apresentada ao Institu-
to de Física da Universida-
de de São Paulo para obten-
ção do título de Doutor em
Ciências.



ORIENTADOR: Prof. Dr. Hélio Dias

Defesa realizada em 28/07/86

SÃO PAULO

1986

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA

539.74
L 879e
D

ex 1

FICHA CATALOGRÁFICA

Preparada pelo Serviço de Biblioteca e Informação
do Instituto de Física da Universidade de São Paulo

Losano, Laercio

Estrutura de núcleos esféricos par-ímpar
utilizando as aproximações BCS e o modelo
ACQPV: aplicação para isótonos com $N=82$ e
isótopos do Ni, Zn e Cs. São Paulo, 1986.

Tese (Doutorado) - Universidade de São
Paulo. Instituto de Física. Departamento de
Física Experimental.

Área de Concentração: Física Nuclear.
Orientador: Prof. Dr. Helio Dias

Unitermos: 1. Aproximação BCS; 2. Blocking;
3. Projeção em número de partículas; 4. Aco-
plamento quasipartícula-cluster-vibrador.

USP/IF/SBI - 15/86

AGRADECIMENTOS

Gostaria de agradecer às pessoas e instituições que tornaram possível a realização desta tese:

Dr. Hélio Dias, pelo trabalho de orientação.

Dr. Francisco Krmpotić, pelo apoio e colaboração.

Dr^a Maria Carolina Nemes, pela leitura crítica dos manuscritos.

Prof. Alexandre A. Gilli Nader, pela revisão do texto.

Aos companheiros de Pós-Graduação.

Aos amigos do Departamento de Física da Universidade Federal da Paraíba.

À Rita L. Torriani e Cláudia C. Barioni, pelo zeloso trabalho na Secretaria de Pós-Graduação.

À Gina, pela datilografia, e ao João Carlos, pelos desenhos.

À CAPES e a Universidade Federal da Paraíba, pelo apoio financeiro.

RESUMO

Cálculos dos espectros (E, J^π) e das propriedades eletromagnéticas (μ, Q, BE_2, BM_1) são realizados para isótopos ímpares do Ni, e isótonos ímpares com $N=82$, empregando o modelo de camadas (MC), a aproximação BCS usual (uma e três quasipartículas), BCS com *blocking* (BBCS) e BCS projetada (PBCS). São examinadas, em detalhe, a importância das correlações de cinco quasipartículas e das correções introduzidas em BCS.

Os graus de liberdade coletivos do caroço são introduzidos através do acoplamento quasipartículas-*cluster*-vibrador (ACQPV), de modo que nosso formalismo possibilita tanto a inclusão de *blocking* como a projeção em número de partículas no *cluster* de uma e três quasipartículas. São realizados cálculos comparativos entre a versão com *blocking* (BQPCV) e com projeção (PQPCV) para os espectros e as propriedades eletromagnéticas de isótopos ímpares do Zn. A versão projetada é aplicada a isótopos do Césio, na descrição dos estados $5/2^+$ gerados pelo acoplamento anômalo.

Em todos os casos examinados, a comparação com os dados experimentais disponíveis também é apresentada.

ABSTRACT

We calculate nuclear spectra (E, J^π) and electromagnetic properties ($\mu, Q, BE2, BM1$) for odd Ni isotopes and $N=82$ odd nuclei, using the shell model (MC), the usual BCS approximation (one and three quasiparticles), blocking (BBCS) and projected (PBCS) BCS. The effects of five quasiparticles correlations and BCS corrections are carefully investigated.

We introduce the core collective degrees of freedom by the quasiparticle-cluster-vibration coupling (ACQPV), in such a way that our treatment makes possible to introduce both blocking and particle-number-projection in one and three quasiparticle cluster. Blocking (BQPCV) and projected (PQPCV) versions are compared for spectra and electromagnetic properties of odd Zn isotopes. Projected version is applied to Cs isotopes, in order to describe the $5/2^+$ states generated by anomalous coupling.

In every case, check with available experimental data is presented.

ÍNDICE

CAPÍTULOS	PÁGINAS
I. Introdução	1
II. Descrição de Núcleos Esféricos Ímpares de Sim- ples Camada Aberta	10
1. Introdução	10
1.a. O Modelo de Camadas	10
1.b. A Aproximação de Baixo Desemparelhamento	12
2. O Modelo de BCS	14
2.a. Introdução	14
2.b. A Determinação dos Parâmetros de Empare- lhamento	17
2.c. O Hamiltoniano e a Base de BCS	18
3. O Tratamento com <i>Blocking</i> (BBCS)	21
4. O Tratamento com Projeção em Número de Partí- culas (PBCS)	24
5. Método para o Cálculo com TDA no Espaço de Uma e Três Quasipartículas	28
5.a. O Cálculo do Espectro	28
5.b. O Cálculo das Transições e Momentos Ele- tromagnéticos	30
6. Algumas Características dos Tratamentos com Quasipartículas	31
III. Cálculos para Isótopos Ímpares do Níquel	35
1. Introdução	35
2. Parâmetros Utilizados	36
3. Influência das Componentes com $\nu=5$	36

CAPÍTULOS	PÁGINAS
3.a. Espectros	37
3.b. Momentos e Transições	51
3.c. Discussão	60
4. Influência dos Estados Ausentes na Base de BCS	62
4.a. Espectros	62
4.b. Momentos e Transições	63
4.c. Discussão	64
5. Influência das Correções Introduzidas em BCS.	64
5.a. Espectros	65
5.b. Momentos e Transições	66
5.c. Discussão	67
6. Influência da Interação Residual	71
7. Comparação com os Dados Experimentais	72
7.a. Espectros	73
7.b. Momentos e Transições	75
7.c. Discussão	80
IV. Cálculos para Isótonos Ímpares com $N=82$	81
1. Introdução	81
2. Parâmetros Utilizados	81
3. Influência das Componentes com $\nu=5$	82
3.a. Espectros	83
3.b. Momentos e Transições	96
3.c. Discussão	101
4. Influência dos Estados com $\nu=1$ e $\nu=3$ Ausentes na Base de BCS	103
4.a. Espectros	103
4.b. Momentos e Transições	104
4.c. Discussão	104

CAPÍTULOS	PÁGINAS
5. Influência das Correções Introduzidas em BCS	105
5.a. Espectros	105
5.b. Momentos e Transições	107
5.c. Discussão	108
6. Comparação com os Dados Experimentais	112
V. Descrição de Núcleos Esféricos Par-Ímpar	116
1. Introdução	116
2. Formalismo para o Acoplamento Quasipartícu - la- <i>cluster</i> -vibrador (ACQPV)	116
2.a. A Base e o Hamiltoniano	116
2.b. Operadores Eletromagnéticos	119
3. Modelos para o ACQPV	120
4. Algumas Características do Acoplamento ACQPV	121
5. Cálculos para os Isótopos do Zinco	126
5.a. Espectros	126
5.b. Propriedades Eletromagnéticas	132
5.c. Sumário	136
6. Cálculos para os Isótopos do Césio	137
VI. Discussões e Conclusões	141

APÊNDICES

A. Elementos de Matriz e Outras Expressões Ne- cessárias ao Cálculo de Espectros Nucleares e Transições Eletromagnéticas	145
B. Os Elementos de Matriz da Interação Residual	159
C. Técnica para a Eliminação de Estados Espúrios	161

APÊNDICES

PÁGINAS

D. Elementos de Matriz de Partícula Única dos Operadores Eletromagnéticos	165
E. Elementos de Matriz para o Acoplamento Quasi-partícula- <i>cluster</i> -vibrador	167
REFERÊNCIAS	169

CAPÍTULO I. INTRODUÇÃO

Do ponto de vista dos físicos nucleares, o núcleo representa um sistema de muitos férmions (núcleons) fortemente interagentes. Portanto, não é imediato concluir que interações de dois corpos tais como deduzidas de experiências de espalhamento núcleon-núcleon sejam adequadas para descrever a hamiltoniana nuclear de muitos corpos. No entanto, embora a determinação precisa do potencial nuclear de muitos corpos seja ainda reconhecidamente um problema em aberto, existem várias características experimentais dos espectros nucleares que sugerem fortemente a introdução de modelos de campo médio, onde estados de partícula independente formam a base microscópica do tratamento da estrutura nuclear. Os espectros nucleares para baixas energias de excitação apresentam características típicas de estados de partícula independente, bem como de estados coletivos (bandas vibracionais e rotacionais). Estudos exaustivos de núcleos próximos a camadas fechadas têm demonstrado a adequação da aproximação de campo médio, que chamaremos, daqui por diante, por modelo de camadas, independente de um conhecimento mais profundo da interação nuclear.

Técnicas modernas e poderosos computadores eletrônicos permitem a análise de propriedades estáticas dos núcleos através do modelo de camadas (MC) para núcleos leves produzindo, mesmo nesses casos simples, estados dimensionados em alguns milhares de componentes.

Contudo, mesmo contando com todas as facilidades computacionais, para núcleos de massa média e elevada, o

emprego do modelo de camadas não permite uma descrição correta da estrutura de cada nível acima de 3 MeV de energia de excitação. Esta barreira intransponível é causada pela necessidade de diagonalização de matrizes da ordem de 10^{14} - 10^{20} . Por exemplo, para o ^{154}Sm , considerando-se 22 núcleons em uma única camada de valência e um caroço inerte correspondente ao $^{132}_{50}\text{Sn}_{82}$, o tempo de computação atual necessário para o cálculo de um único *spin* é da ordem de um século.

Dentro desse contexto, coloca-se, naturalmente, a necessidade de se desenvolver modelos ainda mais simples, que contenham a física essencial para a descrição dessas mesmas propriedades espectrais para núcleos pesados. Uma alternativa que tem sido largamente utilizada é a aproximação BCS, que utiliza um potencial esquemático de emparelhamento, i.é., que tem elementos de matriz não nulos só para estados com momento angular total nulo. A justificativa física para tal simplificação provém do fato de que interações nucleares de dois corpos empíricas mostram que em núcleos esféricos pares de simples camada aberta (s.c.a), o canal dominante é o que acopla estados com momento angular total $J=0$. A teoria de BCS⁽¹⁻⁵⁾, cujo estado de vácuo é uma aproximação para o cálculo de MC de desemparelhamento^(†) zero, propõe um método simples e preciso para a inclusão de correlações de emparelhamento que possibilita a descrição de núcleos esféricos (s.c.a) com um espaço sensivelmente menor. Outras aproximações, além desta, serão discutidas no texto. A principal dificuldade com todas essas aproximações ao modelo de camadas é um controle rigoroso

(†) Neste trabalho adotamos desemparelhamento para a tradução de "senhorigity".

so das mesmas.

O objetivo principal deste trabalho é a efetivação de cálculos comparativos entre várias aproximações ao modelo de camadas tendo como referência um cálculo "exato", i.é., um cálculo utilizando-se o modelo de camadas. Existe na literatura várias tentativas neste sentido, que esbarram, no entanto, em limitações importantes, tais como o emprego de interações residuais distintas.

Nosso objetivo, portanto, é apresentar a primeira sistemática completa de comparação, para sistemas com várias partículas de valência, entre aproximações no espaço de uma e três quasipartículas dentro da aproximação BCS e outras derivadas desta.

As únicas versões do modelo de camadas aplicáveis em núcleos de massa média e pesada com camadas abertas são as baseadas na aproximação BCS. Uma dessas aproximações largamente utilizadas na descrição de núcleos com uma camada aberta é a aproximação *Tamm-Dancoff* (TDA). Porém, o emprego da base de BCS esbarra em outras dificuldades, todas decorrentes do uso de funções de onda com número indefinido de partículas. Dentre elas duas se destacam: a determinação dos parâmetros supercondutores e a eliminação dos estados espúrios. Os estados espúrios originados pela não conservação do número de partículas na aproximação BCS podem, entretanto, ser eliminados de forma parcial através do método empregado por Kuo e outros⁵⁾. A eliminação completa desses estados espúrios pode ser conseguida com a projeção em número de partículas⁶⁻⁹⁾. Nesse formalismo mais elaborado, denominado por aproximação BCS projetada (PBCS), perde-se, entretanto, a transparência físi-

ca que é uma das principais vantagens da aproximação BCS. Por outro lado, a aproximação PBCS não leva em conta o fato de que as correlações de emparelhamento podem ser diferentes para diferentes estados nucleares, já que a difusividade da superfície de Fermi para todos os estados é determinada a partir do estado fundamental de BCS. Sabemos, entretanto, que a superfície de Fermi torna-se cada vez mais estreita à medida que o número de quasipartículas aumenta e que as correlações de emparelhamento diminuem com a energia de excitação. Um aperfeiçoamento nos métodos BCS e PBCS seria portanto efetuar uma minimização da energia para cada estado com respeito a sua energia total. A importância deste efeito, chamado efeito *blocking*, na descrição de núcleos ímpares tem sido salientada nas referências 10-15. O formalismo BCS com *blocking* (BBCS) retém a simplicidade do método de BCS, entretanto os estados espúrios ainda persistem. A comparação entre as aproximações BCS, BBCS e PBCS para os isótonos ímpares com $N=82$ foi feita somente por H. Dias e F. Krmpotić^{14,15}). Entretanto, as conclusões para os núcleos com várias partículas (mais do que 3) na camada de valência ficaram prejudicadas pela não comparação com os resultados do MC, e a importância das correlações de cinco quasipartículas (5QP) não foi examinada.

Tendo por objetivo verificar a importância das correções introduzidas na aproximação BCS, que se mostraram fundamentais na descrição dos núcleos com três partículas de valência^{14,15}), e das correlações de 5QP, efetuamos uma comparação detalhada entre as diferentes aproximações BCS, com TDA no sub-espço de uma e três quasipartículas (1QP+3QP), e o modelo de camadas para sistemas com várias partículas de valência.

Vários cálculos comparativos ao MC têm sido efetuados onde, geralmente, os dados experimentais, ou o cálculo com o MC com diferente parametrização, são tomados como referência. Assim, conclusões mais definitivas não podem ser estabelecidas a partir desses trabalhos, pois, para tanto, faz-se necessário a comparação entre as aproximações empregando-se a mesma interação residual e o mesmo conjunto de parâmetros, tendo como referência o cálculo com o MC efetuado exatamente nas mesmas circunstâncias. Esse foi o critério adotado neste trabalho para a comparação das aproximações, onde as parametrizações empregadas, embora não visando o melhor ajuste dos dados experimentais, proporcionam, pelo menos, uma descrição razoável em termos realistas dos núcleos considerados.

O presente trabalho consiste de duas partes:

- na primeira parte, capítulos II, III e IV, investigamos de forma detalhada e sistemática a influência dos graus de liberdade não considerados e das correções introduzidas em BCS, em sistemas com várias partículas de valência. O cálculo com o modelo de camadas, que corresponde ao cálculo "exato" para as aproximações empregadas, é tomado como referência.

No capítulo II, apresentamos os formalismos para as aproximações MC, MC3, BCS, BBCS e PBCS, empregadas na descrição dos núcleos esféricos ímpares de simples camada aberta.

A fim de examinar a importância das diferentes aproximações, nossa primeira preocupação foi a escolha de uma camada onde o cálculo com MC, sem restrições, fosse possível para uma seqüência completa de núcleos ímpares. A camada

fp satisfaz esse requisito. Nessa região de massa os isótopos do Níquel são os núcleos que têm recebido maior atenção e, na descrição de suas propriedades, a interação SDI tem sido aplicada com razoável sucesso¹⁶⁾.

No capítulo III, apresentamos uma comparação detalhada entre os resultados obtidos para os isótopos do Níquel, com as aproximações MC3, BCS, BBCS e PBCS, em relação aos valores obtidos com MC.

Nossa segunda preocupação foi investigar as características das aproximações citadas, numa região de massa onde o emprego de aproximações ao modelo de camadas fosse imprescindível. É de maior importância o estudo de aproximações ao MC para núcleos com partículas de valência na camada $N=50-82$, onde os cálculos com MC, para $n > 5$ partículas de valência, só são praticáveis com a base truncada^{17,18)}. Já para núcleos ímpares, com 7 ou mais partículas de valência, o cálculo com MC, sem restrições, considerando apenas 4 orbitais de partícula independente envolve de 10^3 a 10^4 configurações por *spin*. A tabela IV.1 mostra como é apreciável a redução obtida com BCS, de tal forma que o cálculo completo, com 5 orbitais, envolve no máximo 37 vetores.

No capítulo IV, apresentamos a comparação entre os resultados obtidos para os isótonos ímpares com $N=82$, com as aproximações BCS, BBCS e PBCS em relação aos obtidos com o modelo de camadas truncado MC3. Para $n \leq 5$ partículas de valência os resultados com MC são também analisados.

- após o estabelecimento da importância das diferentes correções introduzidas na aproximação BCS, nosso próximo passo foi a inclusão dos graus de liberdade coleti-

vos do caroço, através do acoplamento quasipartícula-*cluster*-vibrador (ACQPV).

Uma descrição quantizada de um sistema de muitos corpos pode ser dada geralmente em termo de modos de excitações elementares e seus acoplamentos¹⁹⁾. Excitações elementares do tipo fermiônico ou bosônico em núcleos esféricos e transicionais são associadas, respectivamente, a partículas de valência e a vibrações de baixa frequência.

A partir da idéia original de Bohr e Mottelson²⁰⁾, o acoplamento partícula-vibrador quadrupolar (APV), várias extensões e refinamentos foram implementados.

O acoplamento quasipartícula-vibrador (AQPV) de Kisslinger e Sorensen²¹⁾ representa uma extensão do APV na qual os efeitos de emparelhamento da força residual são incluídos através da quasipartícula. Correlações adicionais são incluídas pelo emprego de fônons quadrupolares não harmônicos em AQPV²²⁾.

Um modo bastante conveniente de descrever as anarmonicidades é a hamiltoniana $SU(6)$ de Janssen, Jolos e Dönau^{23,24)}, para os fônons quadrupolares, desde que esta reproduz os limites vibracional [$SU(5)$] e rotacional [$SU(3)$]²⁵⁾. Esse tipo de anarmonicidade foi recentemente incluída em AQPV, acoplando uma quasipartícula a fônons de quadrupolo $SU(6)$; no limite quase-rotacional os estados do tipo Nilsson são reproduzidos²⁶⁾. O mesmo resultado tem sido obtido pelo acoplamento da partícula a um caroço $SU(6)$ ^{27,28)} na representação da aproximação dos bósons interagentes (ABI) de Arima e Iachello²⁹⁾.

Uma etapa posterior é a introdução dos efeitos cinemáticos, ou seja, o princípio de Pauli, entre as quasi

partículas que aparecem na estrutura interna dos fônons³⁰⁻³³). A contribuição devida a esse efeito cinemático é chamada de termo de troca. O modelo fenomenológico com um termo de troca adicionado ao AQPV será denotado por AQPTV.

O termo de troca para partículas ou buracos próximos a núcleos duplamente mágicos tem sido tratado através da teoria de perturbação³¹⁻³⁴). Este foi também introduzido no acoplamento quasipartícula-vibrador quadrupolar $SU(6)$ ²⁶), e equivalentemente no ABI^{27,28}).

O acoplamento com termo de troca AQPTV é uma generalização do APV. Uma generalização que inclui ambos efeitos, cinemáticos e dinâmicos, é o acoplamento *cluster*-vibrador (ACV).

No ACV algumas partículas ou buracos (denotados por *cluster*) são acoplados aos fônons quadrupolares, onde para as partículas do *cluster* o princípio de Pauli é considerado exatamente.

O ACV foi introduzido primeiramente para núcleos par-par por Scharff-Goldhaber e Weneser³⁵) e Raz³⁶) e, para núcleos par-ímpar, por Alaga³⁷).

No modelo de Alaga três partículas são acopladas a vibrações quadrupolares e, tanto os efeitos dinâmicos (acoplamento partícula-vibrador) quanto os efeitos cinemáticos (consideração explícita do princípio de Pauli entre as partículas de valência), são incluídos.

Uma extensão simples de modo a considerar 5, 7, 9, ... partículas no *cluster* é aproximar o *cluster* de partículas por um com uma e três quasipartículas, ou seja, considerar o acoplamento quasipartícula-*cluster*-vibrador (ACQPV).

Na segunda parte deste trabalho, capítulo V, introduzimos o ACQPV, e os modelos derivados permitem o tratamento dos núcleos esféricos par-ímpar tanto com o efeito de *blocking* como com a projeção em número de partículas incluídos no *cluster* de quasipartículas. A inclusão do ACQPV foi feita recentemente por K. Allaart e outros³⁸⁾, porém apenas a projeção em número de partículas foi considerada no *cluster*.

Como o intuito de examinar as características reveladas com ACQPV, e a importância das diferentes correções introduzidas no *cluster*, as versões com *blocking* (BQPCV) e com projeção (PQPCV) são aplicadas aos isótopos do Zinco, seus resultados são comparadas ao cálculo com MC³⁹⁾ e aos dados experimentais existentes. A influência do corte da base, um ponto delicado no tratamento com ACQPV, é também examinada.

A característica mais marcante do acoplamento ACQPV que não pode ser reproduzida com o simples acoplamento quasipartícula-vibrador, é o acoplamento anômalo para o estado com *spin* $I=(j-1)$ ⁴⁰⁾, descrito na seção V.4.

Finalmente, a versão PQPCV é aplicada na descrição das propriedades do estado coletivo $5/2^+$ (gerado pelo acoplamento anômalo) dos isótopos do Césio.

CAPÍTULO II. DESCRIÇÃO DE NÚCLEOS ESFÉRICOS ÍMPARES DE SIMPLES CAMADA ABERTA

1. INTRODUÇÃO

Neste capítulo, apresentamos uma introdução breve e esquemática aos tratamentos empregados neste trabalho na descrição de núcleos esféricos de simples camada aberta (s.c.a). As notações essenciais são introduzidas e as seguintes idéias básicas são brevemente discutidas: o conceito de desemparelhamento, a noção de quase-partícula, o efeito *blocking* e a idéia de projeção em número de partículas. Uma descrição mais detalhada pode ser obtida nas referências (1-15). O formalismo adequado ao tratamento com o modelo de camadas para núcleos com várias partículas na camada de valência (núcleos complexos) está descrito na referência (41), do qual podem ser derivadas todas as expressões necessárias aos cálculos com o modelo de camadas (MC e MC3).

As expressões explícitas dos elementos de matriz do hamiltoniano e do operador de um corpo necessárias aos tratamentos com quase-partículas empregadas (BCS, BBBCS e PBCS) estão dadas no apêndice A.

1.a. O Modelo de Camadas (MC)

Em segunda quantização o hamiltoniano do modelo de camadas é dado por $\hat{H} = \hat{H}_{sp} + \hat{H}_{res}$, onde o hamiltoniano de partícula única é escrito como:

$$\hat{H}_{SP} = \sum_{\alpha} \epsilon_{\alpha} c_{\alpha}^{\dagger} c_{\alpha} \quad (\text{II.1.a})$$

onde c_{α}^{+} (c_{α}) corresponde ao operador de criação (aniquilação) de uma partícula no estado ϕ_{α} , e o hamiltoniano da interação residual entre as partículas de valência é:

$$\hat{H}_{\text{res}} = \frac{1}{4} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} V_{\alpha\beta\gamma\delta} c_{\alpha}^{+} c_{\beta}^{+} c_{\delta} c_{\gamma}. \quad (\text{II.1.b})$$

O estado de partícula única ϕ_{α} do potencial central é caracterizada por $\underline{\alpha}$, que representa o conjunto de números quânticos $\alpha \equiv (n_a, \ell_a, j_a, m_a) \equiv (a, m_a)$, com energia ϵ_a e degenerência $\hat{a}^2 = 2j_a + 1$. O elemento de matriz anti-simetrizada da interação efetiva, $V_{\alpha\beta\gamma\delta}$, entre dois núcleos no potencial central pode ser escrito como²⁾:

$$V_{\alpha\beta\gamma\delta} = \frac{1}{2} \sum_{JM} \langle j_a m_a j_b m_b | JM \rangle \langle j_c m_c j_d m_d | JM \rangle g_J(abcd) = \quad (\text{II.2.a})$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{JM} \langle j_a m_a j_c m_c | JM \rangle \langle j_d m_d j_b m_b | JM \rangle (-)^{j_b - m_b} (-)^{j_c - m_c} f_J(acdb) \quad (\text{II.2.b})$$

onde $g_J(abcd)$ representa o elemento de matriz partícula-partícula e $f_J(acdb)$ o elemento partícula-buraco, cujas expressões explícitas para as interações usadas neste trabalho são dadas no apêndice B.

No tratamento com MC os estados mais baixos do núcleo considerado são encontradas, pela diagonalização do operador \hat{H} , na base de estados do MC para todas configurações possíveis dos núcleons presentes nos orbitais considerados. Para um espaço modelo de uma camada - que é o espaço mínimo necessário para a descrição das propriedades a baixa energia de núcleos s.c.a - esse número de configurações torna-se proibi-

tivamente grande, exceto para os núcleos mais leves. Um avanço significativo na redução do problema foi o reconhecimento de que a interação efetiva contém uma forte componente de emparelhamento (Bohr e outros (1958), Soloviev (1958), Belayev (1959)), ou seja, que os núcleons se movem preferencialmente aos pares (acoplados a $J = 0$). Este fato é evidenciado por vários fenômenos observados, tais como: momentos de inércia menores que os previstos pelo modelo de camadas, o hiato (*gap*) de energia nos espectros dos núcleos par-par, e a diferença de massa par-ímpar. Uma idéia importante e simplificadora que surge naturalmente desses resultados é a consideração explícita apenas dos núcleons desemparelhados.

1.b. A Aproximação de Baixo Desemparelhamento* (MC3)

Devido a destacada predominância da componente de emparelhamento na interação efetiva, supomos que os núcleons se movem aos pares.

Definimos o operador par A_{00}^+ (aa), que cria um par no orbital a , por:

$$A_{JM}^+ (ab) = [c_a^+ \times c_b^+]_M^J \equiv \sum_{m_a m_b} \langle j_a m_a j_b m_b | JM \rangle c_{\beta}^+ c_{\alpha}^+ \quad (\text{II.3})$$

O número de núcleons na camada de valência que não ocorrem aos pares é denominado de número de desemparelhamento (ν)⁴²). Desde que a quebra de um par custa energia-por

* Neste trabalho a tradução adotada para "senhority" é desemparelhamento.

causa da interação de emparelhamento - o espectro de baixa energia de núcleos s.c.a., são suficientemente bem descritos em termos de estados com baixo desemparelhamento^{1,43,44)} (veja, por exemplo, os espectros para isótopos ^{61,63}Ni apresentados nas figuras III.2 e III.3). Escrevemos estes estados - exceto por um fator de normalização - para:

- núcleos pares:

$$\nu=0$$

$$|p_1 \dots p_n; \nu=0\rangle \propto \prod_{a=a_1}^{a_n} \left[\frac{\hat{a}}{2} A_{OO}^+(aa) \right]^{p_a} |0\rangle, \quad (\text{II.4})$$

\underline{n} é o número de níveis no espaço modelo e \underline{p}_a denota o número de pares no nível \underline{a} com:

$$\sum_{a=a_1}^{a_n} p_a = n_0/2 \quad (\text{II.5})$$

onde n_0 é o número de nucleons na camada aberta.

$$\nu=2$$

$$|abJ; p_1 \dots p_n; \nu(ab)=2\rangle \propto A_{JM}^+(ab) |p_1 \dots p_n; \nu=0\rangle \quad (\text{II.6})$$

e assim por diante.

- núcleos ímpares:

$$\nu=1$$

$$|a; p_1 \dots p_n; \nu(a)=1\rangle \propto c_\alpha^+ |p_1 \dots p_n; \nu=0\rangle \quad (\text{II.7})$$

$$\nu=3$$

$$|abJcJ; p_1 \dots p_n; \nu(abc)=3\rangle \propto [A_J^+(ab) c_c^+]^J |p_1 \dots p_n; \nu=0\rangle \quad (\text{II.8})$$

e assim, sucessivamente.

Os elementos de matriz do hamiltoniano \hat{H} entre esses estados são dados nas referências (45-49). Uma introdução, mais completa, ao MC de baixo desemparelhamento é encontrada na referência (1).

Para espaços maiores do que uma camada, ou mesmo para uma única camada com vários orbitais, o espaço de configurações com baixo desemparelhamento vai se tornando muito grande. Assim uma nova redução no número de configurações é necessária, tanto do ponto de vista computacional como também devido a idéia de selecionar os graus de liberdade mais significativos.

Em nosso tratamento dos núcleos ímpares s.c.a usamos a aproximação de baixo desemparelhamento para o MC, com a base truncada até $v \leq 3$, a qual denominaremos simplesmente por MC3.

2. O MODELO DE BCS

2.a. Introdução

Uma aproximação para o cálculo de MC de baixo desemparelhamento é o tratamento com quase-partículas. O estado de BCS⁵⁰⁾, uma aproximação para o estado fundamental com desemparelhamento zero de núcleos s.c.a, é dado por:

$$|\psi_0\rangle = \prod_{\alpha>0} (u_{\alpha} + v_{\alpha} c_{\alpha}^{+} c_{\bar{\alpha}}^{+}) |0\rangle, \quad (\text{II.9})$$

que é o vácuo de entidades chamadas "quase-partículas" (QP), que são criadas pelo operador a_{α}^{+} , definido pela relação:

$$a_{\alpha} |\psi_0\rangle = 0, \quad (\text{II.10})$$

satisfeita pela transformação de Bogoliubov-Valatin

$$\begin{pmatrix} a_{\alpha}^{+} \\ a_{\alpha}^{-} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_a & -v_a \\ v_a & u_a \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\alpha}^{+} \\ c_{\alpha}^{-} \end{pmatrix}, \quad (\text{II.11})$$

usando para a conjugação por inversão temporal a convenção:

$$c_{\alpha}^{-} \equiv c_{a\bar{m}\bar{a}} = (-)^{j_a - m_a} c_{a, -m_a}. \quad (\text{II.12})$$

Ainda da condição de normalização, temos:

$$u_a^2 + v_a^2 = 1 \quad (\text{II.13})$$

Essas entidades se comportam como férmions, satisfazendo as seguintes regras de anticomutação:

$$\{a_{\alpha}, a_{\beta}^{+}\} = \delta_{\alpha\beta} \quad (\text{II.14.a})$$

$$\{a_{\alpha}, a_{\beta}\} = \{a_{\alpha}^{+}, a_{\beta}^{+}\} = 0 \quad (\text{II.14.b})$$

A característica mais marcante da teoria de BCS é a distribuição em número de partículas das funções de onda empregadas. O vácuo de BCS, por exemplo, pode ser reescrito como:

$$|\psi_0\rangle = \sum_{n=0}^{n_{\max}} |\phi_{2n}\rangle, \quad (\text{II.15})$$

onde o termo correspondente a $2n$ -partículas é dado por:

$$|\phi_{2n}\rangle = \left(\prod_{\alpha>0} \frac{u_\alpha}{n!} \right) \left[\sum_{\alpha>0} \frac{v_\alpha}{u_\alpha} c_\alpha^+ c_\alpha^+ \right]^n |0\rangle. \quad (\text{II.16})$$

A probabilidade de haver $2n$ -partículas, neste estado, é obviamente $|\langle \phi_{2n} | \psi_0 \rangle|^2$, e é fácil ver que este é uma combinação linear de estados com diferentes números de partículas, representada esquematicamente na figura II.1. O peso das componentes com número de partículas indesejável é menor no tratamento com *blocking*, descrito em II.3, que aplicada a estados com uma ou mais quase-partículas torna a distribuição mais íngreme (vide figura II.1). A eliminação completa das componentes espúrias é obtida com a técnica conhecida na literatura como projeção em número de partículas, descrita em II.4, que consiste em trabalhar somente com a componente correspondente ao número de partículas desejado.

As características mais específicas devido ao uso de funções de onda com componentes espúrias são discutidas na seção II.6.

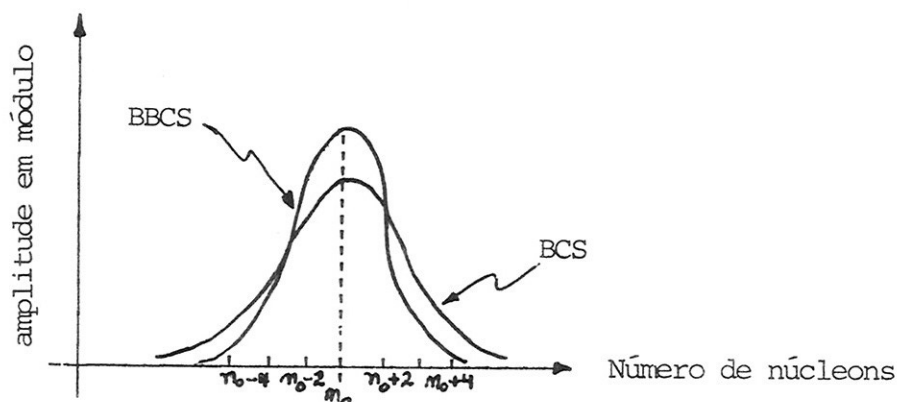


Fig.II.1. Representação esquemática das distribuições em números de núcleons para uma certa função de onda de nQP ($n>0$), com o modelo de BCS usual (BCS) e com o efeito de "blocking" (BBCS)

2.b. A Determinação dos Parâmetros de Emparelhamento

Como a função de onda de BCS (II.9) não é autofunção do operador número de partículas,

$$\hat{N} = \sum_{\alpha} c_{\alpha}^{\dagger} c_{\alpha}, \quad (\text{II.17})$$

isto impõe a necessidade de um cálculo variacional sujeito ao vínculo de que o valor esperado deste operador no estado de BCS $|\psi_0\rangle$, seja igual ao número de núcleons de valência, n_0 . Para minimizar \hat{H} com esse vínculo, devemos tomar:

$$\hat{\mathcal{K}} = \hat{H} - \lambda \hat{N} \quad (\text{II.18})$$

e ímpar:

$$\frac{\partial}{\partial v_a} \langle \psi_0 | \hat{\mathcal{K}} | \psi_0 \rangle = 0 \quad (\text{II.19})$$

com a condição:

$$\langle \psi_0 | \hat{N} | \psi_0 \rangle = n_0 \quad (\text{II.20})$$

O que nos leva às "equações de *gap*". Explicitemente:

$$2u_a v_a (\epsilon_a - \mu_a - \lambda) - (u_a^2 - v_a^2) \Delta_a = 0 \quad (\text{II.21})$$

e

$$\sum_a \hat{a}^2 v_a^2 = n_0, \quad (\text{II.22})$$

com o parâmetro de *gap*:

$$\Delta_a = -\frac{1}{4} \hat{a}^{-1} \sum_c \tilde{c} g_o(aacc) u_c v_c \quad (\text{II.23})$$

e as auto-energias:

$$\mu_a = -\frac{1}{2} \hat{a}^{-1} \sum_c f_o(aacc) v_c^2 \quad (\text{II.24})$$

A quantidade $2\Delta_a$ é a energia devida à quebra de um par, $2\mu_a$ a renormalização da energia de partícula única devida à contribuição da interação de emparelhamento para o campo médio, v_a e u_a são, respectivamente, as probabilidades de ocupação e desocupação do estado de partícula única ϕ_α , e λ_o potencial químico. Obviamente,

$$\lambda = \frac{\delta}{\delta N} \langle \psi_o | \hat{N} | \psi_o \rangle \quad (\text{II.25})$$

é a variação na energia do estado fundamental quando um núcleon é adicionado.

2.c. O Hamiltoniano e a Base de BCS

A fim de empregar o formalismo de BCS, o hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}$ deve ser reescrito em função dos operadores de criação e aniquilação de quase-partículas. Para tanto, usando a transformação inversa de (II.11):

$$\begin{pmatrix} c_\alpha^+ \\ c_\alpha^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_a & v_a \\ -v_a & u_a \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_\alpha^+ \\ a_\alpha^- \end{pmatrix} \quad (\text{II.26})$$

e as equações de *gap*, as relações (II.21) e (II.22), podemos reescrevê-lo como:

$$\mathcal{H} = E_{\text{BCS}} + \sum_{\alpha} E_a(\lambda) a_{\alpha}^{\dagger} a_{\alpha} + \mathcal{H}_{\text{int}}, \quad (\text{II.27})$$

onde, a energia do vácuo de quase-partículas é dada por:

$$E_{\text{BCS}} = \sum_a \hat{a}^2 \left[(\epsilon_a - \frac{1}{2} \mu_a) v_a^2 - \frac{1}{2} u_a v_a \Delta_a \right], \quad (\text{II.28})$$

e a energia de quase-partícula única por:

$$E_a(\lambda) = [(\epsilon_a - \mu_a - \lambda)^2 + \Delta_a^2]^{1/2} \quad (\text{II.29})$$

Assim, a transformação de Bogoliubov-Valatin introduz um sistema de quase-partículas com energias $E_a(\lambda)$, que interagem via \mathcal{H}_{int} . O hamiltoniano da interação residual entre as quase-partículas \mathcal{H}_{int} , envolve o produto de quatro operadores de QP, e pode ser escrito como:

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = H_{22} + H_{13} + H_{31} + H_{04} + H_{40}, \quad (\text{II.30})$$

as expressões explícitas para cada termo são dadas no apêndice A.

Este contém uma parte que conserva o número de quase-partículas (i.é., conserva ν) dada por H_{22} , partes que misturam estados que diferem de 2QP ($\Delta\nu = \pm 2$) dadas por H_{13} e H_{31} , ou 4QP ($\Delta\nu = \pm 4$) dadas por H_{04} e H_{40} . Conseqüentemente, a base de BCS, construída através da aplicação sucessiva do operador de criação de quase-partículas no vácuo de BCS, é separável em número de quase-partículas (i.é., em ν).

A base para o tratamento de núcleos pares é constituída de estados de 0QP, 2QP, 4QP etc. (i.é., estados com ν par); e para núcleos ímpares estados de 1QP, 3QP, 5QP etc. (i.é., estados com ν ímpar). Existem várias aproximações derivadas da teoria de BCS. Nelas a base é truncada em número de quase-partículas, o que apresenta a grande vantagem de reduzir o problema de muitas partículas a outro com poucas quase-partículas.

É fácil ver que o estado de 1QP:

$$\begin{aligned}
 |\psi(\alpha)\rangle &= a_{\alpha}^{+} |\psi_0\rangle \\
 &= c_{\alpha}^{+} \prod_{\substack{\beta > 0 \\ \neq \alpha}} (u_{\beta} + v_{\beta} c_{\beta}^{+} c_{\beta}^{+}) |0\rangle
 \end{aligned}
 \tag{II.31}$$

trata-se de uma combinação linear de estados com número ímpar de partículas. Conseqüentemente, pode ser usado como a descrição mais simples de um núcleo s.c.a. ímpar²³⁾. A existência menos energética é obtida com a quebra de um par, o que corresponde a um estado de 3QP ($\nu=3$). Portanto, a descrição dos estados menos energéticos é sensivelmente melhorada com a inclusão do estado de 3QP na base⁵⁾. O método empregado na construção do conjunto ortonormal completo de estados antissimetrizados de 3QP está descrito em detalhes na referência (5).

Um problema comum no tratamento com quase-partículas, devido a não conservação do número de partículas, é que algumas soluções da equação secular são espúrias. A técnica empregada em nosso tratamento⁵⁾ na eliminação de tais soluções está descrita no apêndice C.

3. O TRATAMENTO COM BLOCKING (BBCS)

As equações de *gap*, relações (II.21) e (II.22), garantem a conservação do número médio de partículas somente para o vácuo de BCS (i.é., para o estado de zero QP). A fim de impô-la para toda base, devemos, também, para cada um dos demais estados $|iQP\rangle$ ($i=1,2,3,\dots$) resolver o problema variacional.

$$\delta \langle iQP | \hat{H} | iQP \rangle = 0 \quad (\text{II.32})$$

$$\langle iQP | \hat{N} | iQP \rangle = n_o \quad (\text{II.33})$$

Como decorrência, os parâmetros supercondutores (v, v, λ, Δ) para estados com diferente número de quase-partículas ou com quase-partículas em diferentes estados serão diferentes. O efeito das partículas desemparelhadas nas propriedades superfluídas de um sistema é conhecido como "efeito de *blocking*"¹³⁾. Isto porque, como podemos ver explicitamente nas equações que se seguem, relações (II.34) a (II.40), em todo nível de partícula única que contém quase-partículas desemparelhadas, os respectivos estados não participam nos cálculos das características superfluídas; o que implica numa redução no efeito devido à força de emparelhamento.

O fato de que o efeito de *blocking* pode levar a redução no emparelhamento é bem conhecido¹¹⁾. Várias diferenças par-ímpar (massa, energias de excitação em baixo espectro⁵¹⁾, momento de inércia⁵²⁾, reação de transferência de duas partículas⁵³⁾ etc.) são devidas, essencialmente, aos efeitos de *blocking*. Uma descrição mais detalhada desse efeito pode ser encontrada nas referências (10-15).

A seguir, descrevemos o tratamento específico dado neste trabalho usando a interação de emparelhamento, uma vez que com SDI as soluções das equações de *gap* são numericamente impraticáveis e, neste caso, a diferença entre elas reside somente nas auto-energias. As expressões para um interação genérica de dois corpos são dadas na referência (14).

Para o estado de 1QP,

$$\begin{aligned}
 |\psi(\alpha)\rangle &= a_{\alpha}^{+} |\psi_0\rangle \\
 &= c_{\alpha}^{+} \prod_{\substack{\sigma \neq \alpha \\ > 0}} (u_{\sigma} + v_{\sigma} \frac{+}{\sigma}) |0\rangle;
 \end{aligned}
 \tag{II.34}$$

através do método variacional mencionado, obtemos as equações de *gap*:

$$2u_{\mathbf{a}}(a)v_{\mathbf{a}}(a)(\epsilon_{\mathbf{a}} - \mu_{\mathbf{a}} - \lambda_{\mathbf{a}}) - (u_{\mathbf{a}}^2(a) - v_{\mathbf{a}}^2(a))\Delta_{\mathbf{a}}(a) = 0 \tag{II.35}$$

e

$$\sum_{\mathbf{s} \neq \mathbf{a}} \hat{s}^2 v_{\mathbf{s}}^2(a) + 1 = n_0, \tag{II.36}$$

com

$$\Delta_{\mathbf{a}}(a) = G \sum_{\mathbf{s} \neq \mathbf{a}} u_{\mathbf{s}}(a)v_{\mathbf{s}}(a). \tag{II.37}$$

Para o estado de 3QP de senioridade 3 ($J_1 \neq 0$),

$$\begin{aligned}
 |\psi(abJ_1c;JM)\rangle &= [(a_a^+ \times a_b^+)^{J_1} \times a_c^+]_M^J |\psi_0\rangle \\
 &= [(c_a^+ \times c_b^+)^{J_1} \times c_c^+]_M^J \prod_{\substack{\sigma \neq \alpha, \beta, \gamma \\ > 0}} (u_s + v_s c_\sigma^+ c_\sigma^+) |0\rangle,
 \end{aligned}
 \tag{II.38}$$

obtemos as equações de *gap*:

$$2u_s(abc)v_s(abc)(\epsilon_s - \mu_s - \lambda_{abc}) - (u_s^2(abc) - v_s^2(abc))\Delta_s(abc) = 0 \tag{II.39}$$

e

$$\sum_{s=a,b,c} \hat{s}^2 v_s^2(abc) + 3 = n_0. \tag{II.40}$$

O caso dos estados de 3QP com $\nu=1$ é delicado e o tratamento com *blocking* esbarra nas seguintes dificuldades: as equações de *gap* apresentam indeterminação, as funções de onda com $\nu=1$ não são ortogonais entre si, e não é claro como eliminar os estados espúrios. Para superá-las adotamos, nesses casos, os mesmos parâmetros supercondutores do correspondente estado de uma quase-partícula, ou seja, tomamos $u_s(aac) = u_s(c)$ e $v_s(aac) = v_s(c)$.

Com essa aproximação, a base torna-se ortogonal e podemos empregar a mesma técnica utilizada em BCS para a projeção dos estados espúrios.

Outra dificuldade aparente seria a indeterminação dos parâmetros supercondutores nas equações de *gap* para 1QP quando temos a quase-partícula com $j = \frac{1}{2}$, ou para 3QP ($\nu=3$) quando temos, ou uma delas com $j = \frac{1}{2}$, e/ou duas com $j = \frac{3}{2}$, ou as três com $j = \frac{5}{2}$. Porém, como podemos observar, as respectivas funções de onda, relações (II.34) e (II.38), nes-

ses casos não dependem desses valores e por decorrência, os elementos de matriz, tanto do hamiltoniano quanto do operador de um corpo, são também independentes. Isto pode ser verificado manipulando-se as expressões do apêndice A. Como ilustração, explicitamos no apêndice A algumas expressões para alguns desses casos particulares.

A única dependência ocorre nas auto-energias μ_s , com a interação SDI, no cálculo das energias não perturbadas desses estados. Assim, com o propósito de introduzir o efeito de *blocking* de modo a melhorar a aproximação de BCS, nesses casos mantivemos os mesmos valores dos parâmetros u e v usados no tratamento com BCS usual. A escolha de tais valores pouco influi nos resultados, uma vez que as auto-energias são apenas renormalização das energias de partícula-única.

4. O TRATAMENTO COM PROJEÇÃO EM NÚMERO DE PARTÍCULAS (PBCS)

Através do método de projeção⁵⁾ empregado nos tratamentos anteriormente descritos, BCS e BBCS, conseguimos apenas uma eliminação parcial dos estados espúrios. A solução completa do problema só é obtida tomando-se as componentes dos vetores da base que correspondem a um número fixo de partículas. Essas componentes são denominadas "estados projetados"⁶⁻⁹⁾.

Existe na literatura várias técnicas para o tratamento com a base projetada. Descrevemos, a seguir, a técnica por nós empregada baseada no uso das funções geratri

zes 7).

Introduzimos as funções geratrizes para os estados 1QP e 3QP definidas como:

$$|\psi(\alpha, z)\rangle = a_{\alpha}^{+}(z) |\psi_0(z)\rangle \quad (\text{II.41})$$

e

$$|\psi(abJ_1c; JM; z)\rangle = [a_c^{+}(z) \times (a_b^{+}(z) \times a_a^{+}(z))^{\text{J}_1}]_M^{\text{J}} |\psi_0(z)\rangle, \quad (\text{II.42})$$

com

$$a_{\alpha}^{+}(z) = (u_a z c_{\alpha}^{+} - v_a c_{\alpha}^{-}) \quad (\text{II.43})$$

e a função geratriz para o vácuo dada por:

$$|\psi_0(z)\rangle = \prod_{\alpha>0} (u_a + z v_a c_{\alpha}^{+} c_{\alpha}^{-}) |0\rangle \quad (\text{II.44})$$

Além do teorema dos resíduos

$$\frac{1}{2\pi i} \oint \frac{dz}{z^n} = \delta_{n,1} \quad (\text{II.45})$$

podemos obter os elementos de matriz dos estados projetados com $2p+1$ partículas, para qualquer operador \hat{O} , usando as seguintes propriedades:

$$\langle \psi_{2p+1}(\alpha) | \hat{O} | \psi_{2p+1}(\beta) \rangle = \frac{1}{2\pi i} \oint \frac{dz}{z^{2p+3}} \langle \psi(\alpha, z) | \hat{O} | \psi(\beta; z) \rangle \quad (\text{II.46})$$

$$\langle \psi_{2p+1}(\alpha) | \hat{O} | \psi_{2p+1}(abJ_1c; JM) \rangle = \frac{1}{2\pi i} \oint \frac{dz}{z^{2p+4}} \langle \psi(\alpha, z) | \hat{O} | \psi(abJ_1c; JM; z) \rangle \quad (\text{II.47})$$

$$\begin{aligned}
\langle \psi_{2p+1}(abJ_1c; JM) | \hat{O} | \psi_{2p+1}(dcJ_1f; J'M') \rangle &= \\
= \frac{1}{2\pi i} \oint \frac{dz}{z^{2p+5}} \langle \psi(abJ_1c; JM; z) | \hat{O} | \psi(dcJ_1f; J'M'; z) \rangle, & \quad (II.48)
\end{aligned}$$

onde o contorno de integração inclui a origem.

Para o cálculo dos elementos de matriz, é conveniente definir um novo conjunto de operadores satisfazendo:

$$d_\alpha | \psi_0(z) \rangle = 0 \quad (II.49)$$

No apêndice A esses operadores são introduzidos por meio de uma transformação canônica apropriada¹⁵⁾, e os elementos de matriz necessários são calculados.

Com esse formalismo, dois são os procedimentos comumente usados na determinação dos parâmetros supercondutores. Num, empregado neste trabalho, são obtidos simplesmente das equações de *gap* usuais (PBCS), noutro através das equações de *gap* para os estados projetados^{54,55)} (FBCS).

O maior inconveniente da base projetada é sua supercompleteza e não ortogonalidade. Como podemos ver da relação:

$$(u_c^2 - v_c^2) | \psi_{2p+1}(\gamma) \rangle = \sum_a \hat{a} u_a v_a | \psi_{2p+1}(aaoc; \gamma) \rangle, \quad (II.50)$$

Os estados com desemparelhamento 1 (i.é, estados de 1QP e 3QP ($v=1$) não são ortogonais entre si. É claro que para ortogonalizar a base basta ortogonalizar o subespaço dos estados com $v=1$. Para isso empregamos o método

descrito a seguir:

- considerando-se n configurações de partícula-única, o subespaço de estados de $v=1$ com momento angular já é dado por:

$$\begin{aligned}
 |\psi_{2p+1}(\alpha)\rangle &= \psi_0 \\
 |\psi_{2p+1}(j_1 j_1 \circ j_a; \alpha)\rangle &= \psi_1 \\
 |\psi_{2p+1}(j_n j_n \circ j_a; \alpha)\rangle &= \psi_n
 \end{aligned}
 \tag{II.51}$$

Um vetor é removido do subespaço $\{\psi_k\}$ e os estados ϕ_1, \dots, ϕ_n são construídos pelo procedimento de ortogonalização de Schmidt tradicional⁵⁶⁾, onde ϕ_2, \dots, ϕ_n são ortogonais a ψ_0 e entre si. O novo subespaço ortogonal $\{\phi_i\}$ é então convenientemente indexado:

$$\begin{aligned}
 \widetilde{|(j_1 j_1)0; j_a\rangle} &\equiv \psi_0 \equiv \phi_1 \\
 \widetilde{|(j_2 j_2)0; j_a\rangle} &\equiv \phi_2 \\
 \widetilde{|(j_n j_n)0; j_a\rangle} &\equiv \phi_n
 \end{aligned}
 \tag{II.52}$$

Nesse procedimento, calculamos numericamente o conjunto dos coeficientes A_{ik} , que relaciona o subespaço supercompleto $\{\psi_k\}$ e o novo subespaço ortogonalizado $\{\widetilde{|(j_i j_i)0; j_a\rangle}\}$ por:

$$\widetilde{|(j_i j_i)0; j_a\rangle} = \sum_{k=0}^n A_{ik} \langle \psi_k | \psi_k \rangle^{-1} \psi_k
 \tag{II.53}$$

A nova base é finalmente composta pelo novo subespaço $\{ |(j_i j_i) 0; j_a \rangle \}$ para os estados com desemparelhamento um, e dos mesmos estados com desemparelhamento três.

5. MÉTODO PARA O CÁLCULO COM TDA NO ESPAÇO DE UMA E TRÊS QUASE-PARTÍCULAS

5.a. O Cálculo do Espectro

Nessa seção, descrevemos o procedimento utilizado no cálculo das energias e autofunções de núcleos esféricos de uma camada aberta, com uma interação residual de dois corpos genérica. Os passos a serem seguidos são:

- (i) através da transformação de Bogoliubov-Valatin inversa reescrevemos o hamiltoniano do modelo de camadas em função dos operadores de criação e aniquilação de quase-partículas. No apêndice A, reescrevemos \mathcal{H} por meio de uma transformação canônica apropriada que introduz simultaneamente o efeito de *blocking* e a projeção em número de partículas¹⁵⁾;
- (ii) como no modelo de camadas usual, escolhemos a interação residual e os níveis de partícula única, convenientes para o tratamento do núcleo em questão. Em nosso trabalho usamos como interação residual a delta de superfície (SDI)⁵⁷⁾, cujas características são sucintamente discutidas no apêndice B.

- (iii) A partir das "equações de *gap*", onde empregamos a interação de emparelhamento, determinamos os parâmetros supercondutores. Com *blocking* para cada estado, um conjunto de equações de *gap* é resolvido, vide II.3;
- (iv) a hamiltoniana é, então, diagonalizada no espaço de 1QP e 3QP, para o qual a equação secular para o *i*-ésimo autovalor, correspondendo a autofunção com momento angular *J*, para uma dada paridade, é do tipo:

$$\begin{bmatrix} \langle 1QP | \hat{H} | 1QP \rangle & \langle 1QP | \hat{H} | 3QP \rangle \\ \hline \langle 3QP | \hat{H} | 1QP \rangle & \langle 3QP | \hat{H} | 3QP \rangle \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \chi_1^i(J) \\ \chi_3^i(J) \end{bmatrix} = \omega_J^i \begin{bmatrix} \chi_1^i(J) \\ \chi_3^i(J) \end{bmatrix} \quad (\text{II.54})$$

As expressões explícitas dos elementos de matriz são dadas no apêndice A. Logo $\chi_1^i(J)$ e $\chi_3^i(J)$ são as amplitudes dos estados de uma e três quase-partículas, que compõem a *i*-ésima autofunção com momento angular total *J*, dada por:

$$\phi^i(JM) = \chi_1^i(J) |\psi(JM)\rangle + \sum_{a,b,J_1,c} \chi_3^i(abJ_1c;J) |\psi(abJ_1c;JM)\rangle ; \quad (\text{II.55})$$

e ω_J^i o correspondente autovalor.

- (v) Antes da diagonalização da matriz *H*, nos tratamentos com BCS e BBCS, os estados espúrios são projetados usando a técnica descrita no apêndice C.

5.b. O Cálculo das Transições e Momentos Eletromagnéticos

A probabilidade de transição por unidade de tempo, de um multipolo de ordem λ e frequência ν , entre os estados J_i e J_f , é dada pela expressão⁵⁸⁾:

$$\tau(T_\lambda; J_i \rightarrow J_f) = \frac{8\pi(\lambda+1)}{\lambda[(2\lambda+1)!!]^2} \frac{1}{h} \left(\frac{\nu}{c}\right)^{2\lambda+1} B(T_\lambda; J_i \rightarrow J_f), \quad (\text{II.56})$$

com a probabilidade de transição reduzida (taxa de transição)

$$B(T_\lambda; J_i \rightarrow J_f) = \frac{\langle \phi(J_f) || T_\lambda || \phi(J_i) \rangle^2}{(2J_i+1)}. \quad (\text{II.57})$$

Os momentos multipolares podem ser obtidos da definição:

$$m(T_\lambda) = C(\lambda) \langle J J \lambda 0 | J J \rangle B^{1/2}(T_\lambda; J \rightarrow J), \quad (\text{II.58})$$

onde

$$\begin{aligned} C(\lambda) &= \lambda \sqrt{\frac{4\pi}{2\lambda+1}} && \text{para } \lambda \leq 2 \\ &= 1 && \text{para } \lambda \geq 3 \end{aligned} \quad (\text{II.59})$$

Portanto, as propriedades eletromagnéticas são determinadas diretamente, a partir do elemento de matriz do operador T_λ , entre os estados inicial e final definidos pela relação II.55.

Em segunda quantização, o operador tensorial de um corpo tem a forma:

$$\hat{T}_{\lambda\mu} = \sum_{\alpha\beta} \langle \alpha | T_{\lambda\mu} | \beta \rangle \langle \alpha | T_{\lambda\mu} | \beta \rangle c_{\alpha}^{\dagger} c_{\alpha} \quad (\text{II.60})$$

Nos tratamentos com quase-partículas é conveniente reescrevê-lo em função dos operadores de criação e aniquilação de quase-partícula. Assim, seus elementos de matriz entre estados de 1QP e 3QP são facilmente expressos em função dos elementos de matriz de partícula única. Este foi o procedimento adotado no apêndice A, onde são dadas as expressões explícitas. E os elementos de matriz de partícula única dos operadores multipolares magnéticos e elétricos, são apresentados no apêndice D.

6. ALGUMAS CARACTERÍSTICAS DOS TRATAMENTOS COM QUASE-PARTÍCULAS

Dois são os principais problemas no emprego da aproximação BCS usual. Um deles é a redução no emparelhamento em estados mais excitados, devido ao efeito de *blocking*, tratada neste trabalho com a aproximação BBCS. O outro é a presença das componentes espúrias nos estados de base de BCS, cuja eliminação completa é conseguida com a base projetada em número de partículas (PBCS).

Apesar da função de onda conter, em regra, somente $\sim 30\%$ da componente com o número de partículas desejado, a razão pela qual ela apresenta bons resultados é porque sua distribuição em número de partículas é aproximadamente simétrica em relação ao número de partículas desejado.

Pois, o cálculo com BCS é caracteristicamente um cálculo de médias sobre vários núcleos vizinhos, das quantidades físicas que pretendemos descrever. Conseqüentemente, se a quantidade que queremos calcular é \pm constante ou varia de forma aproximadamente linear como função do número de partículas, qualquer erro introduzido devido a não conservação do número de partículas tende a se cancelar. Portanto, o melhor que esse tipo de cálculo pode reproduzir é um efeito médio, sendo precário na descrição de descontinuidade em qualquer fenômeno físico.

Tanto BCS como BBCS violaram a conservação do número de partículas. Apresentamos, a seguir, uma breve discussão das características mais específicas desses tratamentos, advindas do emprego de funções de onda com componentes espúrias. Tomando por referência as funções de onda calculadas com o modelo degenerado (N partículas ocupando uma única órbita com degenerescência Ω), mostradas nas figuras II.2a a II.2f, observamos qualitativamente as características descritas a seguir.

A influência das componentes espúrias, com BCS, é sensivelmente maior nos estados mais excitados, com maior ν (figuras II.2a,b), chegando os estados com várias quase-partículas a ter um número médio de partículas incorreto (figura II.2d); ainda, as funções de onda vão se tornando mais simétricas à medida que aumenta o número de partículas de valência (figura II.2e); assim, as componentes espúrias devem afetar mais os núcleos com menor número de partículas (ou buracos) na camada de valência.

Com o emprego de BBC, nos estados excitados, é maior a porcentagem da componente com o número de partícu-

las desejado (figuras II.2b,c), o que permite um melhor ajuste no cálculo das quantidades que variam pouco ou mais ou menos linearmente com N . Em contrapartida, a função de onda com *blocking* é menos simétrica (figuras II.2e,f), logo os valores calculados com BCS podem ser mais sensíveis a variações bruscas, de um isótopo para outro, na quantidade analisada, subestimando ou superestimando o valor calculado, notadamente devido a assimetria entre as componentes espúrias com $N \pm 2$ partículas. Veja, por exemplo, os resultados para as taxas BE2 apresentados nas figuras IV.3b,c,d.

Portanto, a maior ou menor adequação dos tratamentos com quase-partículas depende do comportamento, em função do número de massa, do observável que se pretende descrever.

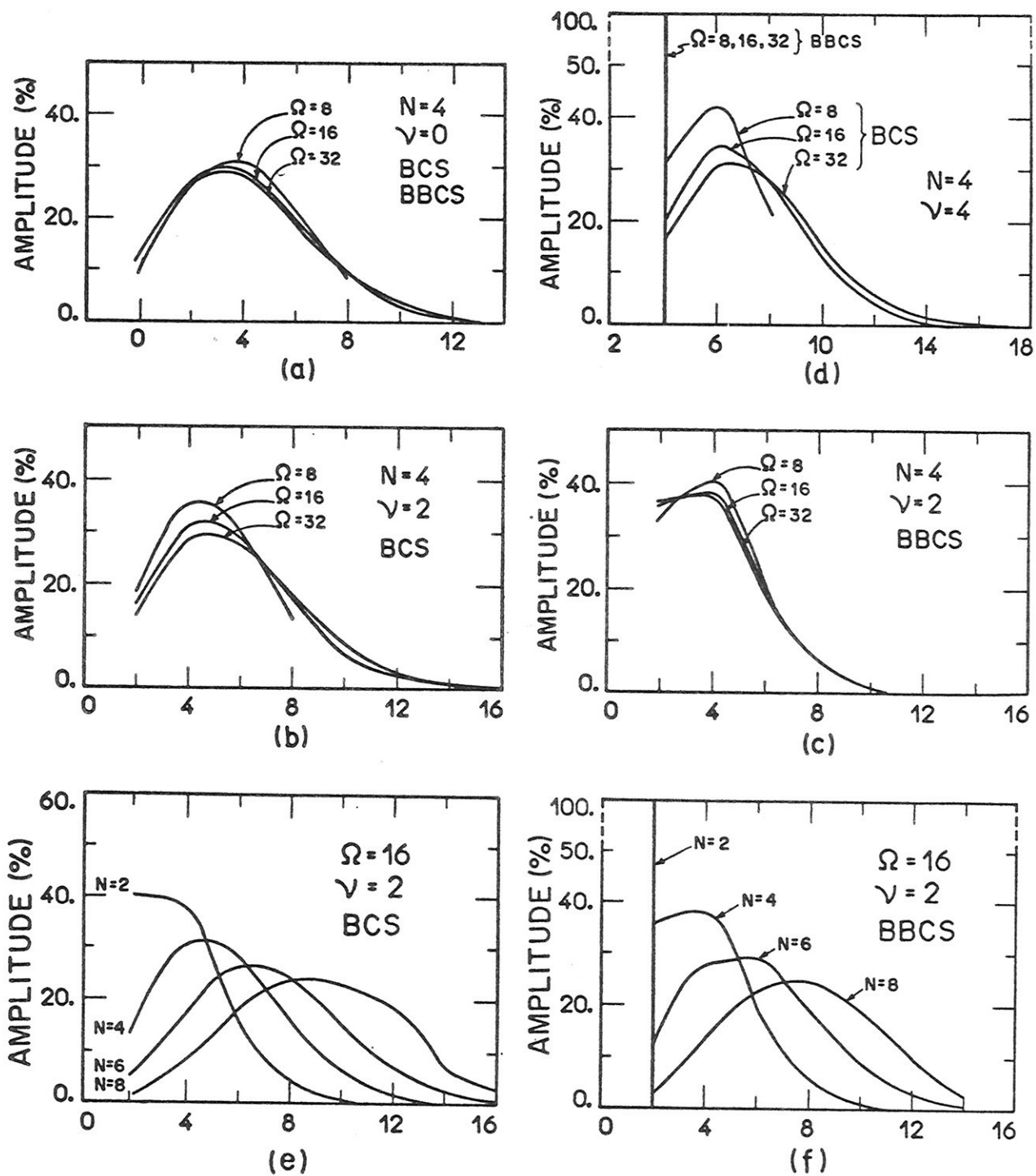


Figura.II.2. Funções de onda calculadas com o modelo degenerado, (degenerescência Ω). São apresentadas as distribuições percentuais da função de onda total em função do número de partículas de valência.

CAPÍTULO III. CÁLCULOS PARA ISÓTOPOS ÍMPARES DO NÍQUEL

1. INTRODUÇÃO

Neste capítulo, efetuamos uma comparação sistemática dos resultados obtidos para os isótopos $^{59,61,63,65}\text{Ni}$, com as aproximações descritas no capítulo anterior.

Tendo por finalidade uma maior clareza dividimos este capítulo em várias seções, cujo conteúdo resumimos a seguir.

Na seção 2, apresentamos os parâmetros utilizados nos cálculos dos espectros e das propriedades eletromagnéticas.

Na seção 3, estudamos a influência das componentes com desemparelhamento cinco através da comparação entre os resultados obtidos com MC e com MC3.

Nas seções 4 e 5, tomando como referência os resultados obtidos com MC3 discutimos a influência dos estados ausentes na base de BCS e a importância das correções introduzidas em BCS.

Na seção 6, discutimos brevemente a influência da interação residual nos cálculos com a base truncada em desemparelhamento.

Finalmente, na seção 7, desenvolvemos a comparação entre resultados obtidos com MC e os dados experimentais existentes.

Cabe mencionar que, na comparação dos valores calculados para as taxas de transição, devido a dificuldades

numéricas usuais presentes nesse tipo de cálculo⁵⁹⁾, iremos nos ater somente a diferenças $\geq 0.10 \cdot 10^{-2}$ W.U. nas taxas BM1, e a diferenças ≥ 0.10 W.U. nas taxas BE2. Ainda, em relação aos momentos eletromagnéticos, a estimativa de partícula única é apresentada como uma referência para a avaliação das diferenças relevantes.

2. PARÂMETROS UTILIZADOS

Os isótopos considerados, $^{59,61,63,65}_{28}\text{Ni}_{28+n}$, correspondem a uma seqüência com $n=3,5,7,9$ nêutrons na subcápsula $N=28-40$. Nos cálculos dos espectros nucleares tomamos para as energias de partícula independente os valores experimentais dos primeiros estados excitados do $^{57}\text{Ni}^{60)} - \epsilon(f5/2) - \epsilon(p3/2) = 0.76 \text{ MeV}$ e $\epsilon(p1/2) - \epsilon(p3/2) = 1.08 \text{ MeV}$ - e, para o único parâmetro da interação residual SDI, $G = 0.48 \text{ MeV} (\approx 27/A)^{21)}$.

No cálculo das propriedades elétrica usamos para a carga efetiva dos nêutrons os valores: $e^{\text{eff}} = 1.7e^{16)}$ e, para as propriedades magnéticas, os fatores giromagnéticos usuais: $g_l^{\text{eff}} = g_l^{\text{livre}} = 0$, $g_s^{\text{eff}} = 0.70 g_s^{\text{livre}}$.

Coerentemente, este conjunto de parâmetros foi fixado para todos os isótopos examinados, com as diferentes aproximações empregadas neste capítulo.

3. INFLUÊNCIA DAS COMPONENTES COM $\nu=5$

No intuito de verificar a influência das componentes com $\nu=5$, em baixo espectro (até $\sim 2.0 \text{ MeV}$), analisa

remos os resultados obtidos com MC e com MC3 para os isótopos $^{61,63}\text{Ni}$, uma vez que para os isótopos $^{59,65}\text{Ni}$, no espaço considerado, a base só contém componentes com $v \leq 3$. As dimensões de base empregada em cada caso são dadas na tabela III.1. Embora a redução das dimensões da base nessa camada, com o formalismo de BCS, possa parecer pequena, em tratamentos onde são incluídas as excitações do caroço, ou ambos núcleons (prótons e nêutrons) precisam ser considerados (veja, por exemplo, a seção 3 do capítulo V), as dimensões nessa região de massa atingem normalmente valores numericamente impraticáveis³⁹⁾ ($>10^3$ vetores).

Tabela III.1. Dimensão da base envolvida nos cálculos dos espectros dos Níqueis para os estados de paridade negativa.

SPIN	$^{59,65}\text{Ni}$		$^{61,63}\text{Ni}$		
	MC	BCS	MC	MC3	BCS
1/2	5	5	15	10	5
3/2	10	10	24	18	10
5/2	10	10	29	20	10
7/2	6	6	23	14	6
9/2	5	5	17	11	5
11/2	1	1	8	3	1

3.a. Espectros

Nas figuras III.2 e III.3, apresentamos os espectros para os $^{61,63}\text{Ni}$, respectivamente, calculadas com MC e com MC3. De um modo geral, os níveis nos espectros com MC3 estão mais elevadas energeticamente. Até 1.90 MeV de energia de excitação temos com MC3, para ambos os isótopos, cinco es

tados a menos. Entre os estados presentes correspondentes, as diferenças de energia são geralmente menor que 100 keV; as mais acentuadas estão limitadas a 200 keV.

Nas tabelas III.4 e III.7, mostramos as distribuições em desemparelhamento, dos estados presentes até 1.90 MeV, para os isótopos ${}^6\text{Ni}$ e ${}^6\text{Ni}$, respectivamente. Observamos que o desemparelhamento médio tende a crescer com o aumento de energia de excitação. Com ambas aproximações as porcentagens calculadas para a fração com $\nu=1$, nos estados estudados, são praticamente iguais. Somente os três primeiros estados, i.é., os estados: $3/2_1^-$, $5/2_1^-$ e $1/2_1^-$, têm a maior fração com $\nu=1$; todos os demais têm a maior fração com $\nu=3$. Isto demonstra, claramente, a necessidade da inclusão dos estados com $\nu=3$ na descrição das propriedades desse núcleo em baixo espectro.

Nas tabelas III.5 e III.8, apresentamos as funções de onda selecionadas e as superposições correspondentes, para os estados do ${}^6\text{Ni}$ e ${}^6\text{Ni}$, respectivamente. Considerando o peso das componentes com $\nu=5$ e a diferença indicada pela superposição das funções de onda calculadas com MC e com MC3, os estados analisados podem ser agrupados da seguinte forma:

- (i) estados com peso de $\nu=5 < 4\%$ e diferença por superposição menor que 3%: $1/2_1^-$, $3/2_1^-$, $5/2_1^-$, $1/2_2^-$ e $3/2_2^-$;
- (ii) estados com $5\% < \text{peso de } \nu=5 \leq 10\%$ e diferenças por superposição menor que 10%: $5/2_2^-$, $7/2_1^-$, $9/2_1^-$ e $11/2_1^-$;

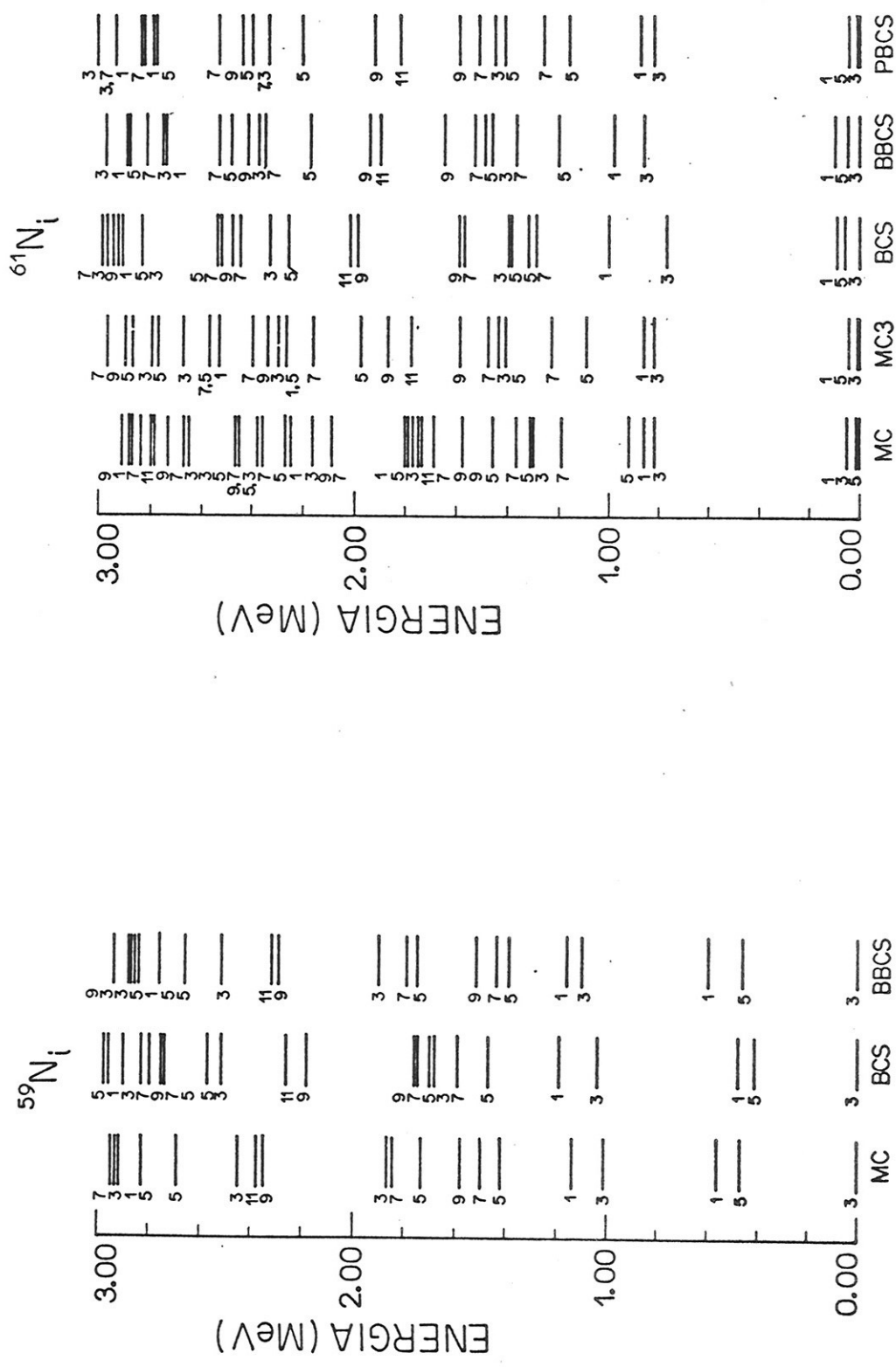


Figura III.1. Espectros de energia para o ^{59}Ni . Apenas os estados de paridade negativa são apresentados, e os "spins" estão na forma 2J.

Figura III.2. Espectros de energia para o ^{61}Ni . Veja a legenda da figura III.1.

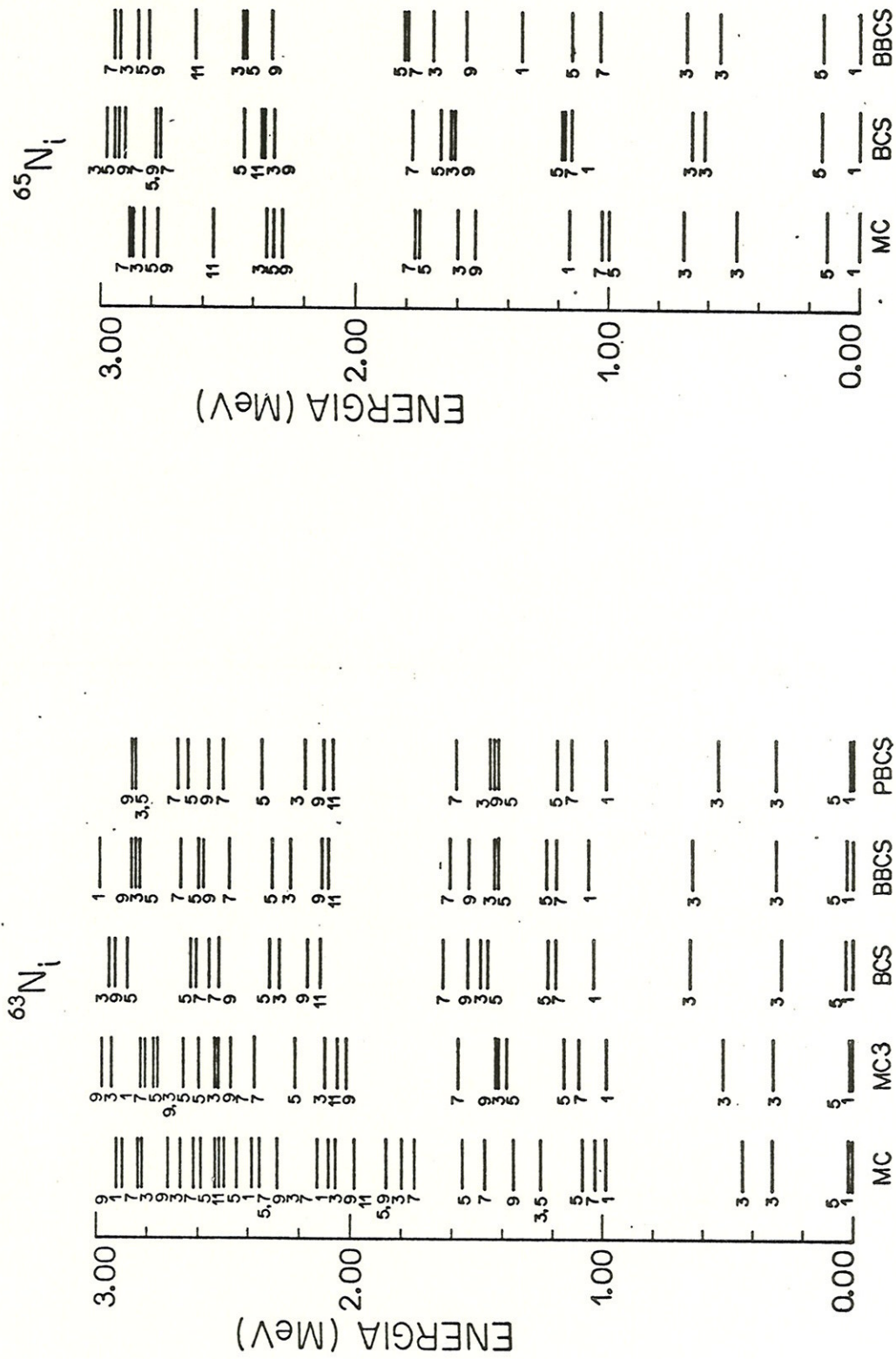


Figura III.3. Espectros de energia para o ^{63}Ni . Veja a legenda da figura III.1.

Figura III.4. Espectros de energia para o ^{65}Ni . Veja a legenda da figura III.1.

Tabela III.2. Distribuição em desemparelhamento ν , e desemparelhamento médio $\langle \nu \rangle$, para os estados ^{59}Ni presentes até 2.0 MeV de energia de excitação.

J_i^-	$\nu=1$			$\nu=3$			$\langle \nu \rangle$		
	MC	BCS	BBCS	MC	BCS	BBCS	MC	BCS	BBCS
3/2 ₁	94.52	95.73	94.14	5.48	4.27	5.86	1.11	1.09	1.12
5/2 ₁	97.33	97.02	97.70	2.67	2.98	2.30	1.05	1.06	1.05
1/2 ₁	68.98	74.12	75.77	31.02	25.88	24.22	1.62	1.52	1.48
3/2 ₂	36.59	24.79	27.35	63.41	75.21	72.65	2.27	2.50	2.45
1/2 ₂	43.78	43.17	34.11	56.22	56.83	65.89	2.12	2.14	2.32
5/2 ₂	6.45	11.16	4.50	93.55	88.84	95.50	2.87	2.78	2.91
7/2 ₁	0.	0.	0.	100.	100.	100.	3.	3.	3.
9/2 ₁	0.	0.	0.	100.	100.	100.	3.	3.	3.
5/2 ₃	12.30	16.73	11.40	87.70	83.27	88.60	2.75	2.67	2.77
7/2 ₂	0.	0.	0.	100.	100.	100.	3.	3.	3.
3/2 ₃	18.48	23.06	20.37	81.52	76.94	79.63	2.63	2.54	2.59

Tabela III.3. Funções de onda selecionadas do ^{59}Ni . A i -ésima função de onda de "spin" J^- é apresentada com suas componentes de uma quasipartícula e três quasipartículas representadas pelos conjuntos (J_c) e (J_a, J_b, J_{ab}, J_c) , respectivamente. Apenas as contribuições $\geq 4\%$ para a função de onda total são apresentadas. As combinações lineares para as componentes de 3QP ($\nu=1$) da base de PBCS, representadas por $|J_a J_b J_c\rangle$, são dadas abaixo.

J_i^-	J_a	J_b	J_{ab}	J_c	BCS	BBCS	PBCS	MC	J_i^-	J_a	J_b	J_{ab}	J_c	BCS	BBCS	PBCS	MC
3/2 ₁				3/2	.968	.954	.964	-	5/2 ₂	3/2	3/2	0	5/2				.206
	3/2	3/2	0	3/2				.779		3/2	3/2	2	1/2	.628	.751	.745	.745
	5/2	5/2	0	3/2				.529		5/2	5/2	2	3/2	.525	.493	.481	.481
	1/2	1/2	0	3/2				.242		3/2	1/2	1	5/2	.287	.268	.267	.267
5/2 ₁				5/2	.580	.985	.986	-	3/2	1/2	2	5/2	-.362	-.246	-.263	-.263	
	3/2	3/2	0	5/2				.860	7/2 ₁	3/2	3/2	2	5/2	-.53	-.884	-.884	-.884
	5/2	5/2	0	5/2				.415		5/2	5/2	4	1/2	.495	.305	.305	.305
1/2	1/2	0	5/2				.248	5/2		5/2	4	3/2	.356	.288	.288	.288	
1/2 ₁				1/2	.831	.851	.813	-	3/2	1/2	2	5/2	.352				
	3/2	3/2	0	1/2				.779	5/2	5/2	2	3/2	.281				
	5/2	5/2	0	1/2				.288	9/2 ₁	3/2	3/2	2	5/2	.856	.948	.948	.948
	3/2	3/2	2	5/2	.284	.315	.354	.354		3/2	1/2	2	5/2	-.421	-.270	-.270	-.270
	3/2	1/2	2	5/2	-.323	-.289	-.330	-.330		5/2	5/2	4	5/2	-.240			
	5/2	5/2	2	3/2	.271	.244	.277	.277		5/2 ₃	5/2	5/2	0	5/2	-.329	-.276	-
3/2 ₂				3/2	-.226	-.286	-.257	-	3/2		3/2	0	5/2				.283
	3/2	3/2	0	3/2	.364	.348	.548		3/2	3/2	2	5/2	.503	.709	.689	.689	
	5/2	5/2	0	3/2	-.244	-.247	-	-.522	3/2	1/2	2	5/2	-.435	-.420	-.418	-.418	
	1/2	1/2	0	3/2				-.232	5/2	5/2	2	3/2	-.222				
	3/2	1/2	2	5/2	-.535	-.513	-.488	-.488	5/2	5/2	4	3/2	.343	.345	.349	.349	
	3/2	3/2	2	5/2	.383	.457	.406	.406	5/2	5/2	2	1/2	-.422	-.260	-.282	-.282	
	3/2	3/2	2	1/2	.216	.282	.284	.284	7/2 ₂	5/2	5/2	2	3/2	.625	.698	.698	.698
	5/2	5/2	2	3/2	-.224	-.233	-.249	-.249		3/2	1/2	2	5/2	.377	.483	.483	.483
	5/2	5/2	2	1/2	-.308	-.209				3/2	1/2	1	5/2	-.497	-.437	-.437	-.437
	5/2	5/2	4	5/2	-.338	-.249	-.208	-.208		5/2	5/2	4	3/2		.202	.202	.202
1/2 ₂				1/2	.555	.524	.580	-	3/2	3/2	2	5/2	.470				
	3/2	3/2	0	1/2	-.239		-.319	.578	3/2 ₃	3/2	3/2	0	3/2	-.353	-.341	-.389	-.239
	5/2	5/2	0	1/2	.258	.203	-	.322		1/2	1/2	0	3/2	.279	.208		.292
	3/2	3/2	2	5/2	-.447	-.56	-.507	-.507		5/2	5/2	0	3/2				.206
	3/2	1/2	2	5/2	.458	.447	.419	.419		5/2	5/2	2	3/2	.308	.291	.240	.240
	5/2	5/2	2	3/2	-.398	-.388	-.361	-.361		3/2	3/2	2	1/2	-.349	-.407	-.368	-.368
								5/2		5/2	2	1/2	-.541	-.439	-.469	-.469	
								3/2	3/2	2	5/2		.409	.447	.447		
								5/2	5/2	4	5/2	-.453	-.402	-.415	-.415		

$$\begin{aligned}
 |3/2 \ 3/2 \ 0 \ 3/2\rangle &= -.1479 |3/2\rangle + 1.0109 |3/2 \ 3/2 \ 0 \ 3/2\rangle \\
 |3/2 \ 3/2 \ 0 \ 1/2\rangle &= .3479 |1/2\rangle + 1.0588 |3/2 \ 3/2 \ 0 \ 1/2\rangle \\
 |3/2 \ 3/2 \ 0 \ 5/2\rangle &= .3042 |5/2\rangle + 1.0452 |3/2 \ 3/2 \ 0 \ 5/2\rangle \\
 |1/2 \ 1/2 \ 0 \ 5/2\rangle &= .3991 |5/2\rangle + .5190 |3/2 \ 3/2 \ 0 \ 5/2\rangle + 1.1437 |1/2 \ 1/2 \ 0 \ 5/2\rangle
 \end{aligned}$$

Tabela.III.4. Distribuição em desemparelhamento ν e desemparelhamento médio $\langle \nu \rangle$ para os estados do ^{61}Ni presentes até 2.0 MeV de energia.

J_i^-	$\nu=1$					$\nu=3$					$\nu=5$					$\langle \nu \rangle$				
	MC	MC3	BCS	BBCS	PBCS	MC	MC3	BCS	BBCS	PBCS	MC	MC3	BCS	BBCS	PBCS	MC	MC3	BCS	BBCS	PBCS
5/2 ₁	95.58	97.01	97.42	97.06	97.34	3.66	2.99	2.58	2.94	2.66	0.76	1.06	1.05	1.06	1.05	1.10	1.06	1.05	1.06	1.05
3/2 ₁	93.80	94.01	93.95	94.06	93.74	6.15	5.99	6.05	5.94	6.26	0.05	1.12	1.12	1.12	1.12	1.12	1.12	1.12	1.12	1.13
1/2 ₁	79.89	80.47	83.05	84.12	80.44	19.84	19.53	16.95	15.88	19.56	0.27	1.41	1.39	1.34	1.32	1.41	1.39	1.34	1.32	1.39
3/2 ₂	10.90	11.86	9.72	13.82	12.38	88.67	88.14	90.28	86.18	87.62	0.43	2.78	2.76	2.81	2.72	2.78	2.76	2.81	2.72	2.75
1/2 ₂	42.57	40.80	36.52	36.87	39.44	56.53	59.20	63.48	63.13	60.56	0.90	2.17	2.18	2.27	2.26	2.17	2.18	2.27	2.26	2.21
5/2 ₂	15.81	14.62	19.55	12.47	15.18	72.96	85.38	80.45	87.53	84.82	11.23	2.91	2.71	2.61	2.75	2.91	2.71	2.61	2.75	2.70
7/2 ₁	0.	0.	0.	0.	0.	94.90	100.	100.	100.	100.	5.10	3.10	3.	3.	3.	3.10	3.	3.	3.	3.
1/2 ₃	18.84	18.33	26.93	24.40	18.52	60.92	81.67	73.07	75.60	81.48	20.24	3.03	2.63	2.46	2.51	3.03	2.63	2.46	2.51	2.63
5/2 ₃	23.68	15.96	13.03	20.74	15.20	52.65	84.04	86.97	79.26	84.80	23.67	2.99	2.68	2.74	2.59	2.99	2.68	2.74	2.59	2.70
7/2 ₁	0.	0.	0.	0.	0.	91.86	100.	100.	100.	100.	8.14	3.16	3.	3.	3.	3.16	3.	3.	3.	3.
5/2 ₄	11.59	-	-	-	-	80.73	-	-	-	-	7.68	2.94	-	-	-	2.94	-	-	-	-
9/2 ₁	0.	0.	0.	0.	0.	98.69	100.	100.	100.	100.	1.31	3.03	3.	3.	3.	3.03	3.	3.	3.	3.
9/2 ₂	0.	0.	0.	0.	0.	84.03	100.	100.	100.	100.	15.97	3.32	3.	3.	3.	3.32	3.	3.	3.	3.
7/2 ₃	0.	-	-	-	-	68.21	-	-	-	-	31.79	3.64	-	-	-	3.64	-	-	-	-
11/2 ₁	0.	0.	0.	0.	0.	97.68	100.	100.	100.	100.	2.32	3.05	3.	3.	3.	3.05	3.	3.	3.	3.
3/2 ₄	6.34	-	-	-	-	46.51	-	-	-	-	47.15	3.83	-	-	-	3.83	-	-	-	-
1/2 ₃	11.60	-	-	-	-	57.40	-	-	-	-	31.00	3.40	-	-	-	3.40	-	-	-	-
5/2 ₅	8.84	-	-	-	-	53.63	-	-	-	-	37.53	3.46	-	-	-	3.46	-	-	-	-

Tabela III.5. Funções de onda selecionadas do ^{61}Ni . São dados os números quânticos para a seguinte ordem de acoplamento: $\{[(p_{3/2})^{n_1}_{v_1, J_1}, (f_{5/2})^{n_2}_{v_2, J_2}]J_{12}, (p_{1/2})^{n_3}_{v_3, J_3}\}^J$ e $v=v_1+v_2+v_3$. Apenas as contribuições $\geq 4\%$ para a função de onda total são apresentadas. São apresentadas abaixo as superposições das funções de onda correspondentes, indicadas entre barras.

J_1^-	n_1	v_1	j_1	n_2	v_2	j_2	j_{12}	n_3	v_3	j_3	v	MC	MC3	J_1^-	n_1	v_1	j_1	n_2	v_2	j_2	j_{12}	n_3	v_3	j_3	v	MC	MC3
3/2 ₁														5/2 ₂													
3	1	3/2	2	0	0	3/2	0	0	0	1		62.39	62.06	2	0	0	3	1	5/2	5/2	0	0	0	1	10.98	7.71	
1	1	3/2	4	0	0	3/2	0	0	0	1		12.54	12.68	3	1	3/2	2	2	2	5/2	0	0	0	3	26.82	27.83	
3	1	3/2	0	0	0	3/2	2	0	0	1		11.52	11.83	3	1	3/2	1	1	5/2	3	1	1	1/2	3	-24.72	-25.71	
1	1	3/2	2	0	0	3/2	2	0	0	1		7.48	7.44	3	1	3/2	1	1	5/2	2	1	1	1/2	3	8.34	5.97	
5/2 ₁														7/2 ₁													
4	0	0	1	1	5/2	5/2	0	0	0	1		46.75	44.22	2	2	2	2	0	0	2	1	1	1/2	3	7.69	16.21	
2	0	0	3	1	5/2	5/2	0	0	0	1		32.86	35.86	2	2	2	2	2	2	3	1	1	1/2	5	-4.07	-	
2	0	0	1	1	5/2	5/2	2	0	0	1		10.89	11.80	3	1	3/2	2	2	2	7/2	0	0	0	3	34.52	33.53	
1/2 ₁														5/2 ₂													
4	0	0	0	0	0	0	1	1	1/2	1		44.00	43.14	2	0	0	3	1	5/2	5/2	0	0	0	1	9.57	6.72	
2	0	0	2	0	0	0	1	1	1/2	1		33.48	35.00	4	0	0	1	1	5/2	5/2	0	0	0	1	-8.21	-	
3	1	3/2	1	1	5/2	1	1	1	1/2	3		-5.47	-5.65	3	1	3/2	2	2	4	5/2	0	0	0	3	25.72	-	
3	1	3/2	2	2	2	1/2	0	0	0	3		5.37	4.70	2	2	2	3	1	5/2	5/2	0	0	0	3	-8.69	-9.44	
3/2 ₂														3/2 ₃													
1	1	3/2	4	0	0	3/2	0	0	0	1		7.05	7.78	3	1	3/2	0	0	0	3/2	2	0	0	1	5.90	-	
2	0	0	3	3	3/2	3/2	0	0	0	3		18.79	17.56	1	1	3/2	4	0	0	3/2	0	0	0	1	4.57	3.54	
2	0	0	2	2	2	2	1	1	1/2	3		-16.67	-15.15	1	1	3/2	2	0	0	3/2	2	0	0	1	6.20	10.61	
3	1	3/2	1	1	5/2	2	1	1	1/2	3		-16.22	-16.98	2	0	0	2	2	2	2	1	1	1/2	3	18.56	22.74	
2	2	2	3	1	5/2	3/2	0	0	0	3		-8.61	-8.64	3	1	3/2	1	1	5/2	2	1	1	1/2	3	-10.15	-6.57	
1	1	3/2	3	1	5/2	2	1	1	1/2	3		-8.00	-8.30	2	0	0	3	3	3/2	3/2	0	0	0	3	-9.29	-13.43	
3	1	3/2	1	1	5/2	1	1	1	1/2	3		5.37	5.79	2	2	2	2	0	0	2	1	1	1/2	3	8.20	13.37	
1/2 ₂														9/2 ₁													
2	0	0	2	0	0	0	1	1	1/2	1		28.02	25.88	3	1	3/2	1	1	5/2	4	1	1	1/2	3	-26.68	-28.28	
0	0	0	4	0	0	0	1	1	1/2	1		14.20	14.83	2	0	0	3	3	9/2	9/2	0	0	0	3	17.34	16.54	
3	1	3/2	1	1	5/2	1	1	1	1/2	3		14.07	16.06	2	2	2	3	1	5/2	9/2	0	0	0	3	17.32	16.76	
2	2	2	3	1	5/2	1/2	0	0	0	3		8.70	9.51	1	1	3/2	3	1	5/2	4	1	1	1/2	3	-13.46	-14.52	
1	1	3/2	3	1	5/2	1	1	1	1/2	3		8.43	9.08	2	1	3/2	2	2	4	9/2	0	0	0	3	9.97	8.18	
3	1	3/2	2	2	2	1/2	0	0	0	3		-18.45	-16.06	2	0	0	2	2	4	4	1	1	1/2	3	6.17	6.25	
7/2 ₂														3/2 ₃													
2	0	0	2	2	4	4	1	1	1/2	3		26.09	19.82	2	2	2	2	2	2	2	1	1	1/2	5	4.48	-	
2	2	2	3	1	5/2	7/2	0	0	0	3		24.06	31.81	3	1	3/2	2	2	2	3/2	0	0	0	3	6.86	13.93	
3	1	3/2	2	2	4	7/2	0	0	0	3		-20.66	-11.31	1	1	3/2	4	2	2	3/2	0	0	0	3	5.99	3.72	
3	1	3/2	1	1	5/2	4	1	1	1/2	3		-4.60	-13.18	2	2	2	3	3	3/2	3/2	0	0	0	5	-7.23	-	
1	1	3/2	3	1	5/2	3	1	1	1/2	3		-4.80	-	2	2	2	2	2	2	1	1	1	1/2	5	6.60	-	
2	2	2	1	1	5/2	7/2	2	0	0	3			6.68	2	2	2	2	2	2	1	1	1	1/2	5	4.48	-	
3	1	3/2	2	2	7/2	0	0	0	0	3			5.32														
3/2 ₁ - 99.97														5/2 ₂ - 91.77													
5/2 ₁ - 99.51														7/2 ₁ - 94.41													
1/2 ₁ - 99.92														5/2 ₃ - 82.69													
3/2 ₂ - 99.69														3/2 ₃ - 85.80													
1/2 ₂ - 99.38														9/2 ₁ - 99.14													
7/2 ₂ - 88.70																											

Tabela III.6. Funções de onda selecionadas do ^{61}Ni . Veja a legenda da tabela III.3.

J_i^-	J_a	J_b	J_{ab}	J_c	BCS	BECS	PBCS	J_i^-	J_a	J_b	J_{ab}	J_c	BCS	BECS	PBCS
3/2 ₁	3/2	3/2	0	3/2	.960	.961	.968	7/2 ₁	5/2	5/2	2	3/2	.418	.630	.624
	5/2	1/2	2	5/2	.981	.979	.984		3/2	1/2	2	5/2	.453	.525	.520
	1/2	3/2	4	1/2	.890	.895	.884		3/2	3/2	4	1/2	.629	.399	.385
3/2 ₂	3/2	3/2	0	1/2	.203	.196	.208	5/2 ₃	5/2	5/2	4	3/2	.312	.222	.272
	3/2	1/2	2	5/2	-.276	-.265	-.295		3/2	3/2	2	5/2	-.341		
	5/2	5/2	2	3/2	.226	.224	.250		3/2	1/2	1	5/2		-.313	-.306
	3/2	3/2	0	3/2	.198	.224	.206		3/2	3/2	0	5/2			-.235
1/2 ₂	5/2	5/2	2	1/2	.528	.416	.411	3/2	1/2	1/2	0	5/2	-.290	-.281	-.315
	3/2	3/2	2	5/2	-.317	-.340	-.340		5/2	5/2	0	5/2	.208	.328	-
	3/2	1/2	2	5/2	.483	.559	.579		5/2	5/2	2	1/2	.514	.486	.459
	5/2	5/2	4	5/2	.517	.443	.439		3/2	1/2	2	5/2	.222	.413	.392
	3/2	3/2	0	1/2	-.455	-.446	-.463		5/2	5/2	2	3/2	.440	.276	.367
	5/2	5/2	0	1/2	.306	.306	.435		3/2	3/2	2	5/2	-.290	-.354	-.355
5/2 ₂	5/2	5/2	0	1/2	-.254	-.276	-	3/2	5/2	5/2	4	3/2	-.236	-.308	-.345
	3/2	3/2	2	3/2	.444	.463	.451		3/2	3/2	2	1/2	.415	.274	.282
	3/2	3/2	2	5/2	.407	.397	.368		3/2	1/2	1	5/2	.224		
	3/2	1/2	2	5/2	-.522	-.510	-.508		3/2	3/2	0	3/2	.391	.342	.330
	3/2	3/2	0	5/2	.268	.220	.361		1/2	1/2	0	3/2	-.260	-.268	-.240
	5/2	5/2	0	5/2	-.305	-.201	-		5/2	5/2	2	1/2	.442	.500	.500
3/2	3/2	5/2	2	5/2	-.557	-.478	-.472	3/2	5/2	5/2	2	3/2	-.394	-.398	-.427
	5/2	5/2	2	3/2	.419	.556	.547		5/2	5/2	4	5/2	.288	.390	.380
	3/2	3/2	2	1/2	.398	.489	.466		3/2	3/2	2	1/2	.370	.364	.370
	5/2	5/2	2	1/2	-.221				3/2	1/2	1	5/2	.224	.208	.229
	3/2	1/2	1	5/2	.231	.307	.288		3/2	1/2	2	5/2	-.324	-.211	-.221

$|3/2\ 3/2\ 0\ 3/2\rangle = -.2116\ |3/2\rangle + 1.0221\ |3/2\ 3/2\ 0\ 3/2\rangle$
 $|3/2\ 3/2\ 0\ 1/2\rangle = -.0161\ |1/2\rangle + 1.0001\ |3/2\ 3/2\ 0\ 1/2\rangle$
 $|3/2\ 3/2\ 0\ 5/2\rangle = -.0689\ |5/2\rangle + 1.0024\ |3/2\ 3/2\ 0\ 5/2\rangle$
 $|1/2\ 1/2\ 0\ 3/2\rangle = -.0389\ |3/2\rangle + 0.2315\ |3/2\ 3/2\ 0\ 3/2\rangle + 1.0254\ |1/2\ 1/2\ 0\ 3/2\rangle$
 $|1/2\ 1/2\ 0\ 5/2\rangle = -.1711\ |5/2\rangle + 0.4449\ |3/2\ 3/2\ 0\ 5/2\rangle + 1.1125\ |1/2\ 1/2\ 0\ 5/2\rangle$

Tabela III.7. Distribuição em desemparelhamento ν , e desemparelhamento médio $\langle \nu \rangle$, para os estados do ${}^{63}\text{Ni}$ presentes até 2.0 MeV de energia de excitação.

J_i^-	$\nu=1$					$\nu=3$					$\nu=5$					$\langle \nu \rangle$										
	MC	MC3	BCS	BBCS	PBCS	MC	MC3	BCS	BBCS	PBCS	MC	MC3	BCS	BBCS	PBCS	MC	MC3	BCS	BBCS	PBCS	MC	MC3	BCS	BBCS	PBCS	
1/2 ₁	90.46	90.65	90.79	90.80	90.68	9.49	9.35	9.21	9.20	9.32	0.05	1.19	1.18	1.18	1.19	0.05	1.19	1.18	1.18	1.18	1.19	1.19	1.18	1.18	1.19	
5/2 ₁	98.09	98.43	97.75	98.03	98.57	1.77	1.57	2.25	1.97	1.43	0.14	1.04	1.05	1.04	1.03	0.14	1.03	1.05	1.04	1.04	1.03	1.03	1.05	1.04	1.03	
3/2 ₁	89.30	91.20	92.08	93.44	90.92	10.68	8.80	7.93	6.56	9.08	0.02	1.21	1.16	1.13	1.18	0.02	1.18	1.16	1.13	1.13	1.18	1.18	1.16	1.13	1.18	
3/2 ₂	8.04	6.88	6.42	5.02	7.61	88.07	93.12	93.58	94.98	92.39	3.89	2.92	2.87	2.90	2.85	3.89	2.86	2.87	2.90	2.90	2.85	2.85	2.87	2.90	2.85	
1/2 ₂	29.14	28.76	28.59	29.95	28.62	70.44	71.24	71.41	70.05	71.38	0.42	2.43	2.43	2.40	2.43	0.42	2.43	2.43	2.40	2.40	2.43	2.43	2.43	2.40	2.43	
7/2 ₁	0.	0.	0.	0.	0.	94.45	100.	100.	100.	100.	5.55	3.11	3.	3.	3.	5.55	3.	3.	3.	3.	3.	3.	3.	3.	3.	3.
5/2 ₂	24.14	23.41	24.24	24.25	23.19	66.46	76.59	75.76	75.75	76.81	9.40	2.71	2.52	2.52	2.54	9.40	2.53	2.52	2.52	2.52	2.54	2.54	2.52	2.52	2.54	
3/2 ₃	13.72	17.50	22.71	21.42	18.66	71.84	82.50	77.29	78.57	81.34	14.44	3.01	2.65	2.57	2.63	14.44	2.65	2.55	2.57	2.57	2.63	2.63	2.55	2.57	2.63	
5/2 ₃	6.80	8.11	4.54	10.42	8.48	80.51	91.89	95.06	89.58	91.52	12.69	3.12	2.84	2.79	2.83	12.69	2.84	2.90	2.79	2.79	2.83	2.83	2.90	2.79	2.83	
9/2 ₁	0.	0.	0.	0.	0.	94.43	100.	100.	100.	100.	5.57	3.11	3.	3.	3.	5.57	3.	3.	3.	3.	3.	3.	3.	3.	3.	3.
7/2 ₂	0.	0.	0.	0.	0.	87.15	100.	100.	100.	100.	12.85	3.26	3.	3.	3.	12.85	3.	3.	3.	3.	3.	3.	3.	3.	3.	3.
5/2 ₄	21.53	-	-	-	-	45.94	-	-	-	-	32.53	3.22	-	-	-	32.53	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
7/2 ₃	0.	-	-	-	-	72.23	100.	100.	100.	100.	27.77	3.56	-	-	-	27.77	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
3/2 ₄	9.89	-	-	-	-	66.54	-	-	-	-	23.57	3.28	-	-	-	23.57	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
9/2 ₂	0.	0.	0.	0.	0.	86.14	100.	100.	100.	100.	13.86	3.28	3.	3.	3.	13.86	3.	3.	3.	3.	3.	3.	3.	3.	3.	3.
5/2 ₅	3.99	-	-	-	-	54.49	-	-	-	-	41.52	3.75	-	-	-	41.52	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

Tabela III.8. Funções de onda selecionadas do ${}^6\text{Ni}$, e as superposições correspondentes. Veja a legenda da tabela III.5.

J_1^-	$P_{3/2}$			$f_{5/2}$			$P_{1/2}$			MC	MC3	J_1^-	$P_{3/2}$			$f_{5/2}$			$P_{1/2}$			MC	MC3					
n_1	v_1	j_1	n_2	v_2	j_2	j_{12}	n_3	v_3	j_3	v		n_1	v_1	j_1	n_2	v_2	j_2	j_{12}	n_3	v_3	j_3	v	MC	MC3				
$1/2_1$	4	0	0	2	0	0	0	1	1	1/2	1	65.89	65.14	$7/2_1$	4	0	0	2	2	4	4	1	1	1/2	3	-51.62	-45.14	
	2	0	0	4	0	0	0	1	1	1/2	1	23.81	24.74		3	1	3/2	4	2	2	7/2	0	0	0	3	12.03	9.07	
	3	1	3/2	3	1	5/2	1	1	1	1/2	3	-4.16	-4.13		2	0	0	4	2	4	4	1	1	1/2	3	9.01	14.34	
$5/2_1$															3	1	3/2	3	1	5/2	3	1	1	1/2	3	7.07	11.49	
	4	0	0	3	1	5/2	5/2	0	0	0	1	54.10	53.29		3	1	3/2	4	2	4	7/2	0	0	0	3	-4.47	-3.77	
	2	0	0	3	1	5/2	5/2	2	0	0	1	15.74	16.16		3	1	3/2	3	1	5/2	4	1	1	1/2	3		-4.27	
	4	0	0	1	1	5/2	5/2	2	0	0	1	14.30	14.04	$5/2_2$														
	2	0	0	5	1	5/2	5/2	0	0	0	1	-12.66	-13.69		4	0	0	1	1	5/2	5/2	2	0	0	1	17.50	13.90	
$3/2_1$															2	0	0	5	1	5/2	5/2	0	0	0	1	3.11	6.67	
	3	1	3/2	4	0	0	3/2	0	0	0	1	49.48	51.45		4	0	0	2	2	2	2	1	1	1/2	3	22.29	27.52	
	3	1	3/2	2	0	0	3/2	2	0	0	1	29.88	29.26		3	1	3/2	3	1	5/2	2	1	1	1/2	3	-18.19	-17.71	
	1	1	3/2	4	0	0	3/2	2	0	0	1	6.34	6.59		3	1	3/2	3	1	5/2	3	1	1	1/2	3	11.89	8.97	
$3/2_2$															2	0	0	4	2	2	2	1	1	1/2	3	5.38	10.59	
	3	1	3/2	4	0	0	3/2	0	0	0	1	6.17	4.44		3	1	3/2	3	3	3	3	1	1	1/2	5	5.29		
	4	0	0	2	2	2	2	1	1	1/2	3	-35.18	-30.58	$5/2_3$														
	4	0	0	3	3	3/2	3/2	0	0	0	3	30.01	29.30		2	0	0	3	1	5/2	5/2	2	0	0	1	5.45	4.65	
	2	0	0	4	2	2	2	1	1	1/2	3	-5.74	-9.21		3	1	3/2	4	2	2	5/2	0	0	0	3	33.64	27.69	
	3	1	3/2	3	1	5/2	2	1	1	1/2	3	-4.18	-6.96		4	0	0	2	2	2	2	1	1	1/2	3	14.04	3.93	
	2	0	0	3	3	3/2	3/2	2	0	0	3	4.14	6.32		2	2	2	4	0	0	2	1	1	1/2	3	12.23	22.59	
	3	1	3/2	3	1	5/2	1	1	1	1/2	3	3.09	4.71		3	1	3/2	3	1	5/2	3	1	1	1/2	3	-11.10	22.57	
$1/2_2$															3	1	3/2	2	2	2	5/2	2	0	0	3		9.49	
	2	0	0	4	0	0	0	1	1	1/2	1	-24.27	-23.53		3	1	3/2	3	3	3/2	2	1	1	1/2	5	-7.55		
	0	0	0	6	0	0	0	1	1	1/2	1	4.87	5.23	$3/2_3$														
	3	1	3/2	3	1	5/2	1	1	1	1/2	3	-31.02	-31.62		1	1	3/2	4	0	0	3/2	2	0	0	1	5.95	11.07	
	3	1	3/2	4	2	2	1/2	0	0	0	3	10.39	10.98		1	1	3/2	6	0	0	3/2	0	0	0	1	-4.49		
	3	1	3/2	2	2	2	1/2	2	0	0	3	10.10	8.79		3	1	3/2	3	1	5/2	2	1	1	1/2	3	-26.30	-30.33	
	2	2	2	3	1	5/2	1/2	2	0	0	3	-6.81	-7.05		3	1	3/2	4	2	2	3/2	0	0	0	3	15.03	11.78	
	1	1	3/2	5	1	5/2	1	1	1	1/2	3	5.39	5.54		4	0	0	2	2	2	2	1	1	1/2	3	7.35	11.47	
	2	2	2	5	1	5/2	1/2	0	0	0	3	4.79	4.87		2	2	2	4	0	0	2	1	1	1/2	3	5.40	11.08	
$7/2_2$															3	1	3/2	3	1	5/2	1	1	1	1/2	3	4.52		
	3	1	3/2	3	1	5/2	4	1	1	1/2	3	45.22	48.28		1	1	3/2	5	1	5/2	2	1	1	1/2	3		5.00	
	3	1	3/2	2	2	2	7/2	2	0	0	3	-19.39	-10.43		3	1	3/2	3	3	3/2	1	1	1	1/2	5	5.33		
	3	1	3/2	3	1	5/2	3	1	1	1/2	3	-6.08		$9/2_1$														
	4	0	0	2	2	4	4	1	1	1/2	3	-4.08	-9.93		4	0	0	3	3	9/2	9/2	0	0	0	3	42.99	38.39	
	3	1	3/2	4	2	2	7/2	0	0	0	3		-12.44		3	1	3/2	3	1	5/2	4	1	1	1/2	3	-16.50	-23.89	
	1	1	3/2	5	1	5/2	4	1	1	1/2	3		-5.05		4	0	0	2	2	4	4	1	1	1/2	3	8.56	7.85	
	2	2	2	5	1	5/2	7/2	0	0	0	3		4.37		3	1	3/2	4	2	4	9/2	0	0	0	3	-7.94	-7.15	
	3	1	3/2	3	3	3/2	3	1	1	1/2	5	-6.92			2	0	0	3	3	9/2	9/2	2	0	0	3	5.58	7.58	

$1/2_1$ - 99.93	$1/2_2$ - 99.74	$5/2_3$ - 86.44
$5/2_1$ - 99.83	$7/2_2$ - 86.48	$3/2_3$ - 88.00
$3/2_1$ - 99.99	$7/2_1$ - 95.47	$9/2_1$ - 96.45
$3/2_2$ - 97.14	$5/2_2$ - 90.25	

Tabela III.9. Funções de onda selecionadas do ${}^6\text{Ni}$. Veja a legenda da tabela III.3.

J_i^-	J_a	J_b	J_{ab}	J_c	BCS	BBCS	PBCS	J_i^-	J_a	J_b	J_{ab}	J_c	BCS	BBCS	PBCS
$1/2_1$				$1/2$.941	.940	.948	$5/2_3$	$3/2$	$3/2$	0	$5/2$.221	.200	.251
$5/2_1$				$5/2$.987	.986	.992		$1/2$	$1/2$	0	$5/2$		-203	
$3/2_1$				$3/2$.953	.961	.956		$5/2$	$5/2$	2	$3/2$.607	.597	.615
$3/2_2$				$3/2$.193	.162	.214		$3/2$	$3/2$	2	$1/2$.521	.500	.503
	$5/2$	$5/2$	2	$1/2$.634	.633	.620		$5/2$	$5/2$	2	$1/2$.275	.211
	$5/2$	$5/2$	4	$5/2$.563	.586	.594		$3/2$	$1/2$	1	$5/2$.344	.364	.361
	$3/2$	$1/2$	2	$5/2$.397	.396	.384		$3/2$	$1/2$	2	$5/2$	-325	-277	-328
	$3/2$	$3/2$	2	$5/2$	-240	-217	-218					$3/2$.233	.225	
$1/2_2$				$1/2$.338	.341	.316		$3/2$	$3/2$	0	$3/2$	-331	-331	-308
	$3/2$	$3/2$	0	$1/2$	-344	-353	-432		$1/2$	$1/2$	0	$3/2$.251	.232	.229
	$5/2$	$5/2$	0	$1/2$.231	.242	-		$5/2$	$5/2$	2	$3/2$.398	.396	.402
	$3/2$	$1/2$	2	$5/2$.590	.604	.609		$3/2$	$3/2$	2	$1/2$	-356	-339	-350
	$5/2$	$5/2$	2	$3/2$	-473	-465	-473		$5/2$	$5/2$	2	$1/2$	-378	-356	-365
	$3/2$	$3/2$	2	$5/2$	-377	-345	-345		$3/2$	$1/2$	1	$5/2$	-260	-265	-276
									$3/2$	$1/2$	2	$5/2$.496	.530	.542
$7/2_1$								$9/2_1$							
	$5/2$	$5/2$	2	$3/2$.328	.362	.346		$5/2$	$5/2$	4	$3/2$.331	.321	.338
	$5/2$	$5/2$	4	$3/2$.266	.250	.261		$5/2$	$5/2$	4	$1/2$.378	.359	.347
	$5/2$	$5/2$	4	$1/2$.761	.750	.755		$3/2$	$3/2$	2	$5/2$	-256	-206	-195
	$3/2$	$3/2$	2	$5/2$	-255	-200	-217		$3/2$	$1/2$	2	$5/2$.577	.576	.548
	$3/2$	$1/2$	2	$5/2$.418	.444	.437		$5/2$	$5/2$	4	$5/2$.591	.628	.653
$5/2_2$								$7/2_2$							
	$1/2$	$1/2$	0	$5/2$.353	.328	.462		$5/2$	$5/2$	2	$3/2$.539	.479	.504
	$5/2$	$5/2$	0	$5/2$	-343	-338	-		$5/2$	$5/2$	4	$1/2$	-329	-386	-376
	$5/2$	$5/2$	2	$1/2$	-609	-584	-615		$3/2$	$1/2$	1	$5/2$	-621	-653	-647
	$3/2$	$1/2$	2	$5/2$	-512	-572	-540		$3/2$	$3/2$	2	$5/2$.327	.295	.284
	$5/2$	$5/2$	4	$3/2$.240	.227	.240		$3/2$	$1/2$	2	$5/2$.327	.317	.319
	$3/2$	$3/2$	2	$5/2$.216										

$$\begin{aligned}
|3/2 \ 3/2 \ 0 \ 1/2\rangle &= -.0590 |1/2\rangle + 1.0017 |3/2 \ 3/2 \ 0 \ 1/2\rangle \\
|3/2 \ 3/2 \ 0 \ 3/2\rangle &= -.2013 |3/2\rangle + 1.0201 |3/2 \ 3/2 \ 0 \ 3/2\rangle \\
|3/2 \ 3/2 \ 0 \ 5/2\rangle &= -.1611 |5/2\rangle + 1.0129 |3/2 \ 3/2 \ 0 \ 5/2\rangle \\
|1/2 \ 1/2 \ 0 \ 5/2\rangle &= .0468 |5/2\rangle + 0.3726 |3/2 \ 3/2 \ 0 \ 5/2\rangle + 1.0708 |1/2 \ 1/2 \ 0 \ 5/2\rangle
\end{aligned}$$

Tabela III.10. Distribuição em desemparelhamento ν , e desemparelhamento médio $\langle \nu \rangle$, para os estados ${}^6_5\text{Ni}$ presentes até 2.0 MeV de energia de excitação.

J_i^-	$\nu=1$			$\nu=3$			$\langle \nu \rangle$		
	MC	BCS	BBCS	MC	BCS	BBCS	MC	BCS	BBCS
1/2 ₁	96.50	95.93	97.09	3.50	4.07	4.07	1.07	1.08	1.06
3/2 ₁	99.13	99.00	98.94	0.87	1.00	1.06	1.02	1.02	1.02
7/2 ₁	2.48	39.47	1.07	97.52	60.53	98.93	2.95	2.21	2.98
3/2 ₂	96.37	58.43	97.28	3.63	41.57	2.72	1.07	1.83	1.05
5/2 ₂	32.11	17.12	24.32	67.89	82.88	75.68	2.36	2.66	2.51
7/2 ₁	0.	0.	0.	100.	100.	100.	3.	3.	3.
1/2 ₂	21.18	11.73	17.90	78.82	77.27	82.10	2.58	2.55	2.64
9/2 ₁	0.	0.	0.	100.	100.	100.	3.	3.	3.
3/2 ₃	18.39	20.24	15.99	81.61	79.76	84.01	2.63	2.60	2.68
5/2 ₃	7.03	8.19	7.21	92.97	91.81	92.75	2.86	2.84	2.86
7/2 ₂	0.	0.	0.	100.	100.	100.	3.	3.	3.

Tabela III.11. Funções de onda selecionadas do ${}^6\text{Ni}$. Veja a legenda da tabela III.3.

J_i^-	J_a	J_b	J_{ab}	J_c	BCS	EBCS	PBCS	J_i^-	J_a	J_b	J_{ab}	J_c	BCS	EBCS	PBCS
$1/2_1$				$1/2$.974	.981	.980	$9/2_1$							
$5/2_1$				$5/2$.992	.991	.995		$5/2$	$5/2$	4	$5/2$.582	.504	.519
$3/2_1$				$3/2$	-.615				$3/2$	$1/2$	2	$5/2$.582	.605	.600
	$5/2$	$5/2$	2	$1/2$.475	.733	.723		$5/2$	$5/2$	4	$1/2$.444	.547	.533
	$3/2$	$1/2$	2	$5/2$.386	.367	.373		$5/2$	$5/2$	4	$3/2$.299	.240	.251
	$5/2$	$5/2$	4	$5/2$.426	.526	.526	$3/2_2$				$3/2$.229		
				$3/2$.754	.984	.981		$3/2$	$3/2$	0	$3/2$	-.276	-.233	-.252
	$5/2$	$5/2$	2	$1/2$.495				$1/2$	$1/2$	0	$3/2$.266	.258	.296
	$5/2$	$5/2$	4	$5/2$.360				$3/2$	$1/2$	2	$5/2$.568	.629	.616
$5/2_2$									$5/2$	$5/2$	2	$3/2$.349	.284	.283
	$1/2$	$1/2$	0	$5/2$	-.409	-.371	-.562		$3/2$	$3/2$	2	$1/2$	-.340	-.322	-.323
	$5/2$	$5/2$	0	$5/2$.351	.315	-		$5/2$	$5/2$	2	$1/2$	-.376	-.390	-.379
	$5/2$	$5/2$	2	$1/2$.648	.710	.665		$3/2$	$1/2$	1	$5/2$	-.278	-.291	-.288
	$3/2$	$1/2$	2	$5/2$.454	.435	.420	$5/2_3$							
$7/2_1$									$3/2$	$3/2$	0	$5/2$.236	.224	.252
	$5/2$	$5/2$	4	$1/2$.833	.882	.877		$5/2$	$5/2$	2	$3/2$.574	.503	.511
	$3/2$	$1/2$	2	$5/2$.382	.348	.352		$3/2$	$3/2$	2	$1/2$.501	.495	.498
	$5/2$	$5/2$	2	$3/2$.250				$3/2$	$1/2$	1	$5/2$.367	.403	.399
	$5/2$	$5/2$	4	$3/2$.227				$3/2$	$1/2$	2	$5/2$	-.418	-.495	-.487
	$3/2$	$3/2$	2	$5/2$	-.214			$7/2_2$							
$1/2_2$				$1/2$.225				$3/2$	$1/2$	1	$5/2$.663	.705	.699
	$3/2$	$3/2$	0	$1/2$	-.363	-.334	-.419		$3/2$	$1/2$	2	$5/2$	-.400	-.473	-.464
	$5/2$	$5/2$	0	$1/2$.212				$5/2$	$5/2$	2	$3/2$	-.517	-.446	-.458
	$3/2$	$1/2$	2	$5/2$.648	.713	.691		$5/2$	$5/2$	4	$1/2$.292	.240	.248
	$5/2$	$5/2$	2	$3/2$	-.476	-.458	.453		$3/2$	$3/2$	2	$5/2$.220		
	$3/2$	$3/2$	2	$5/2$	-.355	-.321	.323								

$$\begin{aligned}
 |3/2 \ 3/2 \ 0 \ 3/2\rangle &= -.2104 |3/2\rangle + 1.0219 |3/2 \ 3/2 \ 0 \ 3/2\rangle \\
 |3/2 \ 3/2 \ 0 \ 1/2\rangle &= -.1298 |1/2\rangle + 1.0084 |3/2 \ 3/2 \ 0 \ 1/2\rangle \\
 |3/2 \ 3/2 \ 0 \ 5/2\rangle &= -.2379 |5/2\rangle + 1.0279 |3/2 \ 3/2 \ 0 \ 5/2\rangle \\
 |1/2 \ 1/2 \ 0 \ 3/2\rangle &= -.1783 |3/2\rangle + 0.2052 |3/2 \ 3/2 \ 0 \ 3/2\rangle + 1.0290 |1/2 \ 1/2 \ 0 \ 3/2\rangle \\
 |1/2 \ 1/2 \ 0 \ 5/2\rangle &= -.1144 |5/2\rangle + 0.3827 |3/2 \ 3/2 \ 0 \ 5/2\rangle + 1.0674 |1/2 \ 1/2 \ 0 \ 5/2\rangle
 \end{aligned}$$

- (iii) estados com $8\% \leq$ peso de $v=5 \leq 20\%$ e diferença por superposição entre 10% a 15% : $7/2_2^-$, $9/2_2^-$, $3/2_3^-$ e $5/2_3^-$.

3.b. Momentos e Transições

Os momentos magnéticos e elétricos, calculados com MC e com MC3, são mostrados, respectivamente, nas figuras III.5 e III.6. Verificamos que, de um modo geral, os valores calculados com MC são maiores em módulo. O acordo entre os valores calculados para os momentos dos estados: $3/2_1^-$, $5/2_1^-$, $1/2_1^-$, $3/2_2^-$ e $1/2_2^-$ é muito bom, a maior diferença verificada é para o $\mu_{3/2_2^-}$ no ^{63}Ni cujo valor é 20% menor com MC3. Os valores calculados para os estados $5/2_2^-$ e $7/2_1^-$ apresentam um acordo apenas razoável, com diferenças em módulo menor ou igual a 50% do valor calculado com MC; para os estados $3/2_3^-$, $5/2_3^-$ e $7/2_2^-$ o acordo é ruim.

Devemos salientar que nos casos selecionados para o cálculo das taxas de transição o estado final é sempre um estado com peso de $v=5$ desprezível, i.é., um dos estados: $3/2_1^-$, $5/2_1^-$ ou $1/2_1^-$.

Nas figuras III.7 e III.8 apresentamos, respectivamente, as taxas de transição BM1 e BE2 calculadas com MC e com MC3. Os valores calculados para as transições magnéticas envolvendo os estados: $3/2_1^-$, $5/2_1^-$, $1/2_1^-$, $3/2_2^-$, $1/2_2^-$, $5/2_2^-$ e $7/2_1^-$, com ambos tratamentos, são praticamente idênticos; a única diferença se verifica para a taxa BM1($7/2_1^- \rightarrow 5/2_1^-$), cujo valor é 20% menor com MC3. O acordo entre os valores calculados para as taxas BE2, que envolvem os estados $3/2_1^-$,

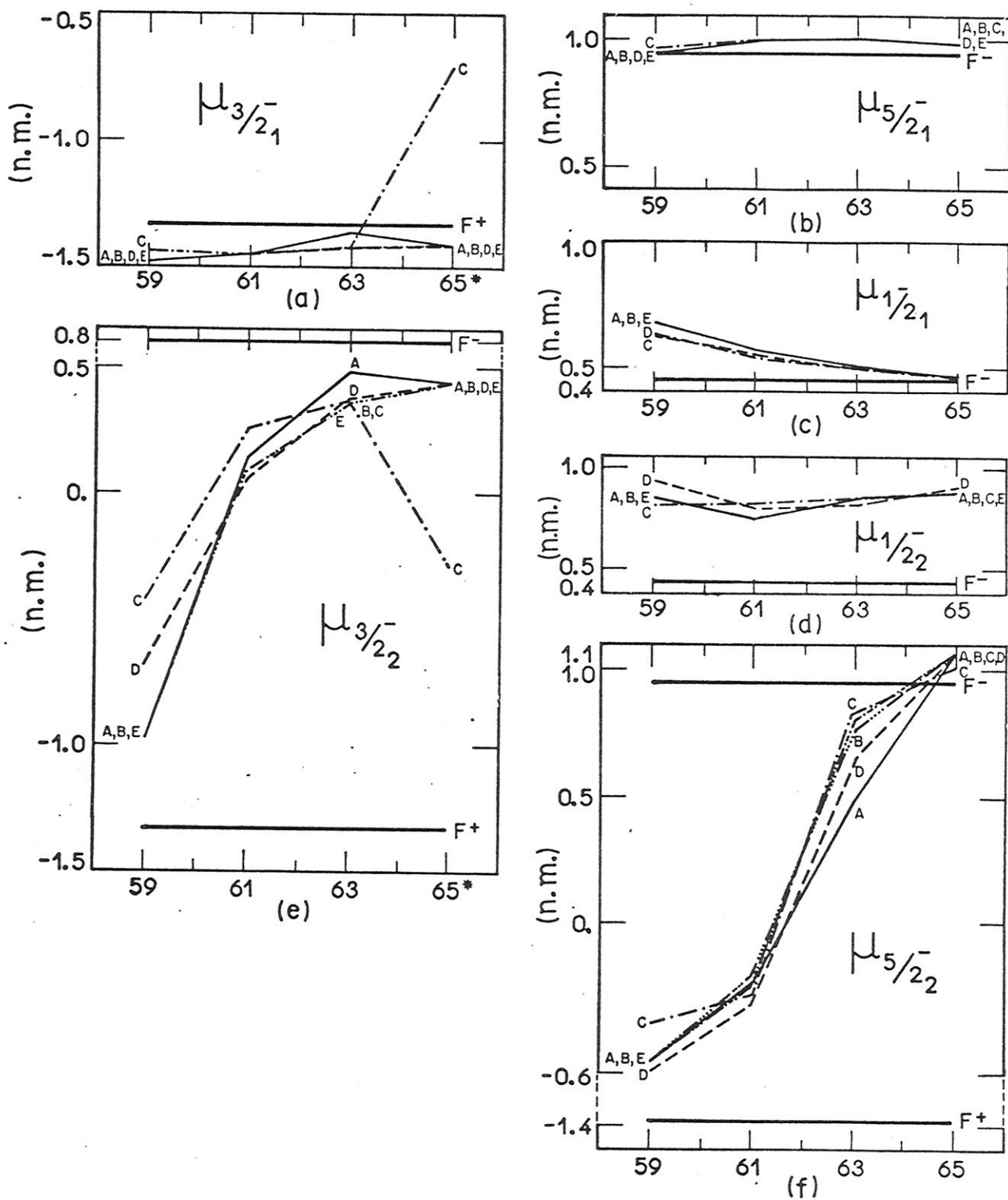


Figura III.5_{a-k}. Momentos dipolares magnéticos μ em função da massa atômica para os isótopos do Níquel. Apresentamos os resultados teóricos calculados com MC[(A)——], MC3[(B)-----], BCS[(C)——], BBCS[(D)----] e PBCS[(E)-.-.-]; e as avaliações de partícula única para $j=l+1/2$ [(F⁺)——], e para $j=l-1/2$ [(F⁻)——]. O símbolo * significa o intercâmbio entre os estados $3/2_1$ e $3/2_2$ para o núcleo indicado.

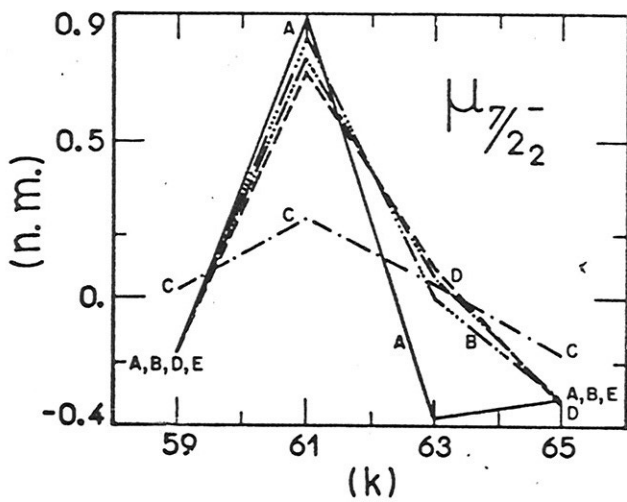
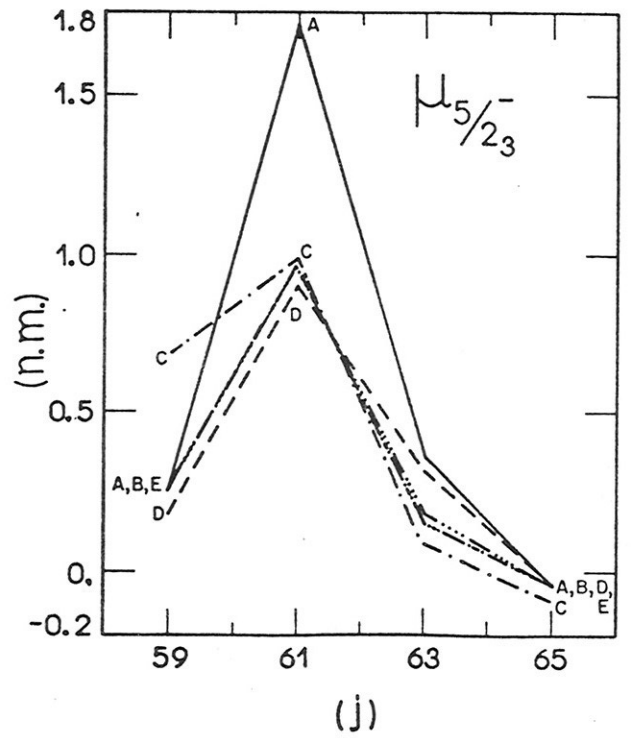
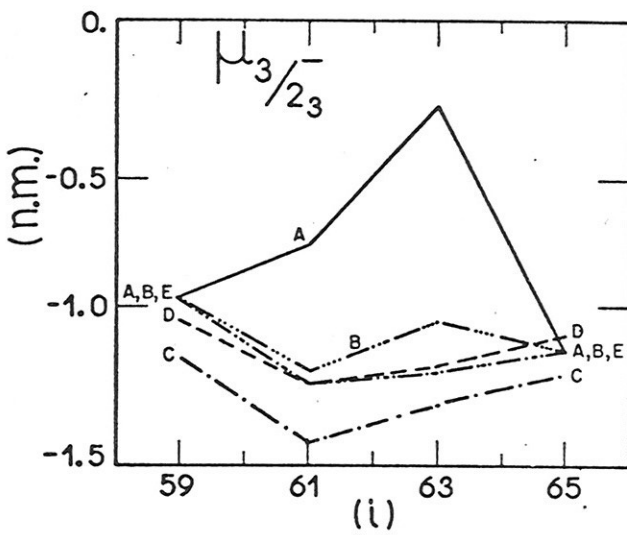
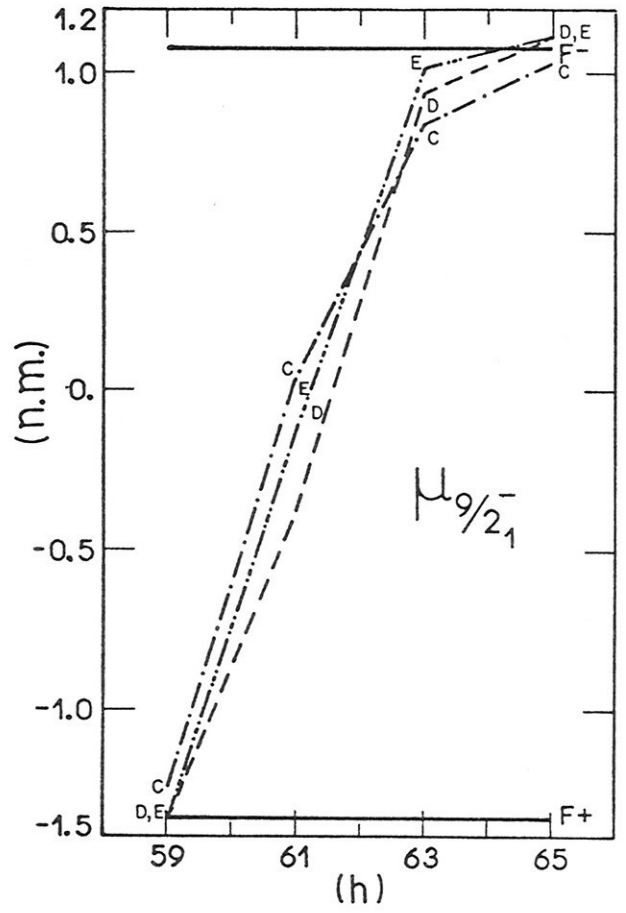
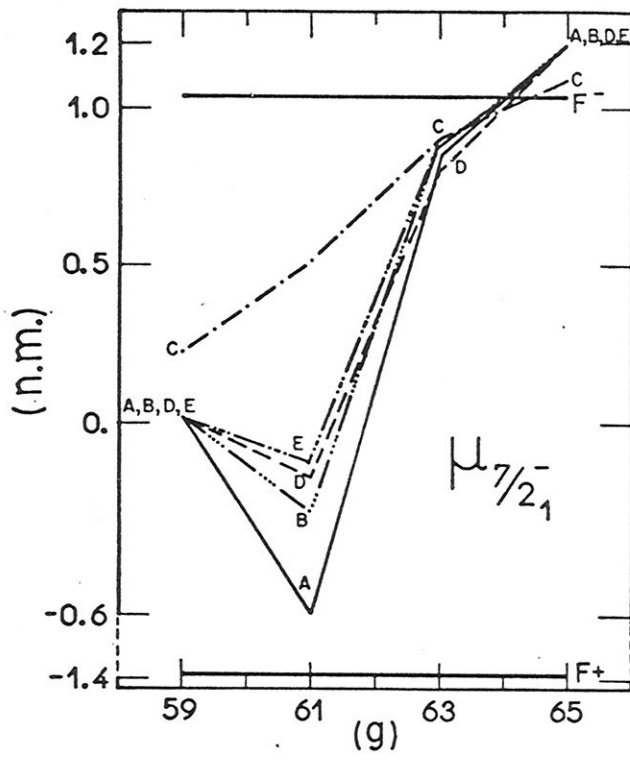


Figura III.5_{g-k}. Veja a legenda da página anterior.

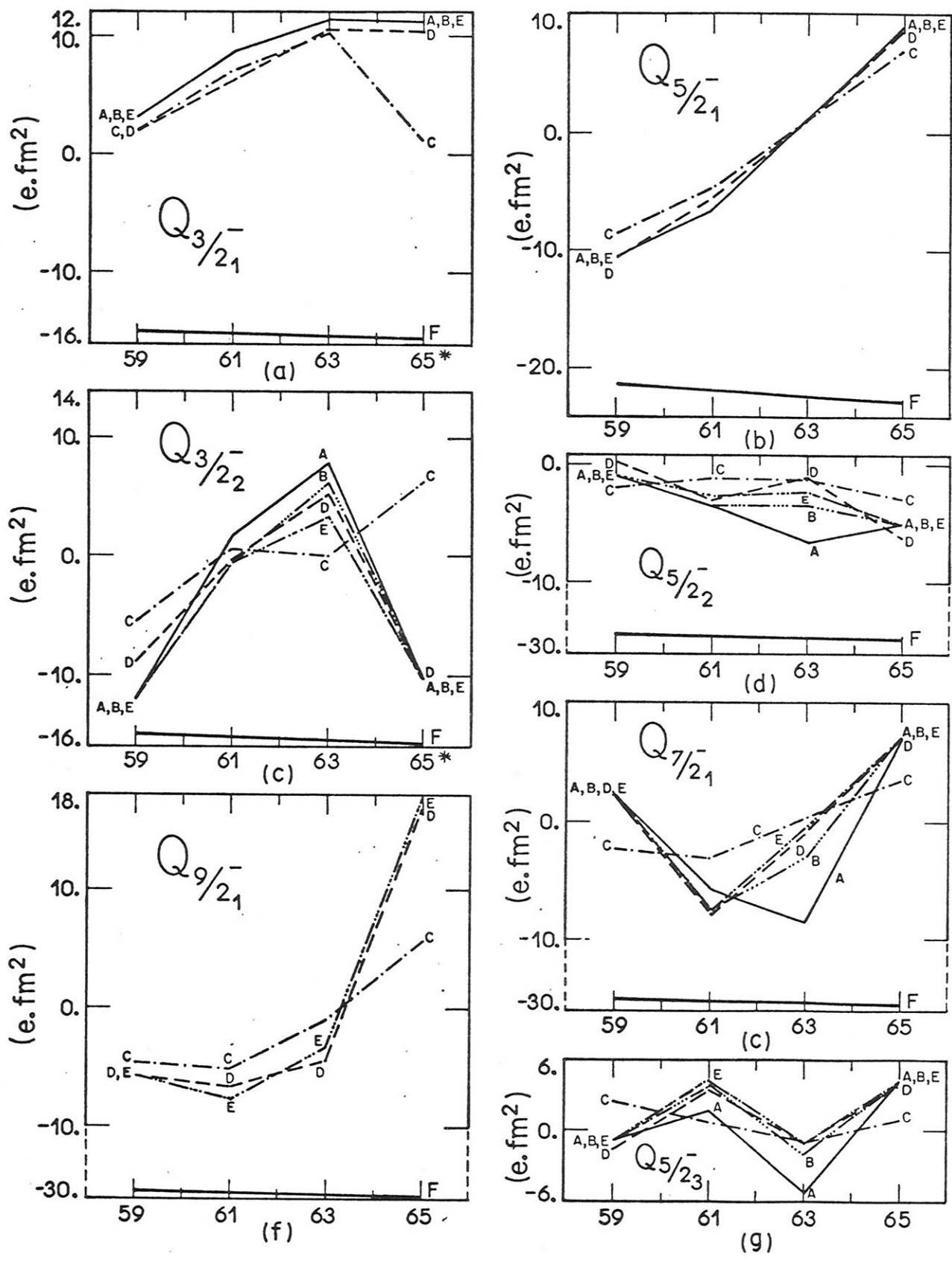


Figura III.6 a-i. Momentos quadrupolares elétricos Q em função da massa atômica para os isótopos do Níquel. Veja a legenda da figura III.5.

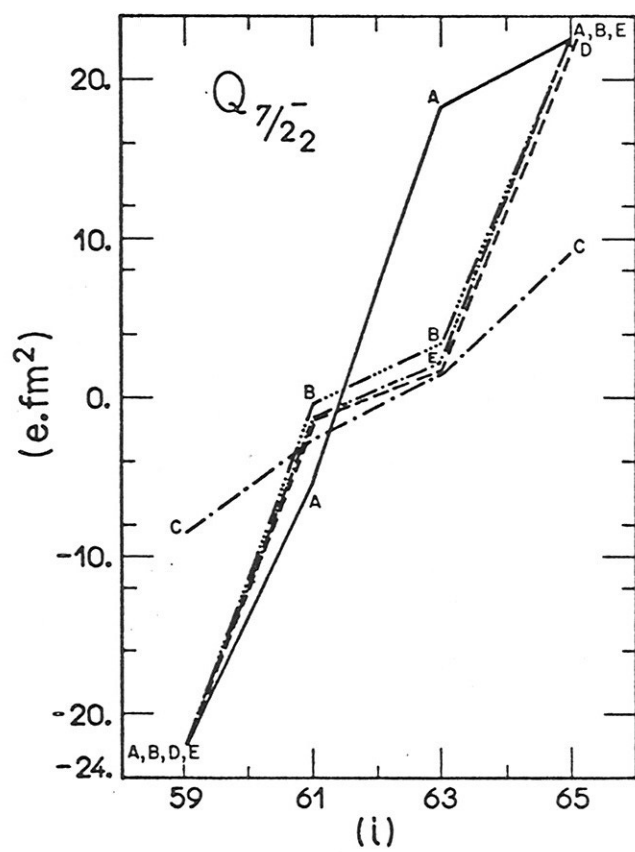
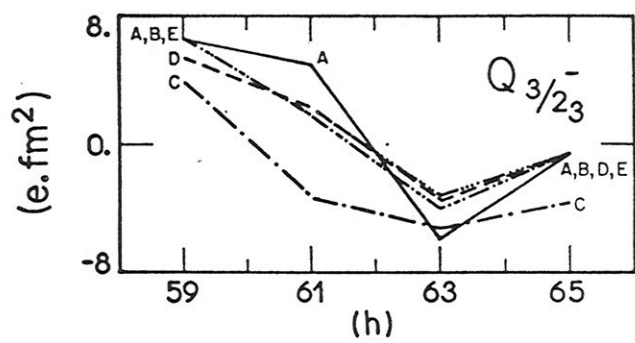


Figura III.6_{h-i}. Veja a legenda da página anterior.

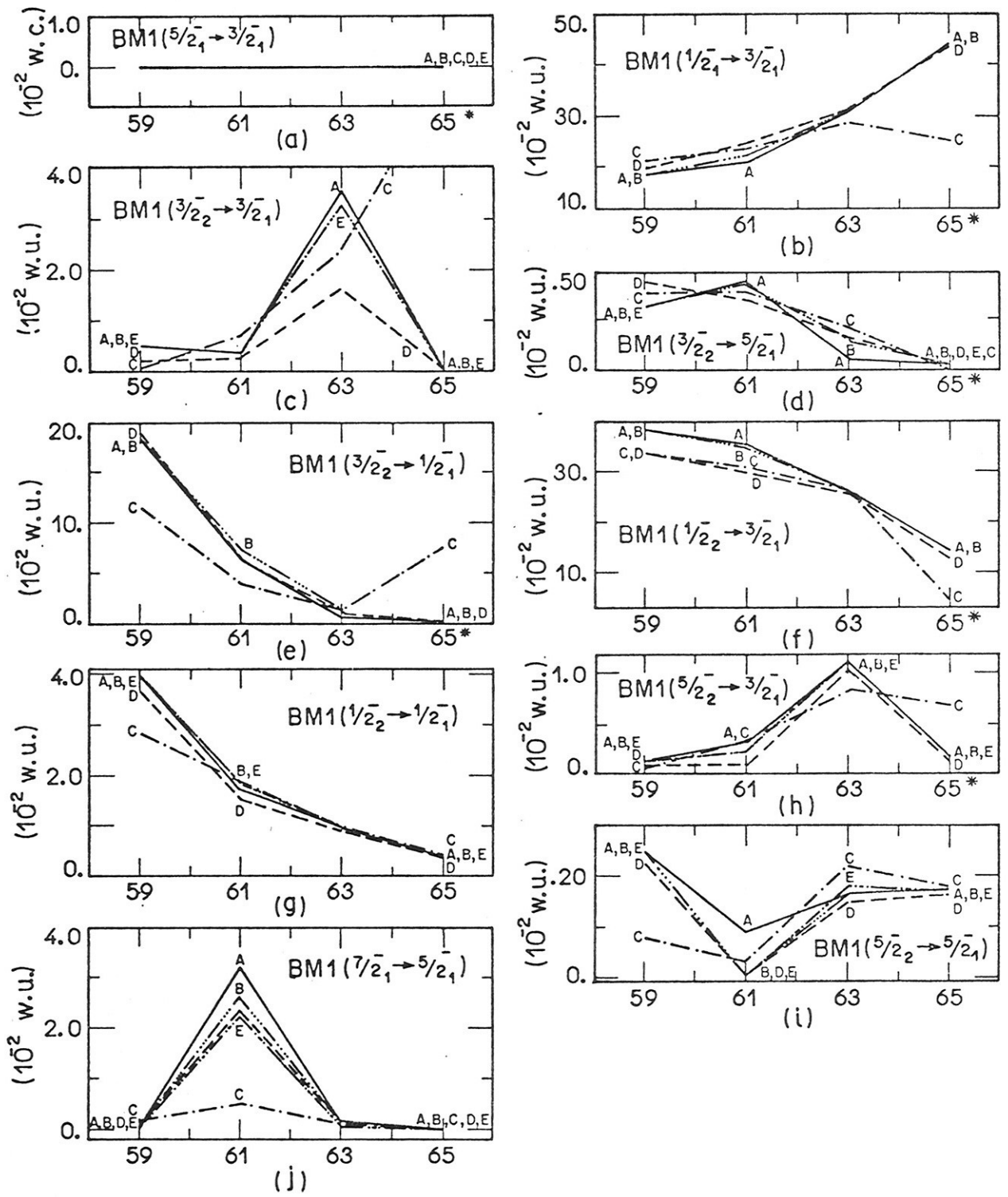


Figura III.7_{a-p}. Probabilidades de transição BM1 em função da massa atômica para os isótopos do Níquel. Veja a legenda da figura III.5.

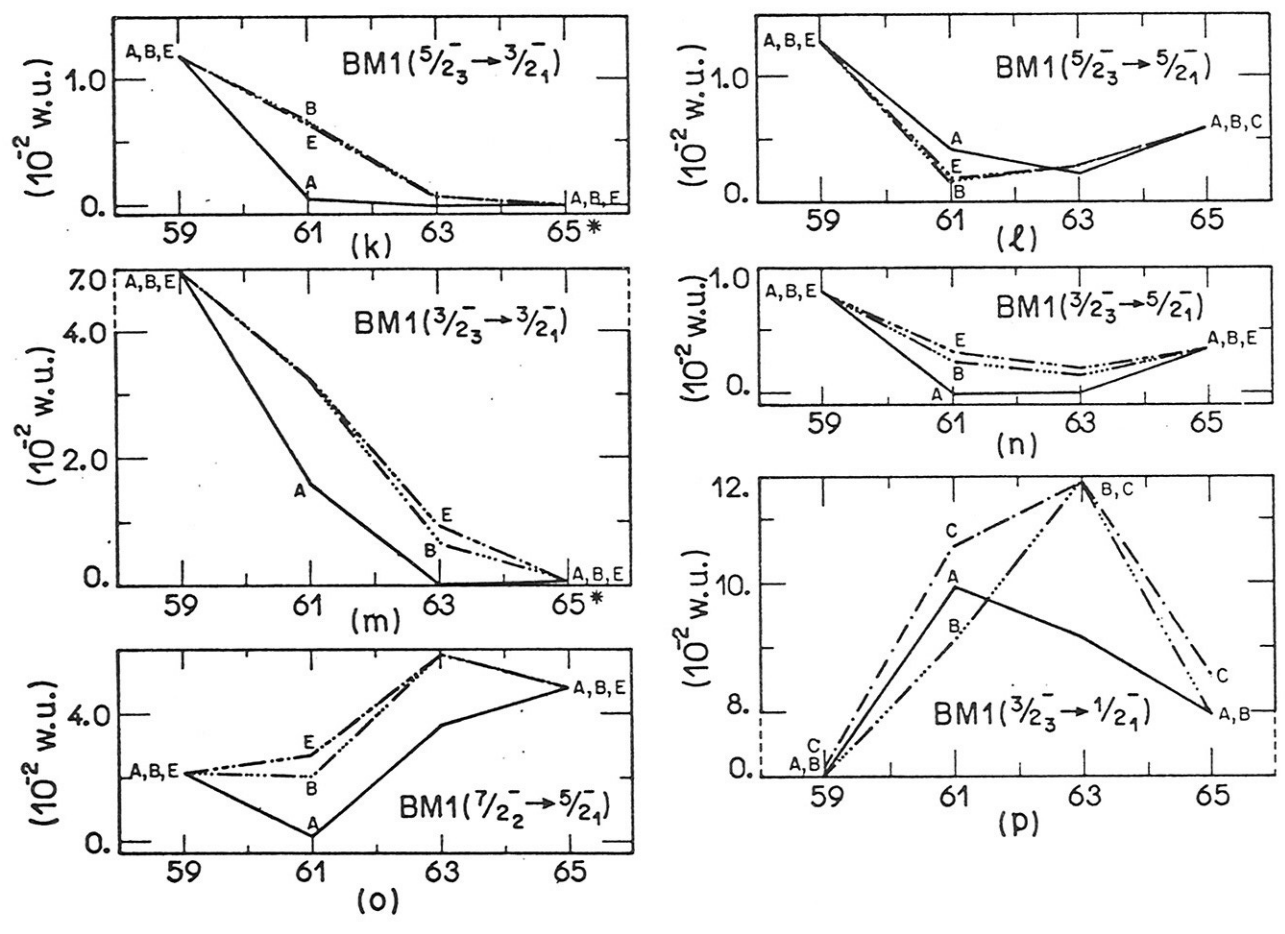


Figura III.7_{k-p}. Veja a legenda na página anterior.

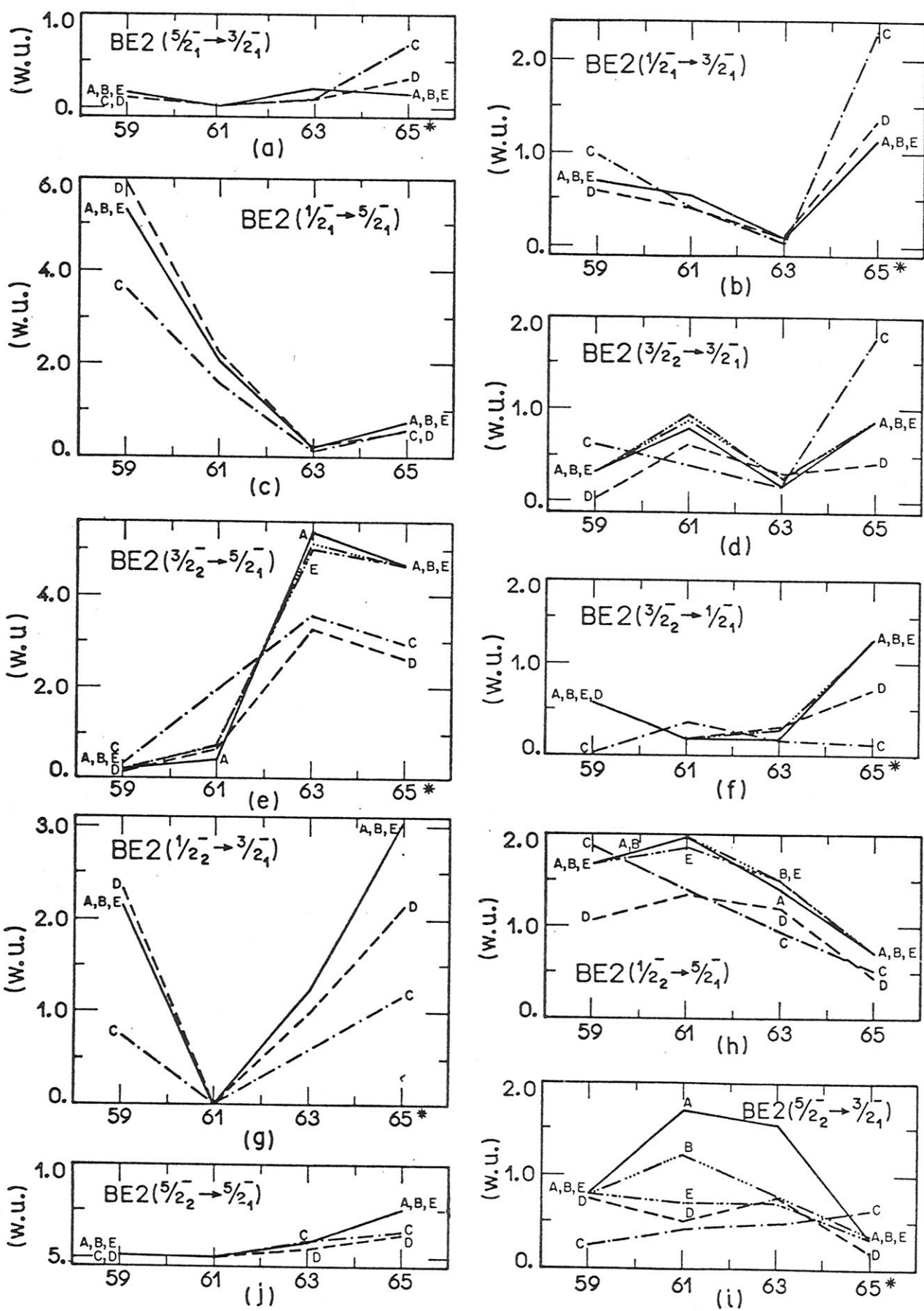


Figura III.8 a-v. Probabilidades de transição BE2 em função da massa atômica, para os isótopos do Níquel. Veja a legenda da figura III.5.

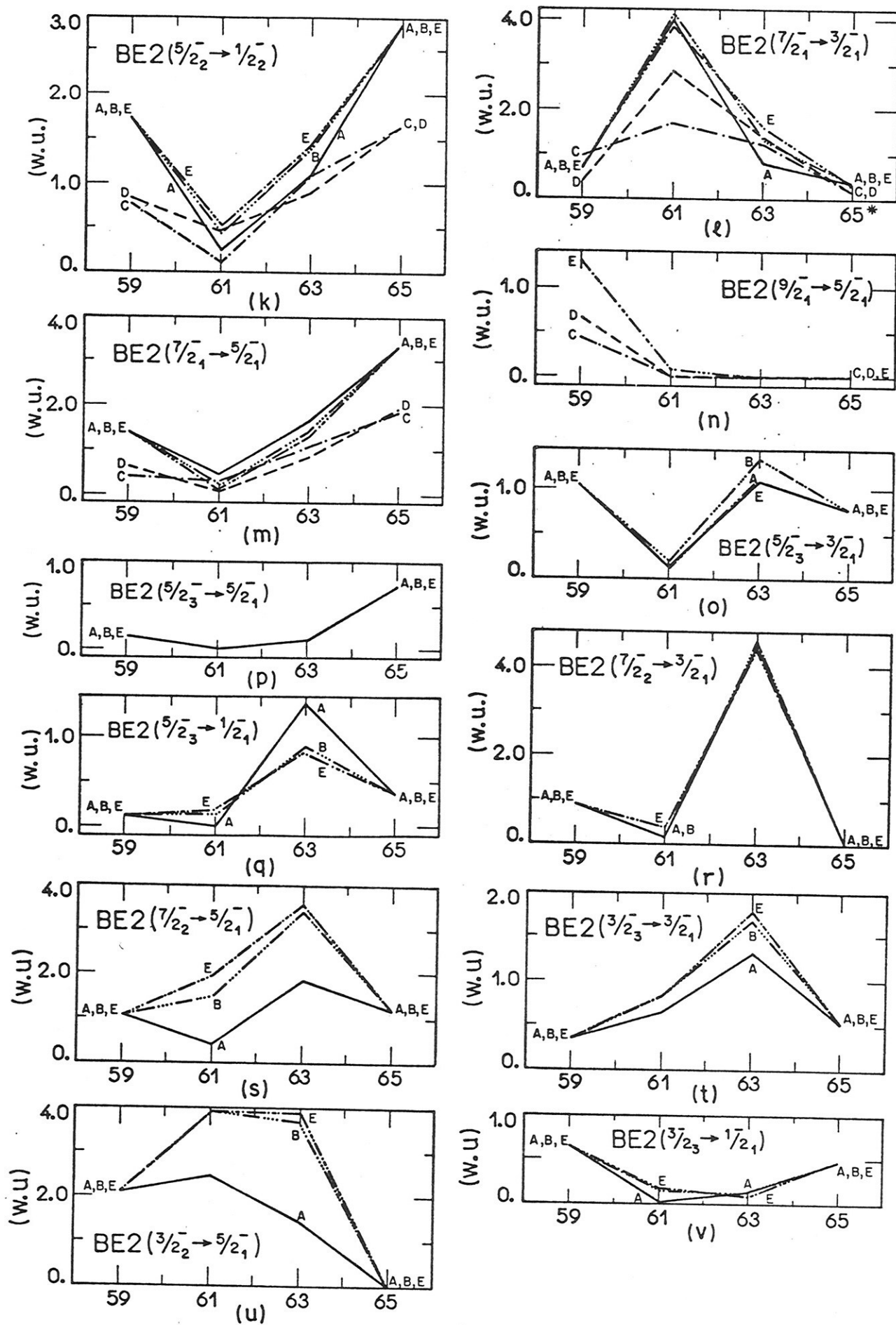


Figura III.8_{k-v}. Veja a legenda na página anterior.

$5/2_1^-$, $1/2_1^-$, $3/2_2^-$ e $1/2_2^-$ é muito bom; já para os estados $5/2_2^-$ e $7/2_1^-$ o acordo é apenas razoável. Finalmente, para as transições eletromagnéticas dos estados $3/2_3^-$, $5/2_3^-$ e $7/2_2^-$ são verificadas grandes diferenças.

3.c. Discussão

Como esperado, a densidade de níveis é menor com MC3, porém já em baixo espectro, até 2.0 MeV de energia de excitação, o número de estados com MC é maior, e ocorrem, entre esses estados, alguns cuja maior componente é de desemparelhamento cinco, dois no ${}^6_3\text{Ni}$ e um no ${}^6_1\text{Ni}$.

As diferenças de energia de excitação com MC e com MC3 para os estados correspondentes são pequenas, sempre menor que 200 keV, mesmo para estados que contêm até 25% de $\nu=5$. Todavia, pequenas porcentagens ($\sim 10\%$) de desemparelhamento cinco podem afetar sensivelmente os valores dos momentos e das probabilidades de transição; veja, por exemplo, as diferenças entre os valores obtidos para o μ e o Q do estado $7/2_2^-$ (com 13% de $\nu=5$) do ${}^6_3\text{Ni}$.

De um modo geral, o tratamento com MC3 é insatisfatório na descrição das propriedades eletromagnéticas dos estados com peso total das componentes com $\nu=5 > 10\%$. Isto é uma característica muito importante do cálculo com o modelo de camadas truncado em desemparelhamento, pois não depende da particular interação residual empregada. Mesmo para estados que apresentam porcentagem de $\nu=5 < 10\%$, o efeito é, geralmente, de aumentar em módulo, até por um fator dois, o valor calculado com MC3. Assim, para uma avaliação mais ri-

gorosa dos resultados em função dos dados experimentais, é indispensável estimar de algum modo as correções devido as misturas de $\nu=5$ nesses estados. O que pode ser conseguido, por exemplo, através da extensão do tratamento usado por Feed et al.⁶¹⁾ no cálculo das contribuições devidas as misturas de $\nu=3$ nos momentos magnéticos.

Devemos ressaltar que embora estados mais energéticos, com diferentes *spins*, possam até ter menor desemparelhamento médio, para os estados presentes até 2.0 MeV nos isótopos $^{61}, ^{63}\text{Ni}$, a n -enésima solução para um dado *spin* J_n^- possui sempre $\langle \nu \rangle J_n^- \geq \langle \nu \rangle J_{n-1}^-$. O que justifica, plenamente, a suposição de baixo desemparelhamento ($\nu < 3$) nesse intervalo de energia, como critério de truncamento da base. Cabe-nos, portanto, verificar para quantas soluções de cada *spin* os resultados com MC3 são satisfatórios.

A grosso modo, podemos resumir nossas conclusões acerca dos resultados obtidos com MC3, especificamente para os isótopos $^{61}, ^{63}\text{Ni}$, como se segue: os resultados em termos de energia de excitação, momentos e transições eletromagnéticas, são satisfatórios comparados aos resultados obtidos com MC, para as soluções com desemparelhamento médio ≈ 1 , i.é. na camada considerada para os estados: $3/2_1^-$, $5/2_1^-$ e $1/2_1^-$, e para a primeira solução de cada *spin* com desemparelhamento médio ≈ 3 que ocorre em baixo espectros, i.é. para os estados: $3/2_2^-$, $5/2_2^-$, $1/2_2^-$, $7/2_1^-$ e $9/2_1^-$.

A discussão qualitativa das características mais gerais devido ao corte em desemparelhamento está apresentada na seção IV.3.c.

4. INFLUÊNCIA DOS ESTADOS AUSENTES NA BASE DE BCS

Uma vez estabelecidos na seção anterior os limites onde os resultados com MC3 são satisfatórios, em relação a MC, passamos a analisar, dentro desses limites, qual a influência das componentes presentes na base com MC3 e ausentes com BCS. Ou seja, mais especificamente, qual a influência dos estados de 5QP com $v=1$ e com $v=3$, em relação ao tratamento no espaço truncado em 1QP e 3QP. Fixaremos nossa análise na comparação dos resultados obtidos com PBCS e com MC3 para os isótopos ${}^{61}, {}^{63}\text{Ni}$, pois com BCS e com BBCS temos também mesclado o efeito devido aos estados espúrios. Na tabela III.1, apresentamos as dimensões da base envolvida em cada caso.

4.a. Espectros

Nas figuras III.2 e III.3, apresentamos os espectros calculados para os isótopos ${}^{61}, {}^{63}\text{Ni}$, respectivamente. Até 2.0 MeV de energia de excitação, os espectros com PBCS e com MC3 são praticamente análogos. O número de estados e ordenação dos níveis é a mesma para o ${}^{61}\text{Ni}$, e ocorre apenas uma inversão entre os estados presentes do ${}^{63}\text{Ni}$. As diferenças de energia entre os estados excitados correspondentes se limitam a $\Delta E \leq 70$ keV para o ${}^{61}\text{Ni}$ e $\Delta E \leq 40$ keV para o ${}^{63}\text{Ni}$.

Nas tabelas III.4 e III.7, apresentamos as distribuições em desemparelhamento para os estados presentes até 2.0 MeV em cada isótopo. As distribuições com PBCS são praticamente idênticas às com MC3, as diferenças são sempre me-

nores ou iguais a 1%.

4.b. Momentos e Transições

Nas figuras III.5a a III.5k apresentamos os momentos magnéticos calculados. Os valores obtidos com PBCS são idênticos aos valores obtidos com MC3 para os estados $3/2_1^-$, $5/2_1^-$ e $7/2_1^-$ e, para os demais estados, os resultados são também bastante próximos, as diferenças são todas menores ou iguais a 0.15 n.m..

Apresentamos nas figuras III.6a a III.6e os momentos elétricos calculados. Para os estados $3/2_1^-$ e $5/2_1^-$ os resultados com PBCS são idênticos aos com MC3 e, para os demais estados analisados, os resultados são todos praticamente análogos, principalmente para o ^{61}Ni .

As taxas BM1 calculadas são mostradas nas figuras III.7b a III.7o. Os valores calculados com PBCS são praticamente idênticos para as transições que envolvem como estado inicial os estados: $3/2_1^-$, $5/2_1^-$, $1/2_1^-$, $3/2_2^-$, $1/2_2^-$, $5/2_2^-$, $7/2_1^-$ e $9/2_1^-$. Para os demais casos as diferenças verificadas são pequenas, todas menores que 10^{-2} W.U..

Mostramos nas figuras III.8a a III.8m os valores das taxas BE2 calculadas. Com PBCS os resultados envolvendo os estados iniciais: $3/2_1^-$, $5/2_1^-$, $1/2_1^-$, $3/2_2^-$, $1/2_2^-$, $5/2_2^-$ e $7/2_1^-$ são praticamente análogos aos com MC3. A única diferença verificada é para a transição $5/2_2^- \rightarrow 3/2_1^-$ no ^{61}Ni ; porém, em valor absoluto, é pequena.

4.c. Discussão

Observamos que, de um modo geral, em relação aos resultados obtidos com MC, dentro dos limites citados, as duas aproximações, MC3 e PBCS, apresentam resultados praticamente análogos, com raras exceções, porém, nesses casos, tendo em vista o valor obtido com MC o resultado com PBCS é sempre satisfatório. É importante notar que, mesmo para os estados que apresentam com MC uma razoável porcentagem de $\nu=5$ ($\geq 15\%$), os resultados com MC3 e PBCS são análogos. Veja, por exemplo, os resultados para os momentos e transições envolvendo os estados: $3/2_3^-$, $5/2_3^-$ e $7/2_2^-$.

Portanto, especificamente para os estados presentes nos espectros dos isótopos $^{61,63}\text{Ni}$ até 1.90 MeV de energia de excitação, as componentes de 5QP com $\nu=1$ e com $\nu=3$ exercem muito pouca influência nos resultados. Sendo as diferenças mais significativas em relação ao cálculo com MC, ainda devido essencialmente à ausência das componentes com $\nu=5$.

5. INFLUÊNCIA DAS CORREÇÕES INTRODUZIDAS EM BCS

O cálculo com BCS no espaço com 1QP e 3QP é uma aproximação para o tratamento com o modelo de camadas truncado (com $\nu \leq 3$). Logo, na discussão dos efeitos devido à *blocking*, com BBCS, e a projeção em número de partículas com PBCS, tomamos como referência os resultados obtidos com MC3 dentro dos limites estabelecidos na seção 3.c..

5.a. Espectros

Apresentamos nas figuras III.1 a III.4, os espectros de energia dos isótopos $^{59,61,63,65}\text{Ni}$, calculados com as aproximações utilizadas. Os espectros com BCS, BBCS e PBCS até 2 MeV são bastante semelhantes, sem grandes diferenças entre as energias de excitação dos respectivos estados, e na ordenação dos níveis. As diferenças de energia de excitação em relação a MC3 com BCS são geralmente menores que 200 keV, exceção feita somente aos estados $5/2_2^-$ com $\Delta E=230$ keV e $11/2_1^-$ com $\Delta E=240$ keV, do ^{61}Ni . Com BBCS a ordenação dos níveis é melhor e, as diferenças nas energias são menores, todas menores ou iguais a 130 keV.

As distribuições em desemparelhamento desses estados são apresentadas nas tabelas III.2, III.4, III.7 e III.10 para os respectivos isótopos. As diferenças entre as distribuições calculadas com as quatro aproximações para os estados dos isótopos $^{61,63}\text{Ni}$ são geralmente pequenas, menores ou iguais a 5%, especialmente para o ^{63}Ni .

Nas tabelas III.3, III.6, III.9 e III.11, apresentamos as funções de onda dos estados analisados calculadas com as aproximações BCS, BBCS e PBCS. As funções de onda para os três primeiros estados, $3/2_1^-$, $5/2_1^-$ e $1/2_1^-$ com as três aproximações são semelhantes, exceção feita ao estado $3/2_1^-$ no ^{65}Ni . Para os demais estados, verificamos que as diferenças mais significativas entre BCS e as demais aproximações estão nas amplitudes das componentes com $\nu=3$, enquanto com BBCS esses valores são próximos aos com PBCS. Em relação a amplitude das componentes com $\nu=3$ calculados com BBCS, o tra

tamento com BCS apresenta os seguintes resultados:

- (i) no ^{59}Ni , a partir do quarto estado, verificamos grandes diferenças, destacadamente para a amplitude da componente $[(3/2)^2 2, 5/2]$ nos estados: $1/2_2^-$, $7/2_1^-$, $3/2_3^-$, $5/2_3^-$, $7/2_2^-$ e $9/2_1^-$ que apresentam, respectivamente, as diferenças: 6%, 35%, 16%, 24%, 22% e 17%; e para a amplitude da componente $[(3/2)^2 2, 1/2]$ no estado $5/2_2^-$ com diferença de 17%;
- (ii) no ^{61}Ni também é comum ocorrerem diferenças da ordem de 10% nas amplitudes calculadas. Dentre elas, destacamos as seguintes: na componente $[(3/2)^2 4, 1/2]$ do estado $7/2_1^-$, 25%, e na componente $[(3/2)^2 2, 5/2]$ do estado $7/2_2^-$, 14%;
- (iii) no ^{63}Ni as diferenças são pequenas, geralmente menores que 4%;
- (iv) no ^{65}Ni temos grandes diferenças para a amplitude das componentes $[(5/2)^2 2, 1/2]$ e $[(5/2)^2 4, 5/2]$, dos estados $3/2_1^-$ e $3/2_2^-$. Tanto que com BCS temos o estado $3/2_1^-$ com $\langle v \rangle \approx 3$ e o $3/2_2^-$ com $\langle v \rangle \approx 1$, enquanto com BCS temos ambos com $\langle v \rangle \approx 2$.

5.b. Momentos e Transições

Os resultados obtidos para os momentos magnéticos e elétricos e para as taxas de transição BM1 e BE2 são apresentados, respectivamente, nas figuras III.5, III.6, III.7 e III.8, onde destacamos os seguintes pontos:

- (i) as quatro aproximações (MC3, BCS, BCS, PBCS) apre

sentam, geralmente, resultados análogos para as propriedades magnéticas;

- (ii) pior acordo é obtido com BCS em relação aos valores calculados com MC3, especialmente para os isótopos $^{59}, ^{65}\text{Ni}$; para o ^{61}Ni as diferenças mais significativas são para os seguintes valores: $\mu 7/2_1^-, \mu 7/2_2^-, Q 7/2_1^-, BM1(7/2_1^- \rightarrow 5/2_1^-), BE2(7/2_1^- \rightarrow 3/2_1^-)$ e $BE2(3/2_2^- \rightarrow 5/2_1^-)$ e, para o ^{63}Ni , os resultados são geralmente satisfatórios, as únicas diferenças a assinalar são para os valores: $Q 3/2_2^-, BM1(3/2_2^- \rightarrow 3/2_1^-)$ e $BE2(3/2_2^- \rightarrow 5/2_1^-)$;
- (iii) os cálculos com BBCS apresentam geralmente melhor acordo com MC3 do que os resultados obtidos com BCS. Para os isótopos $^{61}, ^{63}\text{Ni}$ os resultados são bastante satisfatórios; as poucas diferenças mais significativas ocorrem para os isótopos $^{59}, ^{65}\text{Ni}$;
- (iv) a aproximação PBCS é a que apresenta o melhor acordo com os resultados obtidos com MC3, a comparação detalhada de seus resultados foi desenvolvida na seção III.4.

5.c. Discussão

Como examinado na seção II.6, o efeito das componentes espúrias é bem mais significativa nos estados de 3QP com $\nu=3$. Portanto, é fácil compreender porque, de um modo geral, com BCS os resultados são mais satisfatórios, para os isótopos $^{61}, ^{63}\text{Ni}$ que apresentam maior número de partículas (ou buracos) na camada de valência e, porque os maiores

desvios são observados nos estados puros de $\nu=3$. Os aspectos mais específicos sobre a qualidade dos resultados, com BCS e com BBCS, para os diferentes isótopos, podem ser compreendidos qualitativamente pela dependência da redução na energia de excitação devido a quebra de um par (Δ) em relação ao nível de Fermi. Recentemente, Zeng et al.⁶²⁾, através de um modelo esquemático, observaram que com *blocking* essa redução é bastante significativa (\approx metade da energia de separação dos níveis de partícula única) quando o nível bloqueado α encontra-se próximo ao nível de Fermi, e diminui rapidamente com $|\epsilon_\alpha - \lambda|$.

Assim, observando na figura III.9 a localização relativa do nível de Fermi para os diferentes isótopos, podemos compreender as diferenças observadas com BCS assinaladas na seção 5.a. Uma vez que a quebra de um par no orbital $p_{3/2}$ afeta especialmente o peso das componentes com $(3/2)^2$ nos isótopos ^{59}Ni e ^{61}Ni , menores diferenças são observadas no ^{63}Ni e, o efeito devido à proximidade dos orbitais $f_{5/2}$ e $p_{1/2}$ leva às diferenças acentuadas nos pesos das componentes $[(5/2)^2 2, 1/2]$ e $[(5/2)^2 4, 5/2]$ para os estados $3/2_1^-$ e $3/2_2^-$ do ^{65}Ni .

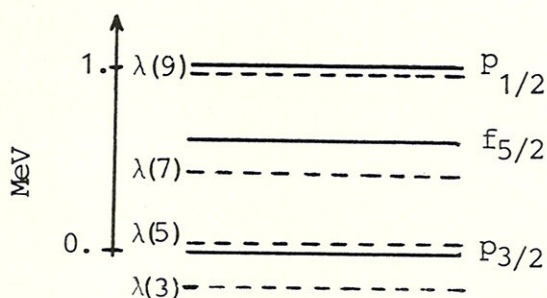


Figura III.9. Posição relativa do nível de Fermi $\lambda(n)$ e dos estados de partícula independente, para os isótopos do ${}_{28}\text{Ni}_{28+n}$, com $n=3, 5, 7, 9$.

Em relação as propriedades eletromagnéticas,

os grandes desvios verificados com BCS, citados na seção 5.b, são devidos essencialmente às grandes diferenças (maior que 15%) nas amplitudes para a componente de maior peso com $\nu=3$. O melhor acordo para as propriedades magnéticas pode ser qualitativamente compreendida através do valor médio do operador de um corpo T_λ . Das relações do apêndice A, temos:

- (i) entre estados com igual número de quasipartículas e iguais ν 's:

$$\langle nQP(1) || T_\lambda || nQP(2) \rangle \sim (u_1 u_2' - (-)^\lambda v_1 v_2') \quad (\text{III.1})$$

- (ii) entre estados com diferentes número de quasipartículas e diferentes ν 's:

$$\begin{aligned} \langle nQP(1) || T_\lambda || n'QP(abJ_1c;2) \rangle &\sim (u_c' v_b' + (-)^\lambda v_c' u_b') \delta_{J_1, \text{par}} \\ &\sim (u_a' v_b' + (-)^\lambda v_a' u_b') \delta_{J_1, \lambda} \quad (\text{III.2}) \end{aligned}$$

O termo $(u_1 u_2' - v_1 v_2')$ é mais sensível a pequenas variações na probabilidade de ocupação dos níveis localizados longe da superfície de Fermi, enquanto, nesses casos, temos sempre $(u_1 u_2' + v_1 v_2') \sim 1$. Ainda o número de estados com $J_1 = \lambda = 2$, nessa camada, é grande para todos os *spins*, enquanto com $J_1 = \lambda = 1$ apenas uma única componente, $[(3/2, 1/2), 1, 5/2]$, é encontrada na base para os *spins* 3/2, 5/2 e 7/2. Isto explica porque as propriedades elétricas são mais afetadas por pequenas variações nos parâmetros supercondutores, ou por pequenas variações nas amplitudes, do que as propriedades magnéticas.

Ainda, com as relações III.1 e III.2, podemos entender as particulares diferenças observadas nos momentos e transições eletromagnéticas. Como, por exemplo, para a taxa $BM1(7/2_1^- \rightarrow 5/2_1^-)$ no ${}^6\text{Ni}$ o valor calculado é devido a contribuição $\langle 5/2 || M1 || (3/2, 1/2) 1, 5/2 \rangle$, logo as diferenças verificadas, na tabela III.6, para o peso da componente $[(3/2, 1/2) 1, 5/2]$ no estado $7/2_1^-$ explicam os diferentes valores obtidos.

Especialmente para os isótopos do Ni, tendo em vista o exposto nas seções 5.a e 5.b, chegamos as conclusões apresentadas a seguir:

- os espectros calculados com a aproximação BCS são satisfatórios e, as propriedades eletromagnéticas dos estados com $\langle v \rangle \approx 1$, são geralmente bem reproduzidas, já os resultados para as primeiras soluções com $\langle v \rangle \approx 3$ somente para o ${}^6\text{Ni}$ são razoáveis. Com BBBCS essas propriedades são bem reduzidas em todos os isótopos, e os resultados são geralmente equivalentes aos com PBBCS.

Portanto, na descrição dos isótopos do Níquel, tendo como referência os resultados obtidos com MC3 dentro dos limites estabelecidos na seção 3.c, é suficiente o emprego da aproximação BECS, sendo de pouca relevância a influência das componentes espúrias remanescentes no tratamento com *blocking*.

6. INFLUÊNCIA DA INTERAÇÃO RESIDUAL

Embora o emprego de diferentes interações possam apresentar espectros de energia semelhantes, elas podem levar a diferenças importantes para as distribuições em desemparelhamento de estados. Na tabela III.12, apresentamos a decomposição em desemparelhamento de estados no ${}^{61}\text{Ni}$, calculadas com SDI e com a interação efetiva proposta por Cohen et al.⁶³⁾. Verificamos que somente para os dois estados com $\nu=1$ (isto é, $3/2_1^-$ e $5/2_1^-$) as distribuições são semelhantes e, para a fração com $\nu=5$ no $5/2_2^-$ temos uma diferença de 6%.

Tabela III.12. Decomposição percentual em desemparelhamento de estados no ${}^{61}\text{Ni}$, calculadas com SDI (A), e por Cohen et al.⁶³⁾ (B)

Decomposição Percentual						
Estado	$\nu=1$		$\nu=3$		$\nu=5$	
	A	B	A	B	A	B
$3/2_1^-$	93.8	92.1	6.2	7.3	0.1	0.6
$5/2_1^-$	95.6	96.3	3.7	3.6	0.8	0.1
$1/2_1^-$	79.9	95.9	19.8	3.9	0.3	0.2
$3/2_2^-$	10.9	29.8	88.7	65.6	0.4	4.6
$5/2_2^-$	15.8	20.8	73.0	74.3	11.2	4.9
$1/2_2^-$	42.6	26.6	56.5	72.3	0.9	1.1

Tendo em conta que pequenas diferenças percentuais ($\sim 10\%$) nas distribuições em desemparelhamento podem causar grandes desvios nos valores calculados, para observáveis eletromagnéticos, é, portanto, fundamental a escolha da interação residual a ser empregada.

Obviamente, quanto mais intenso for o efeito da interação residual entre estados com diferentes desemparelhamentos, mais influência terá nos resultados o corte em desemparelhamento. É claro que as interações que conservam o desemparelhamento, são as mais adequadas para o tratamento com corte em desemparelhamento. Porém, estamos interessados em examinar as características mais gerais que independem da particular interação utilizada nas aproximações analisadas.

A interação SDI foi escolhida por ser simples (veja apêndice B), e por apresentar resultados satisfatórios para as propriedades de núcleos esféricos s.c.a., em baixo espectro⁵⁷⁾.

7. COMPARAÇÃO COM OS DADOS EXPERIMENTAIS

Vários cálculos têm sido desenvolvidos na tentativa de explicar a estrutura dos isótopos do Ni^{1,16,63-71)}. A principal diferença entre eles reside no tipo de interação residual usada. Todos reproduzem razoavelmente, dentro de um certo limite, o espectro de energia. O melhor acordo é obtido por Koops et al.⁷¹⁾, que utilizam elementos de matriz efetivos, ajustados tomando como base os valores com SDI. Na tentativa de descrição das propriedades eletromagnéticas apenas Glaudemans et al.¹⁶⁾, obtêm um acordo razoável com os dados experimentais, para os primeiros estados excitados e, especificamente para o ⁵⁹Ni, Vanden Berghe⁷⁰⁾, através de um modelo semi-microscópico, consegue um razoável acordo para taxas de transição BE2 envolvendo estados mais excitados.

Nosso cálculo com MC é semelhante ao da Ref. 16, onde a interação SDI é também empregada, e no cálculo das propriedades elétricas, a carga do nêutron é tomada como parâmetro. Contudo, em nosso tratamento no cálculo das propriedades magnéticas, tomamos apenas o fator giromagnético de *spin* como parâmetro, enquanto que na Ref. 16, os cinco elementos de matriz de órbita única são ajustados

7.a. Espectros

Os espectros obtidos com MC e os experimentais adotados são apresentados na figura III.10. Observamos que os esquemas experimentais até 2 MeV de energia de excitação para os isótopos $^{59}, ^{61}\text{Ni}$ são razoavelmente bem estabelecidos. Recentemente as incertezas nos *spins* adotados para o ^{61}Ni foram removidas⁷³⁾. Os espectros experimentais para os isótopos $^{63}, ^{65}\text{Ni}$ são bastante incompletos, necessitando ainda de novas investigações.

Para o ^{61}Ni todos os níveis até 2 MeV podem ser relacionados a níveis no espectro experimental, o mesmo ocorre para o ^{59}Ni se o nível 1.73 MeV tiver $J^\pi=3/2^-$. É interessante notar que todos os estados $J^\pi=7/2^-$ experimentalmente conhecidos entre 1 e 2 MeV têm contrapartida no espectro com MC, ainda que a subcamada $1f_{7/2}$ não tenha sido incluída. Para todos isótopos do Ni considerados, até 2 MeV, o cálculo com MC apresenta ao menos um estado $J^\pi=9/2^-$; até agora somente no ^{59}Ni , um estado, e no ^{61}Ni , dos estados, foram observados experimentalmente. Ainda nos isótopos considerados, o cálculo com MC apresenta até 2.5 MeV um estado $J^\pi=11/2^-$; apenas no ^{61}Ni e aparentemente no ^{59}Ni este estado foi con -

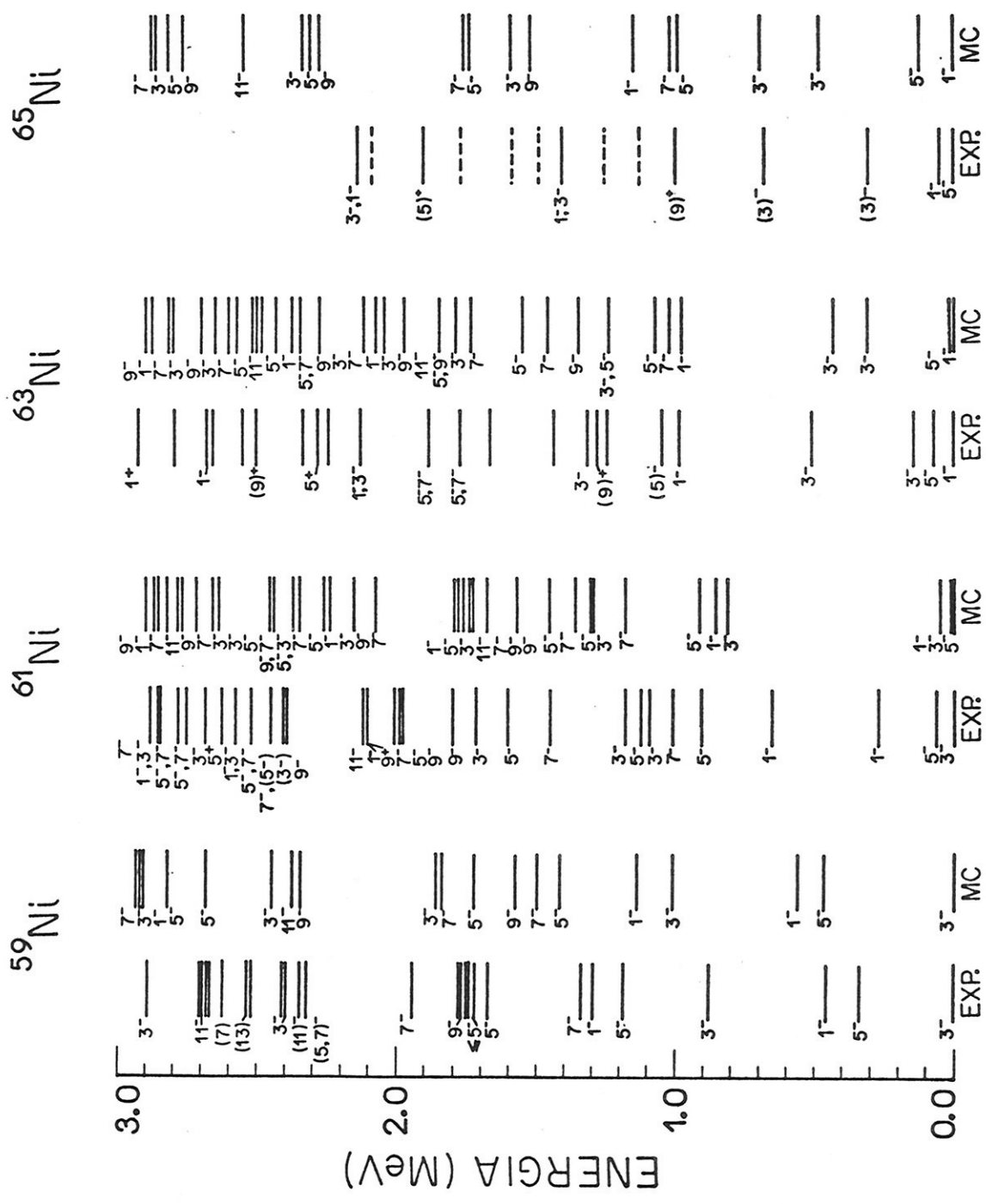


Figura III.10. Espectros de energia para os isótopos do Níquel. Os espectros experimentais adotados (EXP) foram extraídos das referências 72-75. A notação (J^π) indica dúvida na atribuição do "spin" e/ou da paridade, e os níveis indicados com linha interrompida são estados de existência duvidosa. Os "spins" calculados com MC são de paridade negativa, e estão na forma 2J.

firmado experimentalmente.

Finalmente, os estados de paridade positiva nos $^{63,65}\text{Ni}$ são devidos as misturas de $1g_{9/2}^{71}$.

7.b. Momentos e Transições

Apresentamos, nas tabelas III.13 a III.15, os dados experimentais existentes, os nossos resultados com MC, e os resultados obtidos nas referências 16 e 70.

Para os isótopos $^{59,61}\text{Ni}$ temos um número razoável de informações experimentais acerca de suas propriedades eletromagnéticas, notadamente para o ^{61}Ni coletadas na referência 73. Para os isótopos $^{63,65}\text{Ni}$ o único dado experimental é o momento magnético do primeiro estado $J^\pi = 5/2^-$.

Na comparação que se segue, tomamos como referência nossos resultados para as propriedades elétricas com $e_n^{\text{eff}} = 3.6e$, e para as propriedades magnéticas com $g_s^{\text{eff}} = 0.35 g_s^{\text{livre}}$.

Nossos resultados e os da referência 16 para os momentos magnéticos, nos casos onde há informação experimental, são praticamente idênticos, reproduzindo os valores observados; para o $5/2_1^-$ do ^{59}Ni e para os estados $3/2_1^-$ e $5/2_1^-$ do ^{61}Ni , e dando um bom acordo com o valor observado para o momento do $5/2_1^-$ dos $^{63,65}\text{Ni}$.

São conhecidos apenas dois valores experimentais para os momentos elétricos, para os estados $3/2_1^-$ e $5/2_1^-$ do ^{61}Ni . Estes são reproduzidos com nosso cálculo utilizando-se $e^{\text{eff}} = 3.6e$. Para os momentos elétricos dos três primeiros estados dos demais isótopos, nossos resultados são

Tabela III.13. Momentos quadrupolares elétricos Q e dipolares magnéticos μ calculados com MC, experimentais (EXP), e calculados na referência 16 (A), onde empregamos com MC os valores: $e_p^{eff} = 1.7e$ (MC₁), $e_p^{eff} = 3.6e$ (MC₂), e $g_s^{eff} = 0.35g_s$ (MC).

	Q (e.b)				μ (n.m)			
	EXP	MC ₁	MC ₂	A	EXP	MC	A	B
⁵⁹ Ni								
3/2 ₁ ⁻		.03	.06	.07		-.74	-.77	
5/2 ₁ ⁻		-.10	-.22	-.16	.35 ₁₅ ^a	.48	.47	.50
1/2 ₁ ⁻						.34	.78	
⁶¹ Ni								
3/2 ₁ ⁻	+.162 ₁₅ ^b	+.085	+.18	+.13	-.75 ^b	-.73	-.77	
5/2 ₁ ⁻	-.18 ₅ ^b	-.064	-.14	-.11	+.46 ₃ ^b	.50	.42	
1/2 ₁ ⁻						.29	.88	
⁶³ Ni								
1/2 ₁ ⁻						.26	1.0	
5/2 ₁ ⁻		+.013	+.026	-.002	+.74 ^e	+.50	+.46	
3/2 ₁ ⁻		+.11	+.23	+.16		-.68	-.77	
⁶⁵ Ni								
1/2 ₁ ⁻						.24	1.1	
3/2 ₁ ⁻		+.09	+.19	+.11	+.69 ₆ ^f	+.50	.49	
5/2 ₁ ⁻		-.10	-.22	-.14		.22	-.02	

a. Ref. 76

d. Ref. 70

b. Ref. 73

e. Ref. 74

c. Ref. 77

f. Ref. 78

Tabela III.14. Probabilidade de transição BE2 e BM1 para o ^{59}Ni , calculadas com MC, experimentais (EXP), e calculadas na referência 16 (A) e na referência 70 (B). Veja a legenda da tabela III.13.

Transição	BE2 (w.u.)						BM1 (10^{-2} w.u.)		
	EXP ^C	EXP ^d	MC ₁	MC ₂	A	B	EXP ^C	MC	A
$5/2_1^- \rightarrow 3/2_1^-$	1.24		0.16	0.72	0.30		0.67	0.003	1.70
$1/2_1^- \rightarrow 3/2_1^-$			0.69	3.09	1.0		1.0	9.2	17.3
$3/2_2^- \rightarrow 3/2_1^-$	1.45		0.31	1.39	9.1	19.8	7.4	.25	2.8
$5/2_2^- \rightarrow 3/2_1^-$	8.7		0.80	3.59	13.3	19.6	3.6	.07	1.1
$1/2_2^- \rightarrow 3/2_1^-$			2.15	9.64	8.1	13.9	5.7	19.1	5.1
$7/2_1^- \rightarrow 5/2_1^-$	33.0	25.1 _{13.2}	1.39	6.23	6.7	15.6	0.27	$<10^{-3}$	0.3
$5/2_3^- \rightarrow 3/2_1^-$	1.1		1.06	4.75	0.2		0.07	0.6	0.7
$9/2_1^- \rightarrow 5/2_1^-$		11.80 _{1.47}	1.31	5.87		16.0			
$7/2_2^- \rightarrow 3/2_1^-$		11.29 _{1.17}	.88	3.95		13.7			

Tabela III.15. Probabilidade de transição BE2 e BM1 para o ^{61}Ni . Veja a legenda da tabela III.14.

Transição	BE2 (w.u.)			BM1 (10^{-2} w.u.)	
	EXP ^b	MC ₁	MC ₂	EXP ^b	MC
$5/2_1^- \rightarrow 3/2_1^-$	0.28 ₄	0.03	0.14	.118 ₄	.001
$1/2_1^- \rightarrow 3/2_1^-$	1.8 ₅	0.54	2.4	4.2 ₇	10.5
$3/2_2^- \rightarrow 3/2_1^-$	3.4 ₁₅	0.79	3.5	1.06 ₁₈	17.0
$\rightarrow 1/2_1^-$	11 ₊₁₉₋₁₀	0.19	0.85	8 ₆	3.2
$1/2_2^- \rightarrow 3/2_1^-$	10 ₊₃₋₆	0.002	0.01	0.10 ₊₁₉₋₆	17.8
$\rightarrow 5/2_1^-$	2.8 ₇	2.0	8.8	0.38 ₉	0.89
$\rightarrow 1/2_1^-$	-	-	-		
$5/2_2^- \rightarrow 3/2_1^-$	2.3 ₁₉	1.70	7.62	3.3 ₁₉	0.17
$\rightarrow 5/2_1^-$	17 ₁₀	0.006	0.03	0.20 ₁₂	0.05
$\rightarrow 1/2_1^-$	20 ₁₂	0.25	1.12		
$7/2_1^- \rightarrow 3/2_1^-$	2.02 ₂₇	4.00	17.9		
$\rightarrow 5/2_1^-$	7.3 ₁₀	0.46	2.06	.061 ₁₀	1.61
$5/2_3^- \rightarrow 3/2_1^-$	7.4 ₂₅	0.12	0.54	2.42 ₂₇	0.05
$\rightarrow 5/2_1^-$	-	-	-	2.05 ₂₁	0.22
$7/2_2^- \rightarrow 3/2_1^-$	0.8 ₄	0.15	0.67	-	-
$\rightarrow 5/2_1^-$	2.8 ₁₃	0.41	1.8	0.042 ₂₃	0.08

análogos aos da referência 16, exceção feita somente ao $5/2_1^-$ do ^{63}Ni .

De um modo geral, para as taxas de transição BM1, o acordo entre os dados experimentais e nossos resultados é bastante pobre. Nosso resultado para a transição $5/2_1^- \rightarrow 3/2_1^-$ é sensivelmente afetado pela proibição por Δl . Para o ^{59}Ni com o ajuste feito na referência 16 pode-se reproduzir dois resultados experimentais para as transições: $1/2_2^- \rightarrow 3/2_1^-$ e $7/2_1^- \rightarrow 5/2_1^-$, e as discrepâncias são geralmente menores. A grande diferença entre o nosso tratamento e o da referência 16 está no valor efetivo do elemento de matriz reduzido: $\langle f_{5/2} \parallel M1 \parallel p_{3/2} \rangle$. Também para o ^{61}Ni o acordo entre nossos resultados e os experimentais é insatisfatório. Porém, para cinco transições nossos resultados são razoáveis, desses um bom acordo é obtido para a transição $7/2_2^- \rightarrow 5/2_1^-$ e o valor observado experimentalmente para a transição $3/2_2^- \rightarrow 1/2_1^-$ é reproduzido.

Por fim, as taxas de transição BE2 calculadas (com $e^{\text{eff}} = 3.6e$) para os isótopos $^{59}, ^{61}\text{Ni}$, envolvendo até o quarto estado excitado, estão em bom acordo com os valores experimentais. Para transições envolvendo estados mais excitados, o acordo é geralmente pobre, nesses casos, os valores obtidos na referência 70 para o ^{59}Ni , são os que mais se aproximam dos dados experimentais. Para quatro dos sete casos nos quais há dados experimentais para o ^{59}Ni as transições: $5/2_1^- \rightarrow 3/2_1^-$, $3/2_2^- \rightarrow 3/2_1^-$, $5/2_2^- \rightarrow 3/2_1^-$ e $9/2_1^- \rightarrow 5/2_1^-$, nossos resultados são satisfatórios, especialmente para a transição $3/2_2^- \rightarrow 3/2_1^-$ cujo valor é reproduzido pelo nosso cálculo. Para o ^{61}Ni nosso cálculo apresenta valores razoáveis para as transições: $5/2_1^- \rightarrow 3/2_1^-$, $3/2_2^- \rightarrow 1/2_1^-$, e reproduz os valores observados para as

transições: $1/2_1^- \rightarrow 3/2_1^-$, $3/2_2^- \rightarrow 3/2_1^-$ e $7/2_2^- \rightarrow 5/2_1^-$.

7.c. Discussão

Como nossa principal preocupação é estudar a importância dos graus de liberdade desprezados e das correções introduzidas em BCS, em situações físicas mais realistas, a presente comparação tem por objetivo avaliar em que extensão os resultados com MC, usando SDI, podem ser considerados satisfatórios. Portanto, no presente cálculo não tivemos a pretensão de conseguir o melhor ajuste para os dados experimentais existentes.

Em relação aos espectros de energia até 2.0 MeV de excitação, o acordo com os dados experimentais é bom, especialmente em vista da simplicidade da interação residual, dos espaços de configuração limitados, e da não inclusão de excitações do caroço ^{56}Ni . Já em relação as propriedades eletromagnéticas, os resultados obtidos são menos satisfatórios. O fator giromagnético empregado está dentro dos padrões usuais; todavia, o valor da carga efetiva do nêutron necessário para um ajuste razoável em relação aos dados experimentais é excessivo, mesmo o empregado na referência 16, o que indica um forte efeito coletivo do caroço, comprometendo a hipótese de caroço inerte nessa região de massa ⁷⁰⁾.

A característica principal do tratamento com MC, observada também em cálculos similares ^{16,59)}, é que os resultados para a terceira solução, ou soluções de ordem superior, para um dado *spin* e paridade, que ocorre em um particular isótopo, são geralmente mal reproduzidas, indicando funções de onda impróprias para esses estados.

CAPÍTULO IV. CÁLCULOS PARA ISÓTONOS IMPARES COM $N=82$

1. INTRODUÇÃO

Neste capítulo, efetuamos uma comparação sistemática dos resultados obtidos para os isótonos ^{135}I , ^{137}Cs , ^{139}La , ^{141}Pr e ^{143}Pm , com as aproximações MC, MC3, BCS, BBCS e PBCS.

Na seção 2, apresentamos o conjunto de parâmetros utilizados, que, coerentemente, foi empregado em todos os tratamentos analisados.

Nas seções 3, 4 e 5, dando continuidade à análise desenvolvida no capítulo III, estudamos a influência dos graus de liberdade não considerados, e a importância das correções introduzidas em BCS. Para esse fim, tomamos como referência os resultados obtidos para os estados de paridade positiva, com quatro órbitas de partícula única (ou seja, com prótons nos orbitais: $1g_{7/2}$, $2d_{5/2}$, $2d_{3/2}$ e $1s_{1/2}$).

Finalmente, na seção 6, apresentamos a comparação entre os resultados obtidos, com 5 órbitas de partícula única (ou seja, permitindo também a ocupação do orbital $1h_{11/2}$), e os dados experimentais existentes.

2. PARÂMETROS UTILIZADOS

Os isótonos considerados correspondem a uma seqüência ímpar com $n \leq 11$ prótons na camada $N=50-82$. Os valores das energias de partícula independente utilizados

$(\epsilon(d_{5/2}) - \epsilon(g_{7/2})) = 0.80 \text{ MeV}$; $\epsilon(d_{3/2}) - \epsilon(g_{7/2}) = 2.62 \text{ MeV}$;
 $\epsilon(s_{1/2}) - \epsilon(g_{7/2}) = 2.68 \text{ MeV}$ e $\epsilon(h_{11/2}) - \epsilon(g_{7/2}) = 2.69 \text{ MeV}$ foram
 tomados da Ref. (79) e, segundo a avaliação de Kisslinger e
 Sorensen²¹⁾, usamos para o parâmetro da interação residual
 SDI, $G = 0.20 \text{ MeV}$. Ainda no cálculo das propriedades eletromag-
 néticas, foram empregados valores efetivos usuais para a car-
 ga do próton e para os fatores giromagnéticos, ou seja,
 $e^{\text{eff}} = 2e$ e $g_s^{\text{eff}} = 0.4g_s^{\text{livre}}$.

3. INFLUÊNCIA DAS COMPONENTES COM $\nu=5$

Devido à dificuldades em relação ao tamanho
 da base, essa discussão se restringe aos resultados obtidos
 com o modelo de camadas completo (MC) e truncado em desemp-
 relhamento três (MC3) para o ^{137}Cs , com 4 orbitais de partí-
 cula independente. As dimensões da base envolvida em cada
 caso são dadas na tabela IV.1

Tabela IV.1. Dimensões da base envolvida com N partículas de
 valência, considerando 4 orbitais de partícula
 única (4) e cinco orbitais (5).

SPIN	N=3		N=5		N=7	N=9
	BCS MC (5)	BCS MC (4)	MC (4)	MC3 (4)	MC3 (4)	MC3 (4)
1/2	16	12	107	39	73	96
3/2	32	25	198	80	149	198
5/2	37	28	253	93	174	231
7/2	37	27	271	91	173	231
9/2	33	23	252	82	159	215
11/2	26	16	211	59	117	160
13/2	18	8	153	30	62	86
15/2	15	5	105	20	41	57

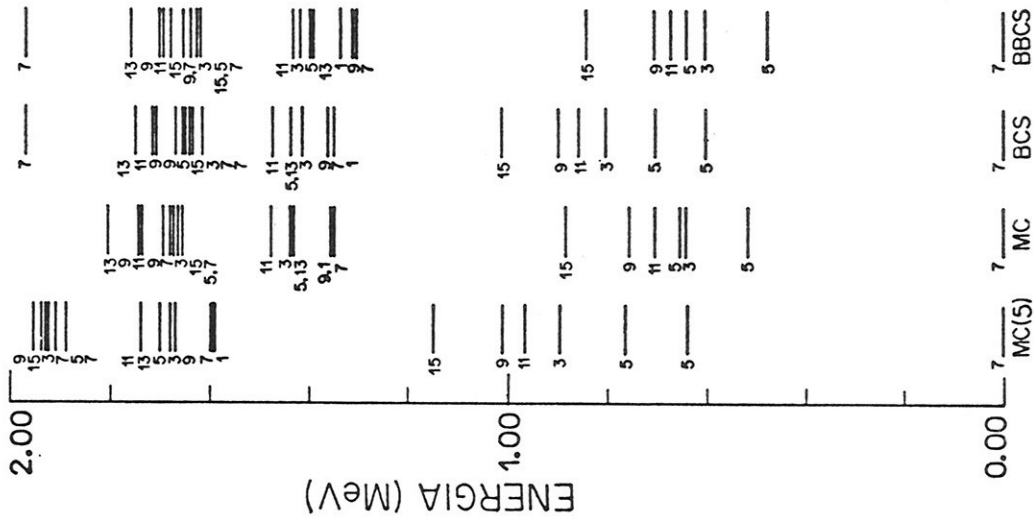
3.a. Espectros

Na figura IV.2, são apresentados os espectros de energia calculados com MC e com MC3. O espectro MC3 até 1.40 MeV de energia de excitação, em relação ao obtido com MC, é bastante satisfatório, apresentando o mesmo número de estados, praticamente a mesma ordenação de níveis, com apenas uma inversão, e as diferenças de energia são todas menores que 120keV. Entre 1.40 e 1.60 MeV, embora as diferenças entre as energias de excitação sejam pequenas, a ordenação dos níveis é diferente, e a densidade é um pouco menor com MC3. Acima de 1.60 MeV, a influência das componentes de $\nu=5$ é grande, e a densidade de níveis é apreciavelmente menor com a base truncada.

Na tabela IV.3, são apresentadas as distribuições em desemparelhamento para os estados presentes até 1.60 MeV. Somente os dois primeiros estados (i.é, o $7/2_1^+$ e o $5/2_1^+$) apresentam $\langle \nu \rangle \sim 1.0$, todos os demais têm $\langle \nu \rangle \approx 3$. Isto evidencia, mais uma vez, que a inclusão dos estados de 3QP é indispensável na descrição das propriedades dos núcleos ímpares, em baixo espectro. Nos estados presentes até 1.40 MeV de energia de excitação, a fração com $\nu=5$ é $\approx 6\%$ da amplitude total; e, nos demais estados, no intervalo entre 1.40 MeV a 1.60 MeV, a fração com $\nu=5$ é geralmente $> 10\%$, podendo chegar, em alguns casos, a 50% da amplitude total.

Na tabela IV.4, são apresentadas as funções de onda selecionadas segundo o critério exposto na seção 3.b, calculadas com MC e com MC3. Não verificamos, nos estados considerados, nenhuma componente com $\nu=5$ com amplitude $\geq 3\%$.

^{135}I



^{137}Cs

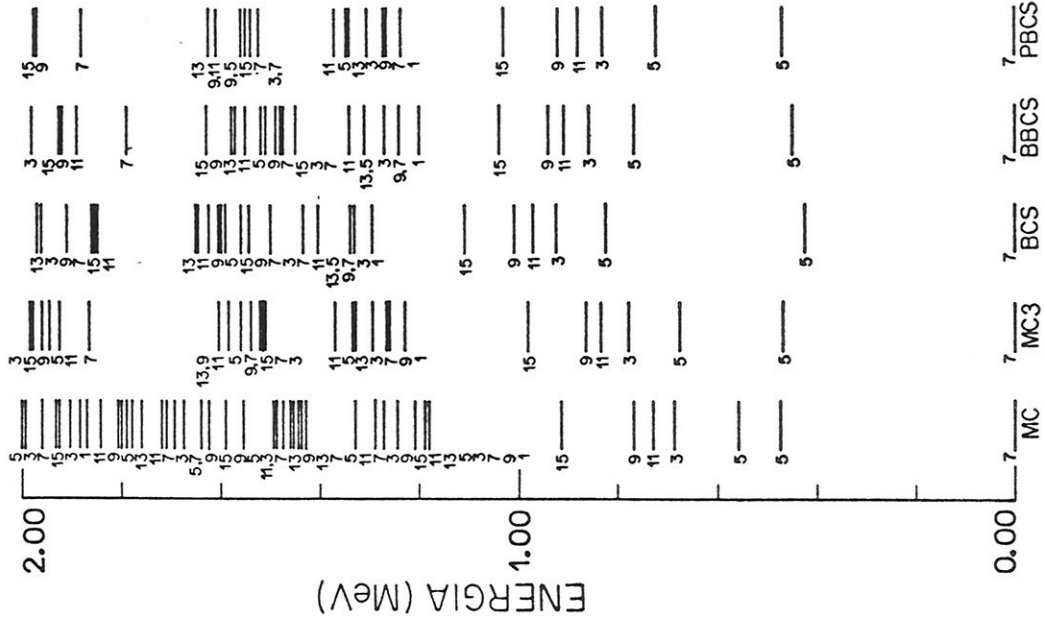


Figura IV.1. Espectros de energia para o ^{135}I . São apresentados os estados de paridade positiva calculados com 4 orbitais de partícula única, com "spins" na forma $2J$. Apresenta-se o cálculo com 5 orbitais $MC(5)$.

Figura IV.2. Espectros de energia para o ^{137}Cs . Veja a legenda da figura IV.1.

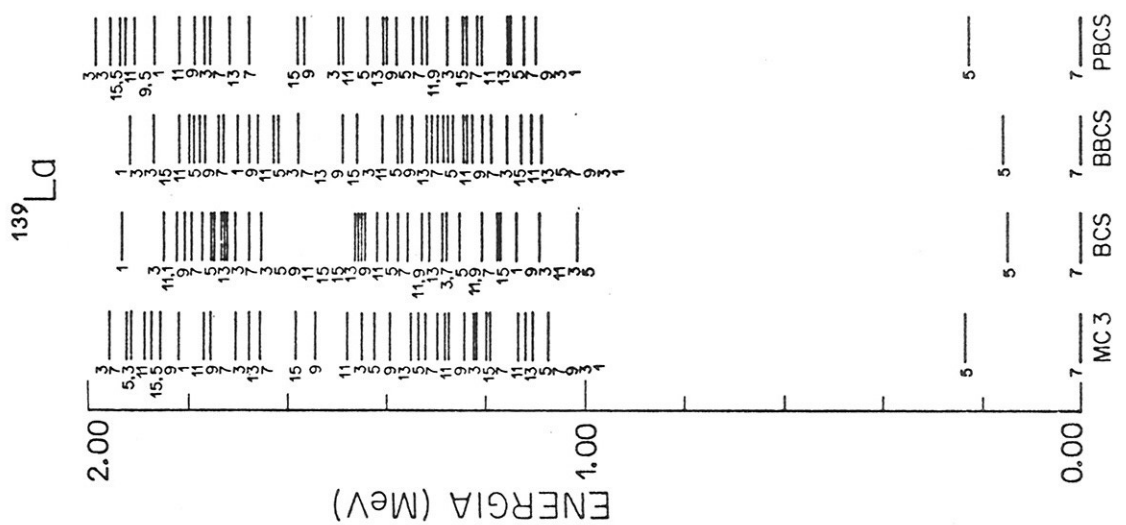
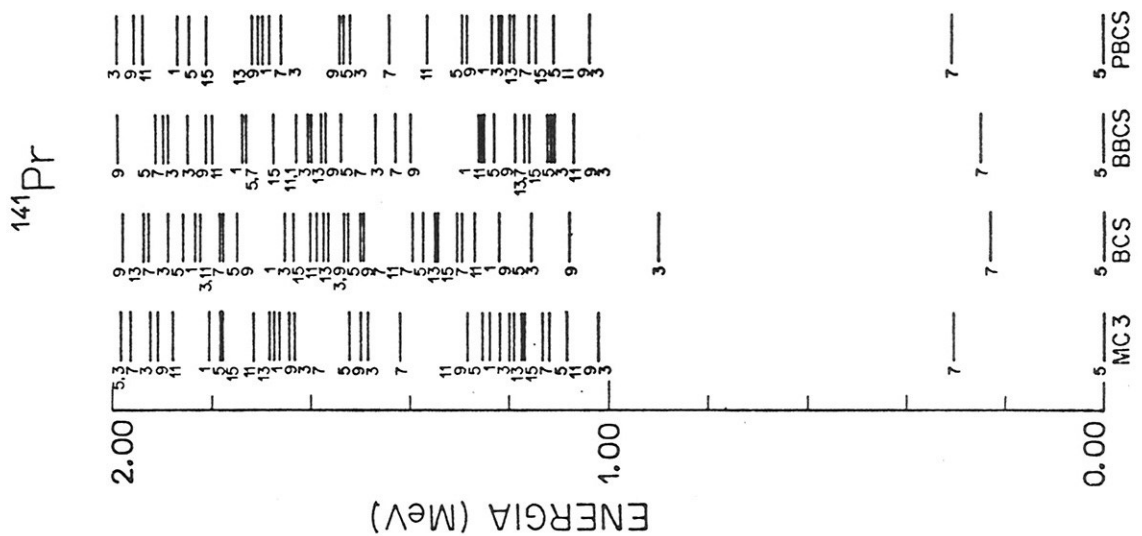
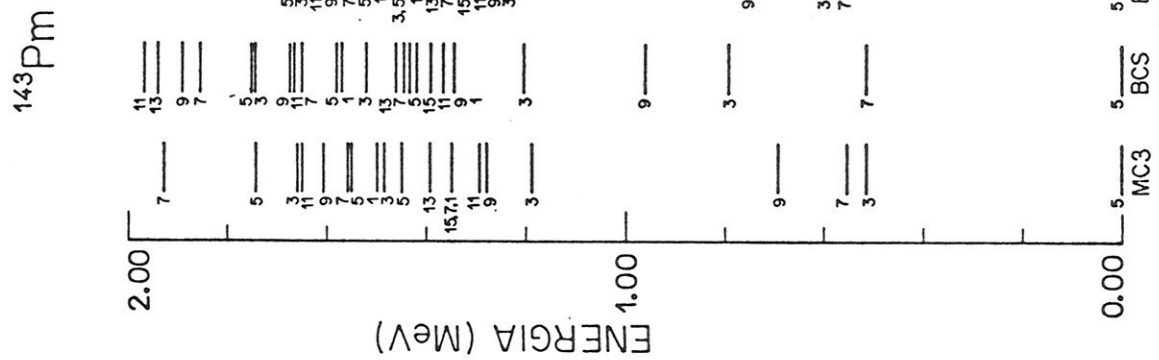


Figura IV.3. Espectros de energia para ¹³⁹La. Veja a legenda da figura IV.1.

Figura IV.4. Espectros de energia para ¹⁴¹Pr. Veja a legenda da figura IV.1.

Figura IV.5. Espectros de energia para ¹⁴³Pr. Veja a legenda da figura IV.1.

Tabela IV.2. Funções de onda selecionadas do ^{135}I . Apresentamos as amplitudes calculadas com quatro orbitais de partícula independente (4SP) e com cinco orbitais (5SP). Para uma descrição mais detalhada, veja a legenda da tabela III.3. O símbolo (i) calculado acima da primeira amplitude da função de onda de um dado "spin" indica que para a particular aproximação empregada a i-ésima solução foi relacionada.

J_i^+	J_a	J_b	J_{ab}	J_c	4SP				5SP		
					BCS	BBCS	PBCS	MC	BBCS	PBCS	MC
$7/2_1$				$7/2$.992	.995	.996	—	.995	.996	—
	$7/2$	$7/2$	0	$7/2$	—	—	—	.932	—	—	.887
	$5/2$	$5/2$	0	$7/2$	—	—	—	.324	—	—	.365
	$11/2$	$11/2$	0	$7/2$	—	—	—	—	—	—	.222
$5/2_{\{i\}}$				$5/2$.940 ⁽¹⁾	.991 ⁽²⁾	.976 ⁽²⁾	—	.949 ⁽¹⁾	.973 ⁽¹⁾	— ⁽¹⁾
	$7/2$	$7/2$	0	$5/2$	—	—	—	.933 ⁽²⁾	—	—	.895
	$5/2$	$5/2$	0	$5/2$	—	—	—	.255	—	—	.216
	$7/2$	$7/2$	4	$7/2$.294	—	—	—	.287	.195	-.195
$5/2_{\{i\}}$				$5/2$	-.318 ⁽²⁾	—	—	—	.309 ⁽²⁾	.216 ⁽²⁾	— ⁽²⁾
	$7/2$	$7/2$	4	$7/2$.913	.951 ⁽¹⁾	.938 ⁽¹⁾	.938 ⁽¹⁾	.906	.930	.929
$3/2_1$	$7/2$	$7/2$	4	$7/2$.967	.967	.967	.967	.961	.960	.960
$11/2_1$	$7/2$	$7/2$	4	$7/2$.952	.958	.958	.958	.953	.953	.953
	$7/2$	$7/2$	6	$5/2$.204	.187	.187	.187	.192	.192	.192
$9/2_1$	$7/2$	$7/2$	4	$7/2$.965	.969	.969	.969	.965	.965	.965
$15/2_1$	$7/2$	$7/2$	4	$7/2$.945	.959	.959	.959	.957	.957	.957
	$7/2$	$7/2$	6	$5/2$	-.319	-.275	-.276	-.276	-.280	-.281	-.281
$1/2_1$	$7/2$	$7/2$	2	$5/2$.914	.932	.923	.923	.924	.912	.912
	$5/2$	$5/2$	4	$7/2$	-.269	-.240	-.244	-.244	-.245	-.250	-.250
	$7/2$	$5/2$	1	$3/2$	—	—	—	—	-.194	-.200	-.200
$13/2_1$	$7/2$	$7/2$	4	$5/2$.907	.899	.902	.902	.898	.899	.899
	$7/2$	$7/2$	6	$5/2$.404	.418	.412	.412	.415	.412	.412
$7/2_2$	$7/2$	$7/2$	2	$5/2$.964	.961	.960	.960	.957	.954	.954
$3/2_2$					—	—	—	—	—	—	—
	$7/2$	$7/2$	2	$5/2$.740	.789	.756	.756	.782	.742	.743
	$7/2$	$7/2$	4	$5/2$.443	.436	.466	.466	.418	.449	.449
	$5/2$	$5/2$	2	$7/2$.296	.244	.260	.260	.248	.266	.266

Tabela IV.3. Distribuição em desemparelhamento v , e desemparelhamento médio $\langle v \rangle$, para os estados do ^{137}Cs calculados com quatro orbitais de partícula independente.

J_i^+	V=1		V=3		V=5	$\langle V \rangle$	
	MC	MC3	MC	MC3	MC	MC	MC3
7/2 ₁	97.75	98.22	2.07	1.78	0.18	1.05	1.04
5/2 ₁	90.48	96.02	9.40	3.98	0.12	1.20	1.08
5/2 ₂	7.17	2.28	89.17	97.72	3.66	2.96	2.95
3/2 ₁	0.00	0.00	95.28	100.00	4.72	3.08	3.00
11/2 ₁	—	—	94.00	100.00	6.00	3.11	3.00
9/2 ₁	—	—	93.98	100.00	6.02	3.11	3.00
15/2 ₁	—	—	96.03	100.00	3.97	3.08	3.00
1/2 ₁	3.07	3.59	93.04	96.41	3.89	3.02	2.93
9/2 ₂	—	—	96.45	100.00	3.55	3.10	3.00
7/2 ₂	0.60	1.20	94.74	98.80	4.66	3.06	2.98
3/2 ₂	3.07	3.86	93.63	96.14	3.30	3.03	2.92
5/2 ₃	1.74	1.50	95.10	98.50	3.16	3.06	2.97
13/2 ₁	—	—	94.99	100.00	5.01	3.10	3.00
11/2 ₂	—	—	97.75	100.00	2.25	3.06	3.00
15/2 ₂	—	—	90.47	100.00	9.53	3.19	3.00
9/2 ₃	—	—	85.14	100.00	14.86	3.33	3.00
3/2 ₃	1.59	1.73	94.19	98.27	5.81	3.11	2.96
7/2 ₃	1.15	4.71	97.70	95.29	8.67	3.19	2.91
11/2 ₃	—	—	80.87	100.00	19.13	3.41	3.00
5/2 ₄	3.17	4.47	86.88	95.53	9.95	3.17	2.91
7/2 ₄	48.20	41.47	48.79	58.53	3.01	2.13	2.16
13/2 ₂	—	—	54.24	100.00	45.76	3.91	3.00
9/2 ₄	—	—	93.68	100.00	6.32	3.16	3.00
13/2 ₃	—	—	33.51	100.00	66.49	4.32	3.00

Tabela IV.4. Funções de onda selecionadas do ^{137}Cs . Foi adotada a seguinte ordem de acoplamento:

$$\{[(g_{7/2})^{n_1} v_{1,J_1}, (d_{5/2})^{n_2} v_{2,J_2}] J_{12}, (d_{3/2})^{n_3} v_{3,J_3}] J_3^{12}, (s_{1/2})^{n_4} v_{4,J_4}\} J, e$$

$v = v_1 + v_2 + v_3 + v_4$. Apenas as contribuições $\geq 4\%$ são apresentadas.

J_i^+	n_1	$g_{7/2}$ v_1	j_1	n_2	$d_{5/2}$ v_2	j_2	j_{12}	n_3	$d_{3/2}$ v_3	j_3	j_3^{12}	n_4	$s_{1/2}$ v_4	j_4	v	MC	MC3
7/2 ₁	5	1	7/2	0	0	0	7/2	0	0	0	7/2	0	0	0	1	74.58	73.69
	3	1	7/2	2	0	0	7/2	0	0	0	7/2	0	0	0	1	19.36	20.54
5/2 ₁	4	0	0	1	1	5/2	5/2	0	0	0	5/2	0	0	0	1	75.68	79.72
	2	0	0	3	1	5/2	5/2	0	0	0	5/2	0	0	0	1	11.62	12.82
	5	3	5/2	0	0	0	5/2	0	0	0	5/2	0	0	0	3	5.65	1.47
5/2 ₂	5	3	5/2	0	0	0	5/2	0	0	0	5/2	0	0	0	3	76.52	80.14
	3	3	5/2	2	0	0	5/2	0	0	0	5/2	0	0	0	3	5.65	9.70
	4	0	0	1	1	5/2	5/2	0	0	0	5/2	0	0	0	1	-5.89	-1.70
3/2 ₁	5	3	3/2	0	0	0	3/2	0	0	0	3/2	0	0	0	3	84.16	83.44
	3	3	3/2	2	0	0	3/2	0	0	0	3/2	0	0	0	3	6.36	9.47
11/2 ₁	5	3	11/2	0	0	0	11/2	0	0	0	11/2	0	0	0	3	82.12	80.64
	3	3	11/2	2	0	0	11/2	0	0	0	11/2	0	0	0	3	6.10	9.32
9/2 ₁	5	3	9/2	0	0	0	9/2	0	0	0	9/2	0	0	0	3	83.51	83.18
	3	3	9/2	2	0	0	9/2	0	0	0	9/2	0	0	0	3	6.02	9.13
15/2 ₁	5	3	15/2	0	0	0	15/2	0	0	0	15/2	0	0	0	3	81.45	79.04
	4	2	6	1	1	5/2	15/2	0	0	0	15/2	0	0	0	3	7.10	10.23
	3	3	15/2	2	0	0	15/2	0	0	0	15/2	0	0	0	3	5.92	8.55
1/2 ₁	4	2	2	1	1	5/2	1/2	0	0	0	1/2	0	0	0	3	77.82	77.10
	3	1	7/2	2	2	4	1/2	0	0	0	1/2	0	0	0	3	-4.80	-6.30
	2	2	2	3	1	5/2	1/2	0	0	0	1/2	0	0	0	3	3.66	5.50
13/2 ₁	4	2	4	1	1	5/2	13/2	0	0	0	13/2	0	0	0	3	80.00	77.52
	4	2	6	1	1	5/2	13/2	0	0	0	13/2	0	0	0	3	-7.37	-12.79
	2	2	4	3	1	5/2	13/2	0	0	0	13/2	0	0	0	3	4.49	5.84
7/2 ₂	4	4	2	1	1	5/2	7/2	0	0	0	7/2	0	0	0	3	84.46	85.43
	2	2	2	3	1	5/2	7/2	0	0	0	7/2	0	0	0	3	5.66	7.20
3/2 ₂	4	2	2	1	1	5/2	3/2	0	0	0	3/2	0	0	0	3	57.35	52.33
	4	2	4	1	1	5/2	3/2	0	0	0	3/2	0	0	0	3	14.38	16.76
	3	1	7/2	2	2	2	3/2	0	0	0	3/2	0	0	0	3	-6.09	-7.80

Tabela IV.5. Funções de onda selecionadas do ^{137}Cs . Veja a legenda da tabela IV.2.

J_i^+	J_a^-	J_b	J_{ab}	J_c	4SP			5SP	
					BCS	BBCS	PBCS	BBCS	PBCS
$7/2_1$				$7/2$.986	.983	.991	.988	.992
$5/2_1$				$5/2$.984	.986	.982	.991	.992
$5/2_2$	$7/2$	$7/2$	4	$7/2$.953	.971	.950	.944	.936
	$5/2$	$5/2$	2	$7/2$.189	.201
$3/2_1$	$7/2$	$7/2$	4	$7/2$.962	.978	.963	.951	.942
								-.163	-.175
$11/2_1$	$7/2$	$7/2$	4	$7/2$.940	.960	.942	.931	.923
	$7/2$	$7/2$	6	$5/2$.231	.195	.230	.249	.260
$9/2_1$	$7/2$	$7/2$	4	$7/2$.955	.971	.957	.947	.941
	$7/2$	$7/2$	4	$5/2$.210	.179	.207	.229	.239
$15/2_1$	$7/2$	$7/2$	4	$7/2$.918	.941	.921	.902	.896
	$7/2$	$7/2$	6	$5/2$	-.390	-.334	-.384	-.425	-.437
$1/2_1$				$1/2$.185	.216
	$7/2$	$7/2$	2	$5/2$	-.891	-.917	-.914	-.895	-.886
	$5/2$	$5/2$	4	$7/2$.307	.260	.261	.277	.282
	$7/2$	$5/2$	1	$3/2$.200	.206
$13/2_1$	$7/2$	$7/2$	4	$5/2$.914	.922	.916	.914	.907
	$7/2$	$7/2$	6	$5/2$.389	.373	.385	.386	.399
$7/2_2$	$7/2$	$7/2$	2	$5/2$.959	.968	.969	.964	.955
$3/2_2$				$3/2$.231	.164	.186	.242	.283
	$7/2$	$7/2$	2	$5/2$.681	.764	.745	.705	.673
	$7/2$	$7/2$	4	$5/2$.420	.418	.439	.419	.436
	$5/2$	$5/2$	2	$7/2$.352	.286	.286	.301	.305
	$5/2$	$5/2$	4	$7/2$.205	.170	.175	.189	.195
	$5/2$	$5/2$	4	$5/2$	-.208				

Tabela IV.6. Funções de onda selecionadas do ^{139}La . Veja a legenda da tabela IV.4.

J_i^+	n_1	v_1	j_1	n_2	v_2	j_2	j_{12}	n_3	v_3	j_3	j_3^{12}	n_4	v_4	j_4	v	MC3
7/2 ₁	7	1	7/2	0	0	0	7/2	0	0	0	7/2	0	0	0	1	59.11
	5	1	7/2	2	0	0	7/2	0	0	0	7/2	0	0	0	1	30.87
5/2 ₁	6	0	0	1	1	5/2	5/2	0	0	0	5/2	0	0	0	1	72.19
	4	0	0	3	1	5/2	5/2	0	0	0	5/2	0	0	0	1	20.33
1/2 ₁	6	2	2	1	1	5/2	1/2	0	0	0	1/2	0	0	0	3	-69.77
	4	2	2	3	1	5/2	1/2	0	0	0	1/2	0	0	0	3	10.33
3/2 ₁	6	2	2	1	1	5/2	3/2	0	0	0	3/2	0	0	0	3	46.26
	5	1	7/2	2	2	2	3/2	0	0	0	3/2	0	0	0	3	12.21
	6	2	4	1	1	5/2	3/2	0	0	0	3/2	0	0	0	3	10.55
	4	2	2	3	1	5/2	3/2	0	0	0	3/2	0	0	0	3	-6.63
	6	0	0	0	0	0	0	1	1	3/2	3/2	0	0	0	1	-5.59
9/2 ₁	6	2	2	1	1	5/2	9/2	0	0	0	9/2	0	0	0	3	81.59
	4	2	2	3	1	5/2	9/2	0	0	0	9/2	0	0	0	3	-10.80
7/2 ₂	6	2	2	1	1	5/2	7/2	0	0	0	7/2	0	0	0	3	-71.73
	4	2	2	3	1	5/2	7/2	0	0	0	7/2	0	0	0	3	11.66
	5	1	7/2	2	0	0	7/2	0	0	0	7/2	0	0	0	1	-5.31
5/2 ₃	5	3	5/2	2	0	0	5/2	0	0	0	5/2	0	0	0	3	56.13
	5	1	7/2	2	2	2	5/2	0	0	0	5/2	0	0	0	3	-15.23
	6	2	2	1	1	5/2	5/2	0	0	0	5/2	0	0	0	3	7.26
	3	3	5/2	4	0	0	5/2	0	0	0	5/2	0	0	0	3	5.01
13/2 ₁	6	2	4	1	1	5/2	13/2	0	0	0	13/2	0	0	0	3	78.19
	4	2	4	1	1	5/2	13/2	0	0	0	13/2	0	0	0	3	-11.16
	6	2	6	1	1	5/2	13/2	0	0	0	13/2	0	0	0	3	-5.94
11/2 ₁	6	2	4	1	1	5/2	11/2	0	0	0	11/2	0	0	0	3	82.06
	4	2	4	3	1	5/2	11/2	0	0	0	11/2	0	0	0	3	-12.65
15/2 ₁	6	2	6	1	1	5/2	15/2	0	0	0	15/2	0	0	0	3	-79.10
	4	2	6	3	1	5/2	15/2	0	0	0	15/2	0	0	0	3	10.50
	5	3	15/2	2	0	0	15/2	0	0	0	15/2	0	0	0	3	6.13
3/2 ₂	6	2	4	1	1	5/2	3/2	0	0	0	3/2	0	0	0	3	38.49
	6	2	2	1	1	5/2	3/2	0	0	0	3/2	0	0	0	3	-26.96
	5	1	7/2	2	2	2	3/2	0	0	0	3/2	0	0	0	3	10.17
	4	2	4	3	1	5/2	3/2	0	0	0	3/2	0	0	0	3	-5.00
	4	0	0	3	3	3/2	3/2	0	0	0	3/2	0	0	0	3	-4.23
5/2 ₂	6	2	2	1	1	5/2	5/2	0	0	0	5/2	0	0	0	3	-54.07
	6	2	4	1	1	5/2	5/2	0	0	0	5/2	0	0	0	3	16.56
	4	2	2	3	1	5/2	5/2	0	0	0	5/2	0	0	0	3	9.59
	5	1	7/2	2	2	2	5/2	0	0	0	5/2	0	0	0	3	-6.17

Tabela IV.7. Funções de onda selecionadas do ^{139}La . Veja a legenda da tabela IV.2.

J_i^+	Ja	Jb	Jab	Jc	4SP			5SP	
					BCS	BBCS	PBCS	BBCS	PBCS
7/2				7/2	.980	.978	.984	.985	.989
5/2				5/2	.985	.987	.987	.990	.992
1/2				1/2	.288	.180	.215	.366	.397
	5/2	5/2	4	7/2	.407	.299	.308	.359	.359
	7/2	7/2	2	5/2	.822	-.908	-.893	-.804	-.786
	7/2	5/2	1	3/2	.200	.162	.184	.210	.221
3/2				3/2	.210 ⁽²⁾	.238	.265	.509	.526
	5/2	5/2	2	7/2	.210	.422	.407	.475	.467
	7/2	7/2	4	7/2	-.463	—	—	-.150	-.160
	7/2	7/2	2	5/2	.519	.713	.677	.451	.430
	7/2	7/2	4	5/2	.212	.349	.404	.349	.357
	5/2	5/2	4	5/2	-.471	—	—	—	—
	5/2	5/2	4	7/2	.264	—	—	—	—
9/2	7/2	7/2	2	5/2	.918 ⁽²⁾	.982	.954	.942	.905
	7/2	7/2	4	5/2	.115	.045	.230	.222	.307
	5/2	5/2	4	5/2	-.278	-.101	-.094	-.137	-.117
7/2	7/2	7/2	0	7/2	-.467	-.137	-.321	-.090	-.584
	5/2	5/2	0	7/2	.528	.137	.053	.090	.172
	7/2	7/2	2	5/2	.643	.944	.927	.960	.725
5/2	7/2	7/2	2	5/2	(2)	.397 ⁽³⁾	.273 ⁽³⁾	-.500 ⁽²⁾	-.461 ⁽²⁾
	7/2	7/2	4	7/2	.923	.618	.768	.564	.602
	5/2	5/2	2	7/2	.294	.350	.451	.487	.473
	7/2	7/2	4	5/2	—	-.426	—	-.125	-.206
	5/2	5/2	0	5/2	—	.223	—	.201	—
13/2	7/2	7/2	4	5/2	.914	.976	.934	.922	.905
	7/2	7/2	6	5/2	.384	.202	.346	.366	.400
11/2	7/2	7/2	4	5/2	.926 ⁽²⁾	.983	.983	.721	.643
	7/2	7/2	6	5/2	—	—	—	.366	.396
	7/2	7/2	4	7/2	—	—	—	.525	.568
	5/2	5/2	2	7/2	—	—	—	-.249	-.251
15/2	7/2	7/2	6	5/2	.598	.955	.950	.908	.902
	7/2	7/2	4	7/2	-.799	-.255	-.275	-.379	-.394
3/2				3/2	.282 ⁽³⁾	.174	—	.282	.236
	5/2	5/2	2	7/2	.386	.399	.344	.228	.213
	7/2	7/2	2	5/2	-.257	-.567	-.583	-.643	-.617
	7/2	7/2	4	5/2	.477	.569	.583	.188	.142
	5/2	5/2	4	5/2	.555	.238	.274	.414	.404
	7/2	7/2	4	7/2	.324	-.211	-.176	-.310	-.391
	5/2	5/2	4	7/2	—	—	—	—	.219
5/2,	5/2	5/2	0	5/2	.468 ⁽³⁾	.267	—	—	—
	7/2	7/2	2	5/2	-.742	-.730	-.821	—	—
	7/2	7/2	4	5/2	.125	.361	.397	—	—
	5/2	5/2	2	7/2	.232	.349	.277	—	—
	7/2	7/2	4	7/2	-.167	.279	—	—	—
	7/2	7/2	0	5/2	-.290	—	—	—	—

Tabela IV.8. Funções de onda selecionadas do ^{14}Pr . Veja a legenda da tabela IV.4.

J_i^+	n_1	v_1	j_1	n_2	v_2	j_2	j_{12}	n_3	v_3	j_3	j_3^{12}	n_4	v_4	j_4	v	MC3
$7/2_1$	7	1	7/2	2	0	0	7/2	0	0	0	7/2	0	0	0	1	69.39
	5	1	7/2	4	0	0	7/2	0	0	0	7/2	0	0	0	1	19.62
$5/2_1$	8	0	0	1	1	5/2	5/2	0	0	0	5/2	0	0	0	1	-62.09
	6	0	0	3	1	5/2	5/2	0	0	0	5/2	0	0	0	1	28.90
$5/2_2$	6	0	0	3	1	5/2	5/2	0	0	0	5/2	0	0	0	3	31.03
	7	1	7/2	2	2	2	5/2	0	0	0	5/2	0	0	0	3	27.23
	8	0	0	1	1	5/2	5/2	0	0	0	5/2	0	0	0	1	16.03
	4	0	0	5	1	5/2	5/2	0	0	0	5/2	0	0	0	1	-9.15
	6	2	2	3	1	5/2	5/2	0	0	0	5/2	0	0	0	3	4.07
$3/2_1$	7	1	7/2	2	2	2	3/2	0	0	0	3/2	0	0	0	3	53.86
	8	0	0	0	0	0	0	1	1	3/2	3/2	0	0	0	1	13.50
	5	1	7/2	4	2	2	3/2	0	0	0	3/2	0	0	0	3	5.67
	6	0	0	2	0	0	0	1	1	3/2	3/2	0	0	0	1	-4.01
$3/2_2$	6	0	0	3	3	3/2	3/2	0	0	0	3/2	0	0	0	3	61.32
	6	2	2	3	1	5/2	3/2	0	0	0	3/2	0	0	0	3	8.66
	7	1	7/2	2	2	4	3/2	0	0	0	3/2	0	0	0	3	6.35
	7	1	7/2	2	2	2	3/2	0	0	0	3/2	0	0	0	3	-5.55
$1/2_1$	7	1	7/2	2	2	4	1/2	0	0	0	1/2	0	0	0	3	49.77
	6	2	2	3	1	5/2	1/2	0	0	0	1/2	0	0	0	3	16.76
	8	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1/2	1	-11.36
	5	1	7/2	4	2	4	1/2	0	0	0	1/2	0	0	0	3	-6.66
	6	0	0	2	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1/2	1	4.37
$9/2_1$	7	1	7/2	2	2	2	9/2	0	0	0	9/2	0	0	0	3	79.80
	5	1	7/2	4	2	2	9/2	0	0	0	9/2	0	0	0	3	9.64
$11/2_1$	7	1	7/2	2	2	2	11/2	0	0	0	11/2	0	0	0	3	84.53
	5	1	7/2	4	2	2	11/2	0	0	0	11/2	0	0	0	3	8.16
$7/2_2$	7	1	7/2	2	2	2	7/2	0	0	0	7/2	0	0	0	3	58.69
	7	1	7/2	2	2	4	7/2	0	0	0	7/2	0	0	0	3	-19.39
	5	1	7/2	4	2	2	7/2	0	0	0	7/2	0	0	0	3	7.50
$15/2_1$	7	1	7/2	2	2	4	15/2	0	0	0	15/2	0	0	0	3	86.46
	5	1	7/2	4	2	4	15/2	0	0	0	15/2	0	0	0	3	-10.20
$13/2_1$	7	1	7/2	2	2	4	13/2	0	0	0	13/2	0	0	0	3	84.64
	5	1	7/2	4	2	4	13/2	0	0	0	13/2	0	0	0	3	9.12

Tabela IV.9. Funções de onda selecionadas do ^{141}Pr . Veja a legenda da tabela IV.2.

J_i^+	J_a	J_b	J_{ab}	J_c	4SP			5SP	
					BCS	BBCS	PBCS	BBCS	PBCS
$7/2_1$				$7/2$.979	.981	.980	.986	.990
$5/2_1$				$5/2$.985	.983	.988	.988	.991
$5/2_2$	$7/2$	$7/2$	0	$5/2$.596	.419	.796	.257	.719
	$5/2$	$5/2$	0	$5/2$	-.615	-.464	-.132	-.314	-.297
	$5/2$	$5/2$	2	$7/2$	-.314	-.685	-.467	-.723	-.404
	$7/2$	$7/2$	2	$5/2$.240	.243	.203	.354	.267
	$7/2$	$7/2$	4	$7/2$	—	—	—	-.250	-.138
$3/2_1$				$3/2$.535 ⁽²⁾	.332	.442	.839	.800
	$5/2$	$5/2$	2	$7/2$.677	.744	.759	.370	.413
	$7/2$	$7/2$	2	$5/2$.176	.278	.209	—	—
	$7/2$	$7/2$	4	$5/2$.271	.170	.205	—	—
	$5/2$	$5/2$	4	$5/2$	—	.353	—	—	—
$3/2_1$	$5/2$	$5/2$	4	$5/2$.915 ⁽¹⁾	.797	.802	.820	.803
	$7/2$	$7/2$	2	$5/2$	-.250	-.246	-.309	-.359	-.344
	$5/2$	$5/2$	4	$7/2$	-.122	-.126	-.272	-.185	-.219
	$5/2$	$5/2$	2	$7/2$	-.035	.408	.255	—	—
	$5/2$	$5/2$	2	$1/2$.203	.173	.194	—	—
$1/2_1$				$1/2$.480	.357	.407	.910	.873
	$5/2$	$5/2$	4	$7/2$.586	.765	.749	.245	.305
	$7/2$	$7/2$	2	$5/2$	-.587	-.480	-.444	-.253	-.287
	$7/2$	$5/2$	1	$7/2$.211	—	—	—	—
$9/2_1$	$5/2$	$5/2$	2	$7/2$.945 ⁽²⁾	.969	.955	.917	.913
	$5/2$	$5/2$	4	$7/2$.119	.002	.130	.183	.207
$11/2_1$	$5/2$	$5/2$	2	$7/2$.933	.987	.952	.944	.929
	$5/2$	$5/2$	4	$7/2$.269	.019	.255	.235	.283
	$7/2$	$7/2$	4	$7/2$	-.165	-.082	-.082	-.128	-.118
$7/2_2$	$5/2$	$5/2$	2	$7/2$.813	.806	.840	.835	.853
	$5/2$	$5/2$	4	$7/2$	-.391	-.505	-.437	-.357	-.331
	$7/2$	$7/2$	4	$5/2$	-.237	-.174	-.178	-.209	-.193
	$7/2$	$7/2$	0	$7/2$	—	—	—	-.125	-.138
$15/2_1$	$5/2$	$5/2$	4	$7/2$.989	.996	.996	.991	.993
$13/2_1$	$5/2$	$5/2$	4	$7/2$.963	.983	.981	.966	.970
	$7/2$	$7/2$	6	$5/2$	-.246	-.157	-.162	-.225	-.204

Tabela IV.10. Funções de onda selecionadas do $^{14}3\text{Pm}$. Veja a legenda da tabela IV.4.

J_1^+	n_1	v_1	j_1	n_2	v_2	j_2	j_{12}	n_3	v_3	j_3	j_3^{12}	n_4	v_4	j_4	v	MC3
$7/2_1$	7	1	7/2	4	0	0	7/2	0	0	0	7/2	0	0	0	1	78.28
	5	1	7/2	6	0	0	7/2	0	0	0	7/2	0	0	0	1	-9.71
$5/2_1$	8	0	0	3	1	5/2	5/2	0	0	0	5/2	0	0	0	1	76.68
	6	0	0	5	1	5/2	5/2	0	0	0	5/2	0	0	0	1	15.04
$5/2_2$	7	1	7/2	4	2	2	5/2	0	0	0	5/2	0	0	0	3	-60.90
	6	0	0	5	1	5/2	5/2	0	0	0	5/2	0	0	0	1	15.58
	6	2	2	5	1	5/2	5/2	0	0	0	5/2	0	0	0	3	4.85
$3/2_1$	8	0	0	3	3	3/2	3/2	0	0	0	3/2	0	0	0	3	87.94
	8	0	0	2	2	2	2	0	0	0	2	1	1	1/2	3	-3.60
$3/2_2$	8	0	0	2	0	0	0	1	1	3/2	3/2	0	0	0	1	41.73
	7	1	7/2	4	2	2	3/2	0	0	0	3/2	0	0	0	3	27.15
	6	0	0	4	0	0	0	1	1	3/2	3/2	0	0	0	1	-11.87
$1/2_1$	8	0	0	2	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1/2	1	46.96
	7	1	7/2	4	2	4	1/2	0	0	0	1/2	0	0	0	3	22.11
	6	0	0	4	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1/2	1	-15.74
	6	2	2	5	1	5/2	1/2	0	0	0	1/2	0	0	0	3	4.21
$9/2_2$	7	1	7/2	4	2	2	9/2	0	0	0	9/2	0	0	0	3	86.79
	7	1	7/2	4	2	4	9/2	0	0	0	9/2	0	0	0	3	-3.64
$11/2_1$	7	1	7/2	4	2	2	11/2	0	0	0	11/2	0	0	0	3	77.94
	7	1	7/2	4	2	4	11/2	0	0	0	11/2	0	0	0	3	-13.23
$7/2_2$	7	1	7/2	4	2	2	7/2	0	0	0	7/2	0	0	0	3	72.59
	7	1	7/2	4	2	4	7/2	0	0	0	7/2	0	0	0	3	13.20
$15/2_1$	7	1	7/2	4	2	4	15/2	0	0	0	15/2	0	0	0	3	95.92
$13/2_1$	7	1	7/2	4	2	4	13/2	0	0	0	13/2	0	0	0	3	93.67
$9/2_1$	7	1	7/2	4	2	2	9/2	0	0	0	9/2	0	0	0	3	86.79
	7	1	7/2	4	2	4	9/2	0	0	0	9/2	0	0	0	3	-3.64

Tabela IV.11. Funções de onda selecionadas do ^{143}Pm . Veja a legenda da tabela IV.2.

J_i^+	Ja	Jb	Jab	Jc	4SP			5SP	
					BCS	BBCS	PBCS	BBCS	PBCS
$7/2_1$				$7/2$.980	.981	.979	.987	.989
$5/2_1$				$5/2$.987	.986	.991	.986	.993
$5/2_2$	$7/2$	$7/2$	0	$5/2$	-.604	-.573	-.380	-.424	-.475
	$5/2$	$5/2$	0	$5/2$.470	.381	.083	.475	.337
	$5/2$	$5/2$	2	$7/2$.475	.626	.816	.521	.549
	$5/2$	$5/2$	4	$7/2$.174	.168	.128	.197	.206
	$7/2$	$7/2$	2	$5/2$	-.240	-.182	-.208	-.233	-.232
	$7/2$	$5/2$	4	$3/2$.144	.124	.155	.234	.248
$3/2_{(1)}$				$3/2$.824 ⁽²⁾	.804 ⁽²⁾	.759 ⁽²⁾	.963 ⁽¹⁾	.950 ⁽¹⁾
	$5/2$	$5/2$	2	$7/2$.447	.490	.526	—	—
$3/2_{(2)}$	$5/2$	$5/2$	4	$5/2$.947 ⁽¹⁾	.953 ⁽¹⁾	.956 ⁽¹⁾	.952 ⁽²⁾	.924 ⁽²⁾
	$5/2$	$5/2$	2	$1/2$.190	.197	.182	.187	.227
	$7/2$	$7/2$	2	$5/2$	-.169	-.145	-.140	-.138	-.164
$1/2_1$				$1/2$.915	.899	.851	.979	.972
	$5/2$	$5/2$	4	$7/2$.293	.366	.424	—	—
	$7/2$	$7/2$	2	$5/2$	-.200	-.156	-.212	—	—
$11/2_1$	$5/2$	$5/2$	2	$7/2$.920	.902	.907	.900	.904
	$5/2$	$5/2$	4	$7/2$.338	.382	.362	.346	.311
$7/2_2$	$5/2$	$5/2$	2	$7/2$.855	.886	.878	.865	.847
	$5/2$	$5/2$	4	$7/2$	-.396	-.360	-.357	-.318	-.340
$15/2_1$	$5/2$	$5/2$	4	$7/2$.995	.997	.997	.996	.995
$13/2_1$	$5/2$	$5/2$	4	$7/2$.981	.988	.986	.982	.979
$9/2_{(1)}$	$5/2$	$5/2$	2	$7/2$.957 ⁽²⁾	.959 ⁽²⁾	.954 ⁽²⁾	.938 ⁽¹⁾	.930 ⁽¹⁾
$9/2_1$	$5/2$	$5/2$	4	$5/2$.951	.953	.963	—	—
	$5/2$	$5/2$	4	$7/2$	-.203	-.210	-.168	—	—

3.b. Momentos e Transições

Levando em consideração a discussão desenvolvidas na seção 3.c do capítulo anterior, iremos nos restringir à análise das propriedades das soluções com $\langle v \rangle \sim 1$, i.é, os estados $7/2_1^+$ e $5/2_1^+$, e da primeira solução com $\langle v \rangle \sim 3$ de cada spin, i.é, os estados $1/2^+$, $3/2^+$, $5/2_2^+$, $7/2_2^+$, $9/2_1^+$, $11/2_1^+$, $13/2_1^+$ e $15/2_1^+$. Como no ^{143}Pm o estado $3/2_1^+$ possui $\langle v \rangle \sim 1$, incluiremos, também, em nossa análise o $3/2^+$.

Nas figuras IV.6_{a-k} e IV.8_{a,b}, apresentamos, respectivamente, os momentos magnéticos e as taxas BM1, calculados com MC e com MC3. O acordo entre os valores calculados para os momentos magnéticos é excelente. Os valores absolutos das taxas BM1 são, na maioria dos casos, muito pequenos ($<10^{-3}$ w.u), devido à proibição por Δl , impossibilitando uma análise mais conclusiva; contudo, nos dois casos apresentados, o acordo é excelente.

Nas figuras IV.7_{a-j} e IV.9_{a-j}, apresentamos, respectivamente, os momentos elétricos e as taxas BE2, calculados com MC e com MC3. O efeito das componentes de $v=5$ é aumentar em módulo, de 10% a 20%, o valor calculado com MC3. Os resultados para as taxas BE2 que têm como estado final um estado com $\langle v \rangle \sim 1$ (i.é, o $7/2_1^+$ ou $5/2_1^+$) apresentam um acordo muito bom, as diferenças se limitam a $\pm 20\%$ do valor calculado com MC, exceção feita à transição BE2($5/2_1^+ \rightarrow 7/2_1^+$) cujo valor é 50% menor com MC3. Em dois dos três casos que envolvem só estados com $\langle v \rangle \sim 3$, o valor calculado com MC3 é 50% menor do que com MC.

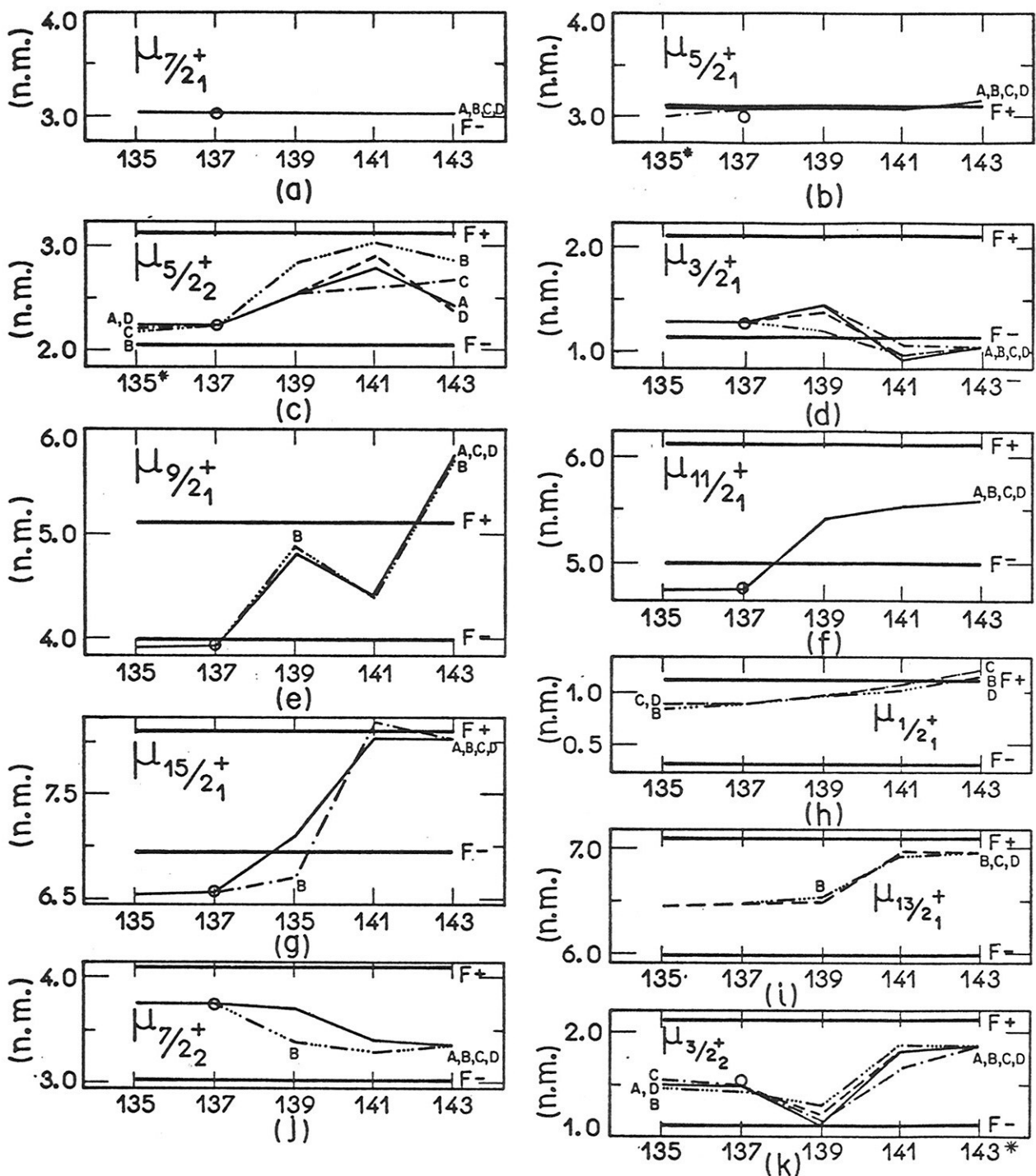


Figura IV.6 a-k. Momentos dipolares magnéticos μ em função da massa atômica para os isótonos com $N=82$. Apresentamos resultados teóricos calculados com MC[O], MC3[(A)——], BCS[(B)-----], BBCS[(C)---], PBCS[(D)----]; e as estimativas de partícula única para $j=l+1/2$ [(F⁺)——], e para $j=l-1/2$ [(F⁻)——]. O símbolo * significa o intercâmbio entre os estados $5/2_1^+$ e $5/2_2^+$ para o ^{135}I , ou entre os estados $3/2_1^+$ e $3/2_2^+$ para o ^{143}Pm .

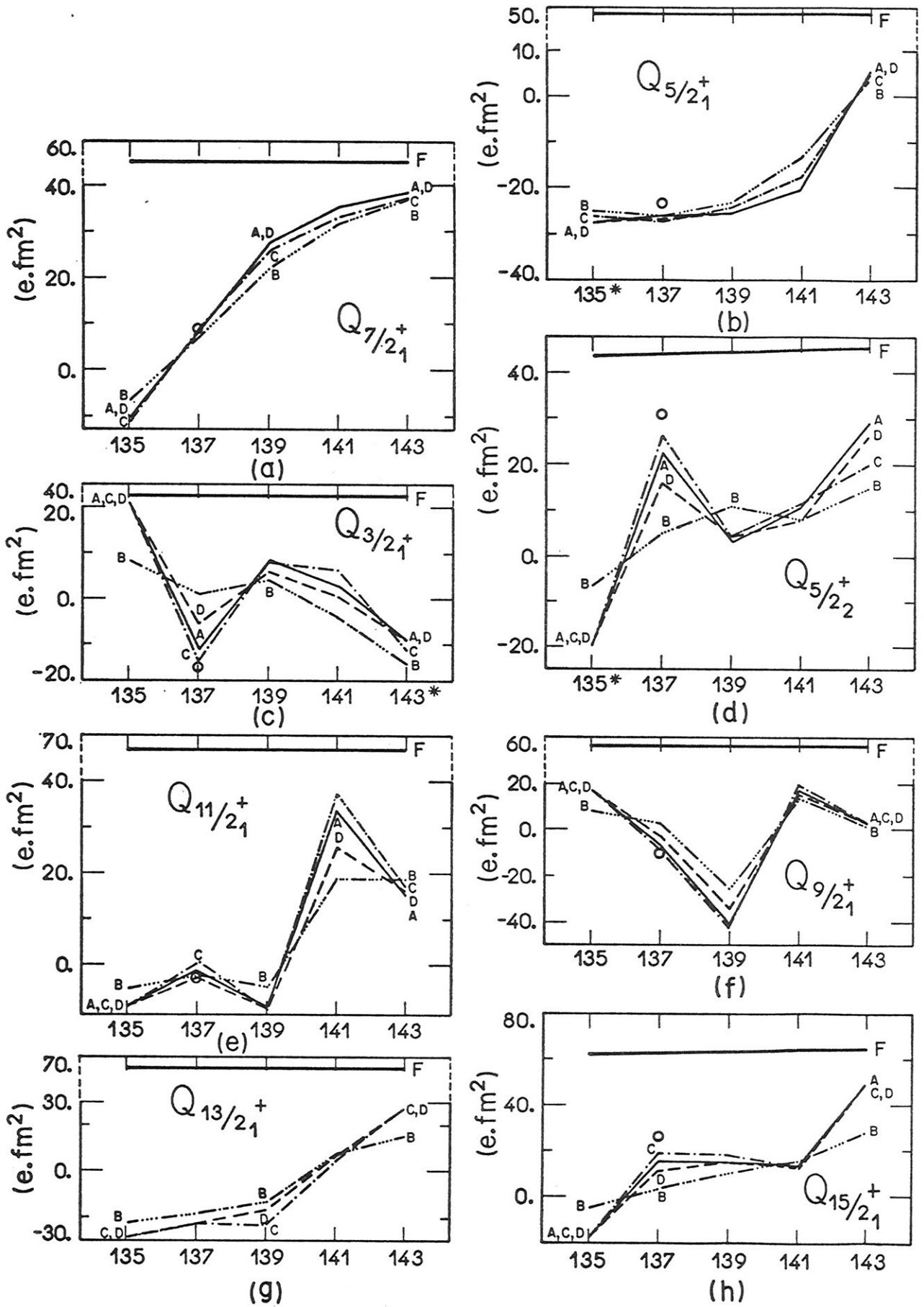


Figura IV.7_{a-k}. Momentos quadrupolares elétricos Q em função da massa atômica, para os isôtonos com $N=82$. Veja a legenda da figura IV.6.

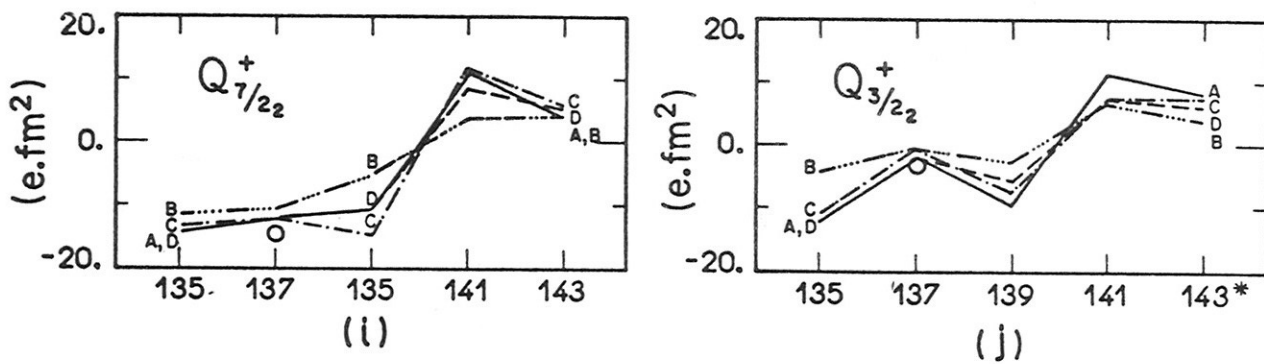


Figura IV.7. $i-j$. Veja a legenda na página anterior.

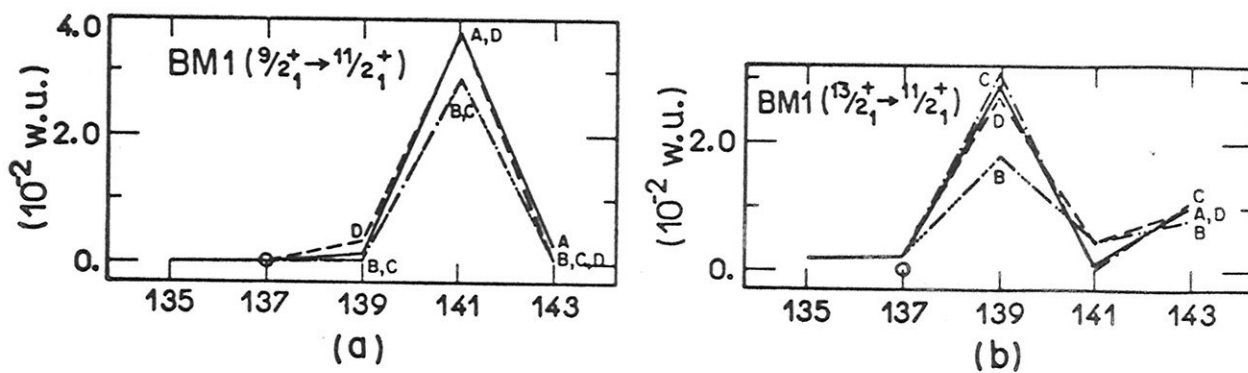


Figura IV.8. $a-b$. Probabilidades de transição BM1 em função da massa atômica para os isótonos $N=82$. Veja a legenda da figura IV.6.

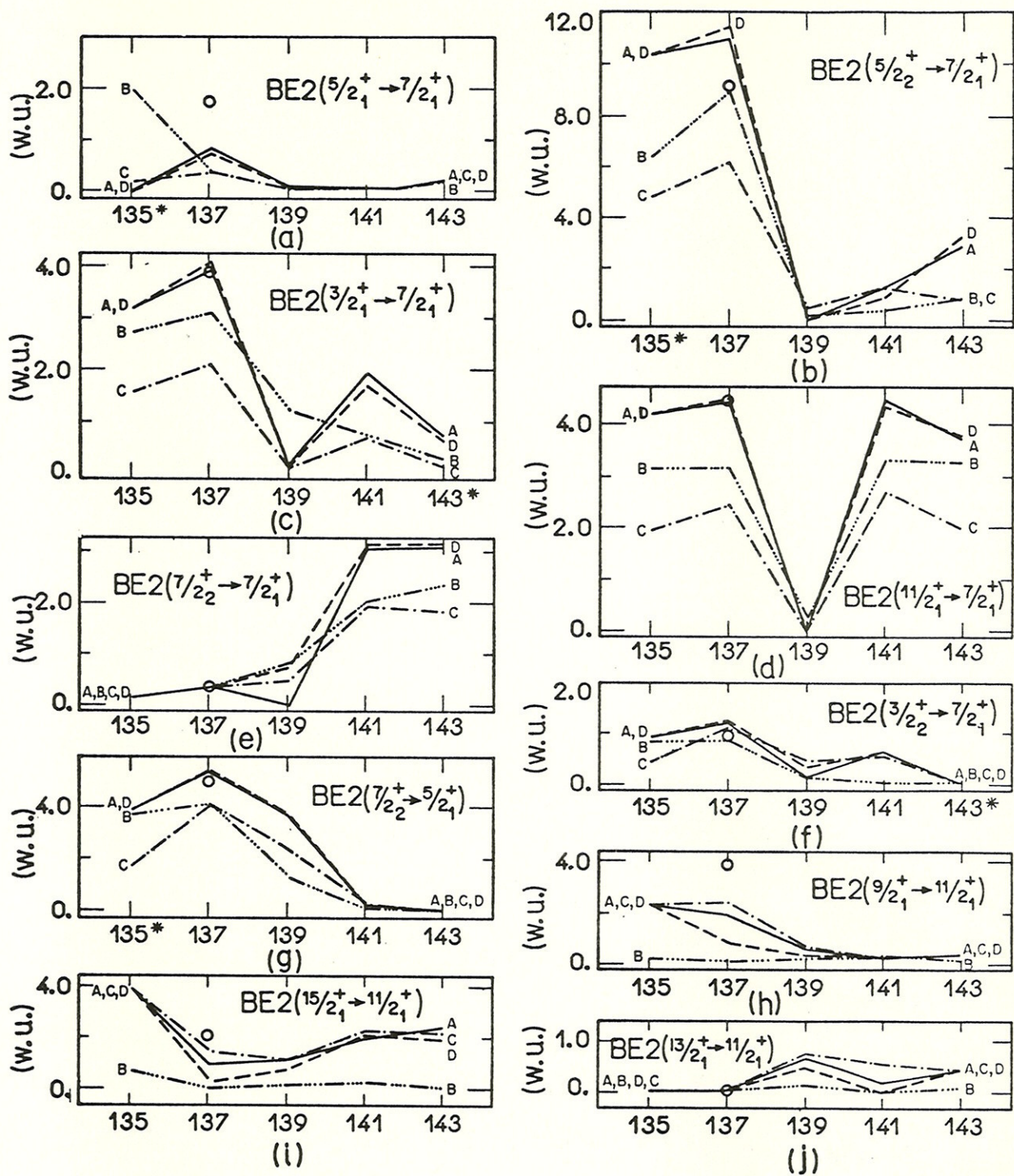


Figura IV.9 a-j. Probabilidades de transição BE2 em função da massa atômica para os isôtonos com N=82. Veja a legenda da figura IV.6.



3.c. Discussão

As características acerca da sensibilidade das propriedades eletromagnéticas ao corte em desemparelhamento, são semelhantes às verificadas nos isótopos de Níquel, discutidas na seção 3.c do capítulo III. A acrescentar, observamos que para as taxas de transição BE2 entre dois estados com $\nu=5$, os resultados, com MC e com MC3, podem diferir até por um fator 2.

Em resumo, para o ^{137}Cs , considerando as soluções com $\langle \nu \rangle \cong 1$ e a primeira solução com $\langle \nu \rangle \cong 3$ de cada *spin*, o efeito das componentes com $\nu=5$ é mais significativo nas propriedades elétricas estudadas (Q e BE2). O acordo entre os resultados obtidos com MC3 e com MC é excelente para os momentos magnéticos, bom para os momentos elétricos e para as taxas BE2 que têm como estado final um estado com $\langle \nu \rangle \cong 1$, e apenas razoável para as taxas BE2 entre dois estados com $\langle \nu \rangle \cong 3$.

Esses resultados podem ser estendidos até a segunda solução com $\nu \cong 3$ de cada *spin* que ocorre em baixo espectro (~ 1.50 MeV), uma vez que, até para a segunda solução com $\nu \cong 3$, a fração de $\nu=5$ é $\cong 10\%$. Isto indica claramente que em relação ao número de soluções por *spin*, o corte em desemparelhamento deve ser ainda mais apropriado para os isótonos com $N=82$, do que para os isótopos do Níquel.

A seguir, apresentamos uma breve discussão qualitativa das características gerais, devidas ao corte em desemparelhamento, verificadas para os isótopos do Níquel e para os isótonos com $N=82$.

Como a interação residual empregada (SDI) é atrativa para todos os estados e atua entre estados com diferentes desemparelhamentos, devemos esperar que o corte em desemparelhamento cause um acréscimo nas energias dos estados presentes em baixo espectro. Os espectros calculados revelam, claramente, essa característica.

Podemos entender a maior influência do corte em desemparelhamento nas propriedades elétricas estudadas através do elemento de matriz do operador transição T_λ , no esquema de desemparelhamento. O cálculo do elemento de matriz de muitos corpos em várias órbitas reduz-se ao cálculo de elementos entre estados de muitos corpos em uma única órbita⁴¹⁾. Nos núcleos analisados, as componentes mais relevantes da função de onda dos estados menos energéticos envolvem os dois primeiros estados de partícula única da respectiva camada ($p_{3/2}$ e $f_{5/2}$ para os isótopos do Ni, e $g_{7/2}$ e $d_{5/2}$ para os isótonos com $N=82$). Devido à proibição por Δl , para as propriedades magnéticas desses estados, somente as contribuições $\langle (j)^n | M_1 | (j)^n \rangle$ são não nulas. Assim, uma boa referência são os elementos de matriz do operador T_λ na configuração j^n dados na Ref. (42). Se o operador T_λ é de grau ímpar, ele é diagonal no esquema de desemparelhamento, e seu elemento de matriz é independente do número de partículas; sendo de grau par, ele atua entre estados com mesmo desemparelhamento $\nu'=\nu$, e entre estados com $\nu'=\nu-2$.

As propriedades magnéticas examinadas ($\mu, BM1$) são de grau ímpar. Enquanto que para as propriedades elétricas estudadas ($Q, BE2$) os operadores são de grau par, e não há proibição por Δl para as transições entre os estados de partícula única citados. Logo, o corte em desemparelhamento

deve afetar mais os valores calculados para os momentos elétricos e para as taxas BE2, do que para os momentos magnéticos e para as taxas BM1.

4. INFLUÊNCIA DOS ESTADOS COM $\nu=1$ e $\nu=3$ AUSENTES NA BASE DE BCS

O emprego de base de BCS nessa camada leva à uma grande redução no número de graus de liberdade, como pode ser verificado na tabela IV.1. A fim de investigar a influência dos estados ausentes na base de BCS, focalizaremos nossa atenção na comparação entre os resultados obtidos com MC3 e PBCS, considerando 4 orbitais de partícula única, para os isótonos com $n \leq 11$ prótons de valência, dentro dos limites estabelecidos na seção IV.3.

4.a. Espectros

Nas figuras IV.1 a IV.5 são apresentados os espectros calculados com MC3 e PBCS. Os espectros obtidos com PBCS, até 2.0 MeV de energia de excitação são bastante satisfatórios, apresentando o mesmo número de estados, praticamente, a mesma ordenação dos níveis e diferenças para as energias de excitação muito pequenas, em todos os casos ≥ 50 keV.

Nas tabelas IV.2, 4, 6, 8, 10 e IV.2, 5, 7, 9 e 11, são apresentadas as funções de onda selecionadas, calculadas com MC3 e PBCS, respectivamente.

4.b. Momentos e Transições

Nas figuras IV.6, 7, 8 e 9, são apresentadas as propriedades eletromagnéticas calculadas com MC3 e com PBCS. O acordo entre os valores calculados para as propriedades magnéticas e para os momentos elétricos dos estados com $\langle \nu \rangle \cong 1$ (isto é, $7/2_1^+, 5/2_1^+$) é excelente. Um bom acordo é obtido para os momentos elétricos dos estados com $\langle \nu \rangle \cong 3$ (isto é, $5/2_2^+, 3/2_1^+, 11/2_1^+, 5/2_1^+, 15/2_1^+, 13/2_1^+, 7/2_2^+$ e $3/2_2^+$), e para as taxas BE2 que têm como estado final um estado com $\langle \nu \rangle \cong 1$. Os valores calculados para as taxas BE2, que envolvem dois estados com $\langle \nu \rangle \cong 3$, são apenas razoáveis, indicando diferenças da ordem de 50% do valor calculado com MC3.

4.c. Discussão

Dentro dos limites estabelecidos na seção IV.3.b., em relação aos resultados obtidos com MC, os resultados com PBCS são satisfatórios para as propriedades magnéticas, para os momentos elétricos e para as taxas BE2 que têm como estado final um estado com $\langle \nu \rangle \cong 1$. Os resultados para as taxas BE2 entre dois estados com $\langle \nu \rangle \cong 3$ são insatisfatórios, divergindo do valor calculado com MC até por um fator 4.

Portanto, tendo em vista o estabelecido na seção 3.c e o acima exposto, verificamos que é muito pequena a influência dos estados ausentes na base de BCS (i.é, os estados de 5QP com $\nu=1$ e $\nu=3$) nas propriedades dos estados presentes em baixo espectro (até ~ 1.40 MeV) dos isótonos com

$N=82$ examinados. A ausência das componentes com $\nu=5$ é que determina as diferenças mais relevantes.

5. INFLUÊNCIA DAS CORREÇÕES INTRODUZIDAS EM BCS

A discussão que se segue tem por objetivo verificar a influência das correções introduzidas com BBCS e PBCS. Tomaremos como referência os resultados obtidos com MC3, com quatro orbitais de partícula única, dentro dos limites estabelecidos na seção IV.3.

5.a. Espectros

Nas figuras IV.1, 2, 3, 4 e 5, apresentamos os espectros de energia, calculados com MC3, BCS, BBCS e PBCS. Os resultados com BCS não são satisfatórios: os espectros apresentam várias inversões na ordenação dos níveis e algumas diferenças na energia de excitação acentuadas (~ 300 keV). A ordenação dos níveis é importante, principalmente nas regiões de alta densidade. Veja, por exemplo, o espectro do ^{139}La , onde com BCS é difícil identificar qual solução de um dado *spin* corresponde ao estado calculado com outra aproximação. Os espectros com BBCS e PBCS são bastante semelhantes e, embora com PBCS tenhamos um acordo com MC3 um pouco melhor, ambos tratamentos apresentam resultados satisfatórios.

Nas tabelas IV.2, 5, 7, 9 e 11 apresentamos as funções de onda selecionadas, calculadas com BCS, BBCS e PBCS. As funções de onda para os estados com $\nu \approx 1$ (isto é, $7/2_1^+$ e

$5/2_1^+$) calculadas com as três aproximações são semelhantes, exceto com BCS para o estado $5/2_1^+$ no ^{135}I . Nos demais estados, as diferenças mais significativas, entre BCS e BBCS, ocorrem nas componentes com $\nu=3$. Dentre elas, destacamos as seguintes:

- (i) no ^{139}La , para a amplitude da componente $[(7/2)^2 2, 5/2]$ nos estados: $1/2_1^+$, $3/2_1^+$, $9/2_1^+$ e $7/2_2^+$ que apresentam as respectivas diferenças: 15%, 19%, 12% e 45%; para a amplitude da componente $[(7/2)^2 4, 5/2]$ nos estados $5/2_2^+$, $13/2_1^+$ e $11/2_1^+$, as respectivas diferenças: 11%, 12% e 11% e, para a amplitude da componente $[(7/2)^2 6, 5/2]$ do estado $15/2_1^+$, com diferença de 55%;
- (ii) no ^{141}Pr , para a amplitude da componente $[(5/2)^2 2, 7/2]$ nos estados $3/2_1^+$, $11/2_1^+$, $3/2_2^+$ e $5/2_2^+$, que apresentam as respectivas diferenças: 10%, 10%, 17% e 37%, e para a amplitude da componente $[(5/2)^2 4, 7/2]$ nos estados $7/2_1^+$ e $1/2_1^+$ as respectivas diferenças: 10% e 24%;
- (iii) nos demais isótopos as diferenças são geralmente menores, as mais relevantes são: no ^{137}Cs , componente $[(7/2)^2 2, 5/2]$ no estado $3/2_2^+$, com diferença de 10%; no ^{143}Pm , componente $[(5/2)^2 2, 7/2]$ no estado $5/2_2^+$, com diferença de 17%.

Notamos, também, entre BCS e BBCS, algumas diferenças nas amplitudes das componentes com $\nu=1$; dentre elas

destacamos as seguintes:

- (i) no ^{137}Cs , nas componentes $[(7/2^2)0,7/2]$ e $[(5/2^2)0,7/2]$ do estado $7/2_2^+$, as respectivas diferenças: 20% e 26%;
- (ii) no ^{141}Pr , nas componentes $[(7/2)^2 0,5/2]$ e $[(5/2)^2 0,5/2]$ do estado $5/2_2^+$, as respectivas diferenças: 18% e 16%.

5.b. Momentos e Transições

Nas figuras IV.6 e IV.8, apresentamos, respectivamente, os momentos magnéticos e as taxas BM1 calculadas com MC3, BCS, BBCS e PBCS. O acordo entre os resultados obtidos com as três aproximações, em relação a MC3, é muito bom. A única exceção é para a taxa BM1 ($13/2_1^+ \rightarrow 11/2_1^+$), cujo cálculo com BCS apresenta acordo apenas razoável.

Nas figuras IV.7, apresentamos os momentos elétricos calculados com as aproximações citadas. Com BCS temos um bom acordo com os valores calculados com MC3, apenas para os momentos dos estados com $\nu \approx 1$ (isto é, o $7/2_1^+$ e o $5/2_1^+$); para os demais estados os resultados com BCS são insatisfatórios. Os resultados com BBCS e PBCS apresentam um acordo muito bom com MC3 em todos os casos.

Nas figuras IV.9, apresentamos as taxas BE2 calculadas com as aproximações citadas. Com BCS, o acordo com MC3, para a transição que envolve dois estados com $\nu \approx 1$, é bom; para as transições com estado final com $\nu \approx 1$, é razoável,

e nos casos onde temos dois estados com $\nu=3$, é ruim. A aproximação BBCS apresenta resultados semelhantes aos de BCS para as transições que envolvem pelo menos um estado com $\nu=1$. Todavia, os resultados com BBCS podem ser menos satisfatórios na estimativa de quantidades que apresentam oscilações abruptas, como função do número de partículas; especificamente para as transições: $5/2_1^+ \rightarrow 7/2_1^+$, $3/2_1^+ \rightarrow 7/2_1^+$ e $11/2_1^+ \rightarrow 7/2_1^+$. Por fim, nos casos onde os dois estados têm $\nu=3$, o melhor acordo com MC3 é conseguido com BBCS.

5.c. Discussão

Quando o espaço de configurações é grande, somente a análise do efeito de *blocking* sobre os elementos diagonais (levada a efeito pela avaliação da redução no parâmetro Δ) não é suficiente para explicar as diferenças entre as amplitudes calculadas com BCS e BBCS, citadas na seção 5.a. O número de contribuições não diagonais é grande e as causas dessas diferenças nem sempre podem ser localizadas em algumas configurações particulares. Entretanto, o procedimento empregado a seguir possibilita o entendimento das diferenças mais acentuadas.

Qualitativamente, podemos compreender os aspectos específicos das diferenças acima mencionadas através da dependência da redução na energia de excitação devido à quebra de pares, em relação a localização relativa do nível de Fermi⁶²⁾ e pela variação no número de ocupação dos orbitais verificada com *blocking*, em relação a ocupação com BCS. Observando na figura IV.10 a posição relativa do nível de Fermi, vemos que o efeito da redução na energia de excitação

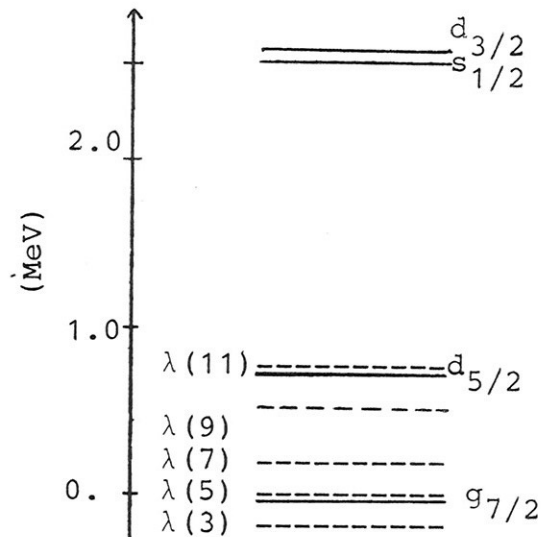


Fig. IV.10. Localização do nível de Fermi $\lambda(n)$ em relação aos estados de partícula única, para os isótonos com $n=3, 5, 7, 9$ e 11 nêutrons de valência.

(veja a seção 5.c do capítulo anterior), deve ser mais intenso nas componentes que envolvem quebra de pares no orbital $g_{7/2}$ dos isótonos ^{137}Cs e ^{139}La , e nas componentes que envolvem quebra de pares no orbital $d_{5/2}$ dos isótonos ^{141}Pr e ^{143}Pm .

Dentre as contribuições mais relevantes, destacam-se as dadas por elementos de matriz do tipo $\langle [(7/2)^2 J_1, 5/2] J | H | [(7/2)^2 J'_1, 5/2] J \rangle$ para os isótonos mais leves e do tipo $\langle [(5/2)^2 J_1, 7/2] J | H | [(5/2)^2 J'_1, 7/2] J \rangle$ para os isótonos mais pesados. Na análise desenvolvida acima, só foi considerada a contribuição devido ao hamiltoniano de partícula independente (avaliada pelo parâmetro Δ). Falta ainda ser avaliada a contribuição devido ao hamiltoniano residual. Podemos estimar qualitativamente as diferenças entre os valores calculados, com BCS e BBCS, para a contribuição do H_{res} nesses elementos de matriz (diagonais ou não), pelos respectivos fatores supercondutores: $4 v_{7/2}^2 u_{5/2}^2$ e $4 v_{5/2}^2 u_{7/2}^2$. Esses fatores levam a diferenças maiores, entre ambos tratamen

tos, na situação onde o número de ocupação do orbital $g_{7/2}$ aumenta e do orbital $d_{5/2}$ diminui, ou vice-versa, do que nos demais casos. Portanto, observando nas figuras IV.11.a,b a variação relativa na probabilidade de ocupação dos orbitais $g_{7/2}$ e $d_{5/2}$ em cada isótono, fica claro porque a maior influência do efeito de *blocking* sobre as componentes $[(7/2)^2 J_1, 5/2]$ no ^{139}La do que no ^{137}Cs , e sobre as componentes $[(5/2)^2 J_1, 7/2]$ no ^{141}Pr do que no ^{143}Pm .

Em relação as propriedades eletromagnéticas, os desvios verificados com BCS, citados na seção 5.a e 5.b, são devido as diferenças verificadas nas amplitudes das componentes com $\nu=3$, e nos elementos de matriz do operador transição T_λ , que podem ser estimadas pelos fatores supercondutores dados pelas relações III.1 e III.2. Assim, a proibição por Δl e a diminuta contribuição da componente $[(7/2\ 5/2)1,3/2]$ nos estados presentes em baixo espectro, justificam as propriedades magnéticas serem bem menos sensíveis as correções introduzidas em BCS.

Tendo em vista o exposto nas seções 5.a e 5.b, para os isótonos com $N=82$, podemos resumir sucintamente nossas conclusões como se segue.

De um modo geral, a aproximação BCS apresenta resultados satisfatórios apenas para as propriedades dos estados com $\nu \approx 1$ (isto é, $7/2_1^+$ e $5/2_1^+$). Na descrição das propriedades eletromagnéticas dos estados com $\nu \approx 3$, é importante a inclusão do efeito de *blocking*, onde os resultados com BCS são geralmente satisfatórios. Porém, devemos tomar cuidado na análise de transições que variam abruptamente em função do número de partículas (de um isótopo para outro). Nem sem

pre, nesses casos, o cálculo com BBCS leva a resultados mais satisfatórios do que a aproximação BCS. A análise da influência das componentes espúrias, desenvolvida na seção 6 do capítulo II, sugere essa possibilidade.

Especialmente para as transições entre estados com $\nu \approx 3$, parece ser indispensável a inclusão do efeito de *blocking*, já que só nesses casos os resultados com PBCS são, geralmente, insatisfatórios.

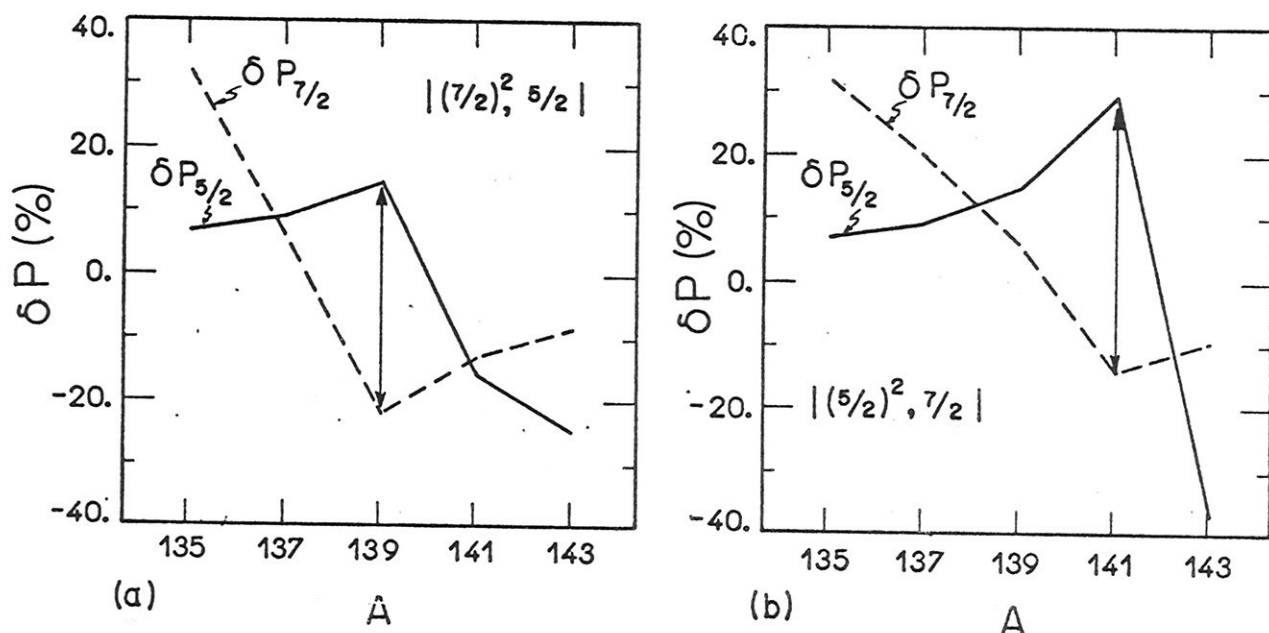


Figura IV.11. Variação percentual relativa na probabilidade de ocupação dos orbitais $g_{7/2}$ e $d_{5/2}$ em função da massa atômica A , onde $\delta P_j = P_j(\text{BCS}) - P_j(\text{BBCS})$ e $P_j = v_j^2$. Os estados bloqueados estão indicados entre barras.

6. COMPARAÇÃO COM OS DADOS EXPERIMENTAIS

A presente comparação não visa o melhor ajuste dos dados experimentais, mas verificar se as aproximações BBCS e PBCS apresentam resultados razoáveis. Contudo, a partir dos nossos resultados, algumas previsões podem ser extraídas.

Na figura IV.12, apresentamos os espectros experimentais adotados⁸⁰⁻⁹²⁾, e os calculados - para os estados de paridade positiva - com BBCS e PBCS, para os isótonos com $N=82$. Nos cálculos teóricos os cinco orbitais de partícula independente são considerados, uma vez que, como podemos ver na tabela IV.1, a base dos BCS permite incluir sem dificuldades o efeito orbital $1h_{11/2}$; a SDI é empregada como interação residual, e os valores dos parâmetros usados estão dados na seção 2. Observamos que, a densidade de níveis é razoavelmente bem reproduzida para os isótonos ^{137}Cs , ^{139}La e ^{141}Pr , e que para o ^{143}Pm entre 1.5 e 2.0 MeV os espectros teóricos não reproduzem a densidade experimental. Para o ^{135}I os dados experimentais são raros impossibilitando a comparação dos resultados.

As funções de onda selecionadas são apresentadas nas tabelas IV.2, 5, 7, 9 e 11.

Para os níveis com atribuição experimental de *spin* duvidosa, os resultados experimentais sugerem fortemente as seguintes determinações:

- (i) para o segundo nível observado no ^{135}I , $J^\pi=5/2^+$;
- (ii) para o 3º, 4º, 5º e 6º níveis observados no ^{137}Cs , respectivamente os *spins* $5/2^+$, $3/2^+$, $9/2^+$ e $11/2^+$;
- (iii) para o 4º e 6º níveis observados no ^{139}La , respec-

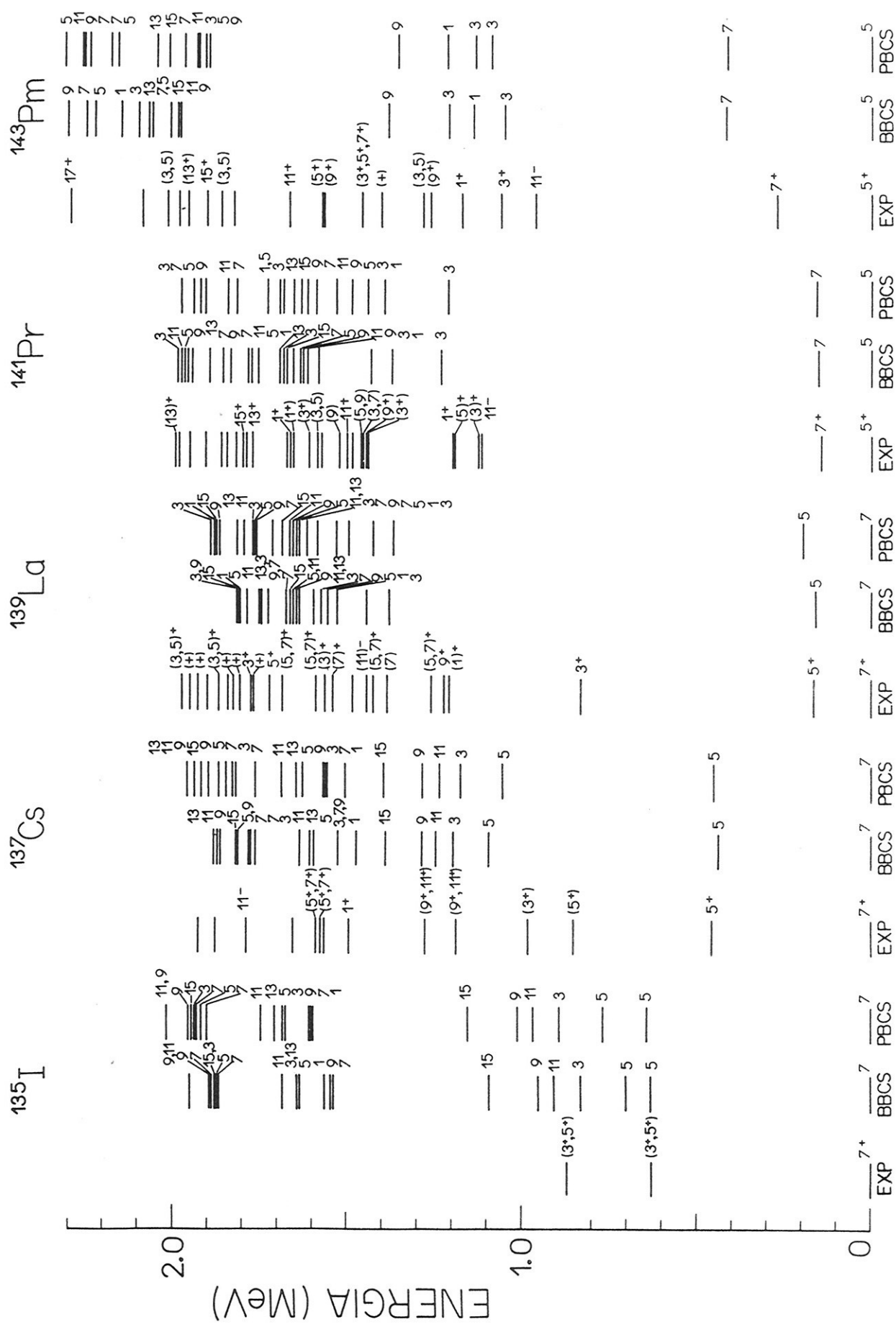


Figura IV.12. Espectros de energia para os isótonos $N=82$, experimentais (EXP)⁸⁰⁻⁹², e calculados para os estados de paridade positiva. Maiores detalhes, veja a legenda da figura IV.10.

- tivamente os *spins* $1/2^+$ e $5/2^+$;
- (iv) para o 4º e 5º níveis observados no $^{14}{}^1\text{Pr}$, respectivamente os *spins* $3/2^+$ e $5/2^+$;
- (v) e para o 6º e 7º níveis observados no $^{14}{}^3\text{Pm}$, respectivamente os *spins* $9/2^+$ e $3/2^+$.

Na tabela IV.12, apresentamos a comparação dos valores experimentais existentes e os calculados com BBCS e PBCS, para as transições e momentos eletromagnéticos. Os valores calculados com MC3 (considerando 4 orbitais de partícula única) são também mostrados. Notamos que os momentos estáticos são igualmente bem reproduzidos pelos cálculos teóricos. Os valores teóricos para as taxas $\text{BM1}(7/2_1^+ \rightarrow 5/2_1^+)$ são extremamente pequenos devido à proibição por Δl . Para as taxas $\text{BE2}(7/2_1^+ \rightarrow 5/2_1)$ os valores teóricos são pequenos em relação aos valores medidos, isto indica que os efeitos coletivos do caroço devam ser relevantes. Os valores medidos para as transições envolvendo estado de $v=3$, no $^{14}{}^1\text{Pr}$ e $^{14}{}^3\text{Pm}$, são reproduzidos com BBCS, e com PBCS exceto para a taxa $\text{BE2}(15/2_1^+ \rightarrow 11/2_1^+)$ no $^{14}{}^3\text{Pm}$.

Em resumo, de um modo geral, as duas aproximações apresentam resultados semelhantes e razoáveis em relação aos espectros experimentais e as propriedades eletromagnéticas medidas. A única exceção é para a taxa $\text{BE2}(15/2_1^+ \rightarrow 11/2_1^+)$, que indica ser importante a inclusão do efeito de *blocking* para as transições eletromagnéticas entre dois estados de $v=3$.

Tabela IV.12. Comparação entre resultados teóricos e experimentais (EXP). Os momentos de dipolo magnético e quadrupolo elétrico estão em unidades μ_N e eb , respectivamente. Os valores $B(M1)$ e $B(E2)$ estão em unidades $10^{-3} \mu_N^2$ e $10^{-3} e^2 b^2$, respectivamente. A grandeza $B(M1)/B(E2)$ está em unidades de $\mu_N^2/e^2 b^2$. Os valores teóricos apresentados foram calculados utilizando a parametrização $e^{eff}=2$ e $g_s^{eff}=0.5 g_s$.

Núcleo	Grandeza	EXP	BBCS	PBCS	MC3*
^{137}Cs	$\mu 7/2_1^+$	+2.84 ^a	+2.76	+2.76	+2.76
	$Q 7/2_1^+$	+0.05 ^a	+0.04	+0.04	+0.09
^{139}La	$\mu 7/2_1^+$	+2.78 ^a	+2.76	+2.76	+2.76
	$Q 7/2_1^+$	+0.22 ^a	+0.17	+0.18	+0.28
	BE2 ($5/2_1^+ \rightarrow 7/2_1^+$)	$\leq 0.020^b$	0.22	0.33	0.36
	BE2 ($3/2_1^+ \rightarrow 7/2_1^+$)	$13.4^c \pm 1.0$	0.60	0.42	1.57
	BE2 ($9/2_1^+ \rightarrow 7/2_1^+$)	$37^c \pm 2$	0.22	0.02	
	BE2 ($9/2_1^+ \rightarrow 5/2_1^+$)	$9.0^c \pm 0.8$	20.8	26.5	
	BM1 ($9/2_1^+ \rightarrow 7/2_1^+$)	$1.6^c \pm 0.2$	1.69	1.16	
^{141}Pr	$\mu 5/2_1^+$	+3.7 ^a	+3.47	+3.46	+3.44
	$\mu 7/2_1^+$	+3.1 ^a	+2.74	+2.74	+2.74
	$Q 5/2_1^+$	-0.07 ^d	-0.11	-0.14	-0.20
	BM1 ($7/2_1^+ \rightarrow 5/2_1^+$)	$4.84^e \pm 0.30$	0.001	0.001	0.02
	BE2 ($7/2_1^+ \rightarrow 5/2_1^+$)	$1.08^a \pm 0.08$	0.02	0.02	0.06
	BM1 ($15/2_1^+ \rightarrow 13/2_1^+$)	$171.1^e \pm 2.5$	180.8	184.2	
	BE2 ($15/2_1^+ \rightarrow 11/2_1^+$)	$4.00^e \pm 0.40$	3.27	2.61	8.71
$^{143}\text{Pm}^f$	$\mu 5/2_1^+$	+3.9 ± 0.6	3.51	3.51	3.54
	$\mu 15/2_1^+$	+7.5 ± 0.5	8.32	8.36	8.31
	BM1 ($7/2_1^+ \rightarrow 5/2_1^+$)	1.64 ± 0.12	0.22	0.20	0.40
	BE2 ($7/2_1^+ \rightarrow 5/2_1^+$)	0.97 ± 0.07	0.44	0.40	0.57
	BE2 ($15/2_1^+ \rightarrow 11/2_1^+$)	6.40 ± 0.40	5.55	1.23	10.8
	BM1 ($11/2_1^+ \rightarrow 9/2_1^+$)	10.9 ± 3.3	10.8	6.28	7.42
	BE2 ($11/2_1^+ \rightarrow 7/2_1^+$)				
	BM1 ($5/2_2^+ \rightarrow 5/2_1^+$)	0.12 ± 0.03	1.51	0.91	0.22

a. Ref. 80

b. Ref. 93

c. Ref. 87

d. Ref. 88

e. Ref. 90

f. Ref. 92

* Valores calculados com apenas 4 estados de partícula independente (orbital $h_{11/2}$ não incluído).

CAPÍTULO V. DESCRIÇÃO DE NÚCLEOS ESFÉRICOS PAR-ÍMPAR

1. INTRODUÇÃO

Apresentamos, neste capítulo, quatro versões para o acoplamento quasipartícula-*cluster*-vibrador (ACQPV), de tal modo que nosso formalismo permite tratar o *cluster* de quasipartículas com o efeito de *blocking* e/ou com projeção em número de partículas.

Na seção 2, introduzimos, brevemente, o formalismo dos diferentes modelos para o ACQPV apresentados.

Na seção 3, efetuamos a comparação dos resultados obtidos com os modelos QPCV, BQPCV e PQPCV, para os isótopos do Zinco.

Finalmente, na seção 4, apresentamos os resultados obtidos com a versão projetada (PQPCV) aos isótopos do Césio.

2. FORMALISMO PARA O ACOPLAMENTO QUASIPARTÍCULA-CLUSTER-VIBRADOR

2.a. A Base e o Hamiltoniano

Está suficientemente bem estabelecido que os estados menos energéticos dos núcleos par-par não podem ser apropriadamente descritos por estados de 2QP ou outros estados de partícula única²¹⁾; ao contrário, exibem um comportamento coletivo e são tratados com certo sucesso considerando-se vi-

brações quadrupolares da superfície nuclear¹⁹⁻³⁸). A excitação associada a esse tipo de vibrações é um bóson, e é introduzida pelos operadores de criação $b_{2\mu}^+$ e aniquilação $b_{2\mu}$, de fônons.

Por outro lado, os estados menos energéticos de núcleos esféricos par-ímpar (na ausência do acoplamento com vibrações), tratados no capítulo II, são descritos, aproximadamente, por um esquema de baixo desemparelhamento, com estados de 1QP e 3QP. A excitação devido a quebra de um par ($J=0$) é dada pelo operador de criação de quasipartícula a_{α}^+ .

Portanto, a idéia fundamental do formalismo é que os estados menos energéticos dos núcleos esféricos par-ímpar podem ser tratados em termos de duas excitações fundamentais distintas, quasipartículas e fônons, expressa pela relação de comutação $[b_{2\mu}, a_{\alpha}^+] = 0$.

A base é então composta de estados formados pelos acoplamentos 1QP \otimes N-fônons e 3QP \otimes N-fônons, representados por:

$$|\psi(J), NR; I\rangle \equiv [|\psi(\rho)\rangle \otimes |NR\rangle]^I \quad (V.1)$$

e

$$|\psi(abJ_1c; J), NR; I\rangle \equiv [|\psi(abJ_1c, JM)\rangle \otimes |NR\rangle]^I, \quad (V.2)$$

onde $\vec{I} = \vec{R} + \vec{J}$ é o momento angular total, os estados $|\psi(\rho)\rangle$ e $|\psi(abJ_1c; JM)\rangle$ são dados no apêndice A, relações (A.22) e (A.23), e os estados da base do vibrador são representados por:

$$|NR\rangle \quad (V.3)$$

com N denotando o número de fônons e R o momento angular total desses estados de N-fônons.

O hamiltoniano é escrito na forma

$$H_{ACQPV} = H_{qp} + H_{vib} + H_{int}, \quad (V.4)$$

onde H_{qp} é o hamiltoniano que descreve a interação entre as quasipartículas na camada de valência ímpar, dada no apêndice A. O hamiltoniano do vibrador harmônico H_{vib} , é dado por:

$$H_{vib} = \hbar\omega_2 \left(\hat{N} + \frac{5}{2} \right) \quad (V.5)$$

com

$$\hat{N} = \sum_{\mu} b_{2\mu}^+ b_{2\mu}, \quad (V.6)$$

$\hbar\omega_2$ é a energia de excitação (MeV) do estado 2_1^+ do caroço, e H_{int} representa a interação entre o *cluster* de quasipartículas e o vibrador, dada por²⁰⁾:

$$H_{int} = -\sqrt{4\pi} a \sum_i \sum_{\mu} Y_{2\mu}^* B_{2\mu} \quad (V.7)$$

com

$$B_{2\mu} = [b_{2\mu} + (-)^{\mu} b_{2-\mu}],$$

e a é a intensidade do acoplamento. Uma estimativa para a intensidade a é dada por^{94,95)}:

$$a = \frac{\beta \langle K \rangle}{\sqrt{20\pi}} \quad (\text{V.8})$$

onde $\langle K \rangle = \langle rdV/dr \rangle$ é a parte radial da interação quasipartícula-fônon, e β é o parâmetro de deformação de quadrupolo, relacionado à probabilidade de transição reduzida no núcleo ca- roço através da relação:

$$BE2(0_1^+ \rightarrow 2_1^+) = \left(\frac{3}{4\pi} Z e R_0^2\right) \beta^2 \quad (\text{V.9})$$

2.b. Operadores Eletromagnéticos

Os operadores eletromagnéticos consistem de duas partes, uma de partícula e outra coletiva. Definimos o operador quadrupolo elétrico por:

$$\begin{aligned} T_{E2}^\mu &= T_p^\mu(E2) + T_{\text{vib}}^\mu(E2) \\ &= e_p \sum_i r_i^2 Y_2^\mu(\theta_i, \phi_i) + \frac{3}{4\pi} R_0^2 e_{\text{vib}} B_{2\mu} \end{aligned} \quad (\text{V.10})$$

onde e_p é a carga efetiva da partícula, e $e_{\text{vib}} = Ze\beta/\sqrt{5}$ é a carga efetiva do vibrador. O operador dipolar magnético é de- finido por:

$$\begin{aligned} T_{M1}^\mu &= T_p^\mu(M1) + T_{\text{vib}}^\mu(M1) \\ &= \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} [g_\ell \vec{L}_\mu + g_s \vec{S}_\mu + g_R \vec{R}_\mu]_{\mu N}, \end{aligned} \quad (\text{V.11})$$

onde g_ℓ , g_s e $g_R = Z/A$, são respectivamente os fatores giro - magnéticos, orbital, de *spin* e coletivo e, μ_N o magnêton nu -

clear.

3. MODELOS PARA O ACQPV

Os procedimentos empregados, no cálculo do espectro e das propriedades eletromagnéticas, estão descritos na seção 5 do capítulo II, e os elementos de matriz necessários são dados no apêndice E. O problema da não conservação do número de partículas introduzido com o *cluster* de quasipartículas, pode ser tratado por dois métodos, um através da projeção da matriz H (descrito no apêndice C), outro diretamente com a base projetada.

Portanto, nosso formalismo possibilita as seguintes versões para o acoplamento quasipartícula-*cluster*-vibrador:

- (i) descrever o *cluster* de quasipartículas (i.é., os estados de 1QP e 3QP) com o efeito de emparelhamento usual (BCS) e projetar a matriz H , que denotaremos, simplesmente, por QPCV;
- (ii) descrever o *cluster* incluindo o efeito de *blocking* (BBCS), e projetar a matriz H , denotada por BQPCV;
- (iii) descrever o *cluster* com a base projetada em número de partículas (PBCS), e ortogonalizá-la pelo método de Schmidt. Denotada por PQPCV;
- (iv) descrever o *cluster* com os dois efeitos, *blocking* e projeção, em número de partículas, incluídos simultaneamente. Denotada por PBQPCV.

4. ALGUMAS CARACTERÍSTICAS DO ACOPLAMENTO ACQPV

Em vários aspectos as características do cálculo com ACQPV se assemelham às com ACPV^{26,96}, pois trata-se de uma aproximação para o ACPV com um *cluster* de n-partículas. O *cluster* de n-partículas é aproximado por um *cluster* constituído de uma mais três quasipartículas de BCS (QPCV). As correlações espúrias que surgem devido a não conservação do número de partículas podem ser removidas pelo método de projeção em número de partículas (PQPCV), e o efeito de *blocking* pode ser incluído com o modelo BQPCV; ainda os dois efeitos podem ser considerados simultaneamente com a versão PBQPCV.

Os núcleos esféricos par-ímpar com n=3, 5, 7, 9,... partículas de valência podem ser descritos respectivamente com ACPV acoplando n=3, 5, 7, 9... partículas às vibrações de quadrupolo. Com ACQPV as n-partículas são tratadas aproximadamente pelas componentes de n-partículas dos estados de 1QP e 3QP.

No caso simples com apenas 3 partículas (ou buracos) de valência os resultados com a versão projetada (PQPCV) são idênticas aos com o *cluster* de 3 partículas (PCV).

As características dos cálculos com PCV estão extensivamente discutidas nas referências 26 e 96; limitaremos-nos a discutir apenas os novos aspectos que surgem do emprego do ACQPV.

As características gerais devidas ao efeito de *blocking* e a projeção em número de partículas, na interação entre as quasipartículas, foram examinadas nos capítulos III e IV. A interação entre as quasipartículas e o vibrador

acrescenta novos aspectos que serão discutidos qualitativa - mente a seguir.

O hamiltoniano da interação QP-vibrador, relação (V.7) consiste do produto de dois operadores, um deles, B_2 , é responsável pela criação ou aniquilação de um fônon, e o outro, Y_2^* , é responsável pela quebra de pares ($J=0$). O operador Y_2^* é proporcional ao operador transição quadrupolar de um corpo, e seus elementos de matriz podem ser estimados através dos fatores de emparelhamento, veja as relações III.1 e III.2, $(u_1u_2 - v_1v_2)$ entre estados com igual número de quasipartículas, e $(u_1v_2 + v_1u_2)$ entre estados com diferentes números de quasipartículas.

Portanto, as particulares diferenças reveladas para o acoplamento ACQPV com os modelos QPCV, BQPCV e PQPCV, podem ser compreendidas qualitativamente pelo exame das variações específicas desses fatores de emparelhamento. Vamos, aqui, nos ater somente aos aspectos mais gerais do acoplamento ACQPV.

A fim de ilustrar as conseqüências do acoplamento QP-vibrador, para a estrutura da função de onda dos estados menos energéticos, apresentamos na figura V.1 um diagrama esquemático da localização dos estados da base, onde supomos que a energia necessária para quebrar um par é 2 MeV e energia do fônon é 1 MeV.

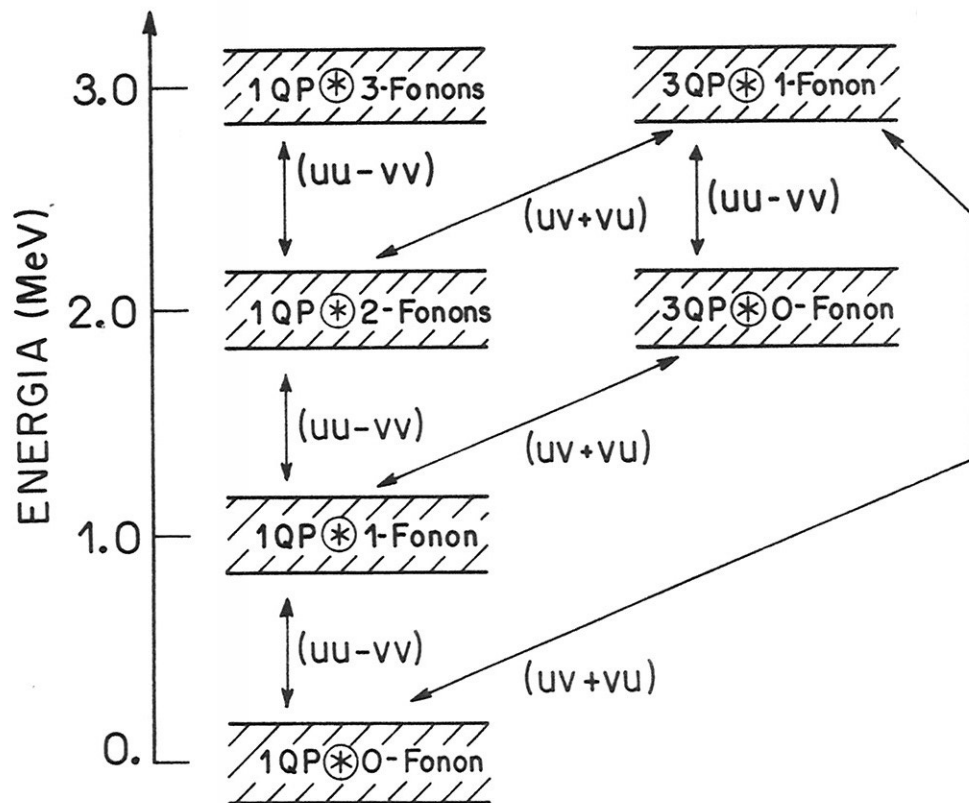


Figura V.1. Diagrama esquemático dos estados da base ACQPV, supondo que a energia necessária para quebrar um par ($J=0$) é de 2 MeV e a energia do fônon é 1 MeV. Os acoplamentos entre os diferentes estados da base devido ao H_{int} , são indicados com seus respectivos fatores de emparelhamento.

Podemos distinguir duas situações limites devidas ao acoplamento ACQPV.

A primeira delas é para núcleos com poucas partículas (ou buracos) de valência. Neste caso, temos $(u_1u_2 - v_1v_2) \approx \pm 1$ e $(u_1v_2 + v_1u_2) \ll 1$. Portanto, os estados menos energéticos terão como componentes dominantes os estados $1QP \otimes 1,2,3$ -fônons. Nesta situação, o simples acoplamento QP vibrador de Kisslinger e Sorensen é uma aproximação razoável; conseqüentemente, os efeitos devido a *blocking* ou projeção em

número são menos relevantes sendo suficiente o emprego do modelo QPCV.

A outra solução limite é para núcleos com a

metade da camada preenchida. O acoplamento entre os estados $1QP \otimes N\text{-fônons}$ e $3QP \otimes N'\text{-fônons}$ torna-se significativa, pois temos $(u_1v_2 + v_1u_2) \approx 1$. Portanto, nos estados menos energéticos teremos a competição entre dois tipos de configuração:

$1QP \otimes 1\text{-fônons}$ e $3QP \otimes \text{zero-fônons}$. Nesta situação, é claro, o emprego do acoplamento QPV é insuficiente, e os efeitos advindos da variação no número de ocupação devido a quebra de pares devem afetar ainda mais sensivelmente - do que no caso do carrego inerte - os resultados com QPCV, sendo portanto, necessário o tratamento com um dos modelos BQPCV ou PQPCV.

Ainda, no meio da camada de valência, o aumento do acoplamento entre estados que diferem em número de fônons por um, e em número de partículas por dois, acarreta numa dificuldade séria para o corte da base com acoplamento ACQPV.

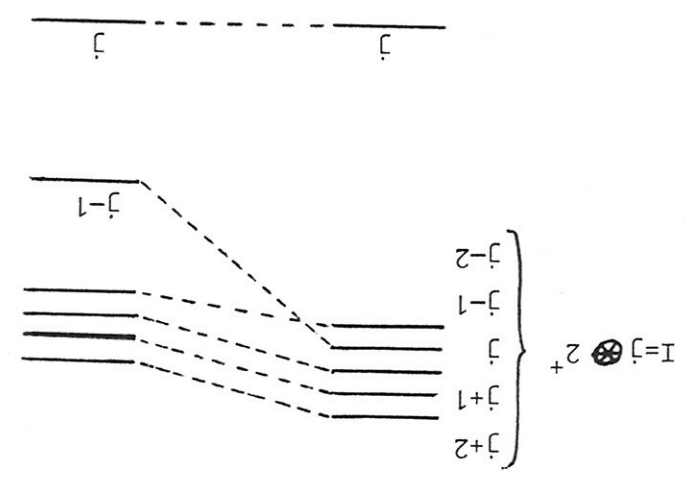
Uma das características mais marcantes do acoplamento ACQPV é a reprodução do acoplamento anômalo (AC) dos estados com $I=(j-1)$, ilustrado na figura V.2. Este é causado pelo destacado rebaixamento do estado $|j, 12; j-1\rangle$ devido à forte interação com a componente $|j, j-1\rangle$, e pode ser compreendido, qualitativamente, pelo coeficiente $6-j$ que vem do acoplamento expresso pelo elemento de matriz:

$$\langle j, 12; I | H_{int} | (j)^2 j', j] I, 00; I \rangle \sim \langle j | Y_2^0 | (j)^2 j', j; I \rangle$$

$$\left\{ \begin{array}{l} j \\ j \\ j \end{array} \right\} \begin{array}{l} I \\ 2 \\ j' \end{array} \quad (V.12)$$

Este coeficiente, para $j \leq 5/2$, torna-se positivo unicamente para $I = (j-1)$ situação em que seu valor absoluto é, também, uma ordem de grandeza maior do que os do seu valor calculados considerando-se os outros possíveis I . Observa-se que, para alguns efeitos, misturas razoáveis de estados de $3QP$ não mudam as previsões qualitativas (ou mesmo semiquantitativas) do simples acoplamento $AQPV$ ⁹⁷. Porém isto não pode ser sustentado para o efeito $(j-1)$, o qual se constitui numa característica específica do acoplamento $AQPV$ que não pode ser reproduzida pelo $AQPV$. Isto se verifica, por exemplo, nos isótopos $^{65,67}Zn$, veja a seção seguinte, onde o estado $3/2^-$, baseado na componente $|5/2, 12; 3/2\rangle$, é rebaixado. Em cálculos com $AQPV$ ⁹⁸⁻¹⁰⁰ esses estados, o $3/2^-$ no ^{67}Zn e o $3/2^-$ no ^{65}Zn , estão ausentes. Os estados $5/2^+$ baixados na seção 6, apresentam um comportamento coletivo e não podem ser descritos simplesmente com $AQPV$.

Figura V.2. Ilustração esquemática do acoplamento anômalo $I = (j-1)$.



5. CÁLCULOS PARA OS ISÓTOPOS DO ZINCO

A fim de examinar a eficiência dos modelos BQPCV e PQPCV, apresentamos uma aplicação realista destes aos isótopos ${}^{58+n}_{30}\text{Zn}_{28+n}$ ($n=3,5,7,9$).

As características mais gerais a cerca da importância dos efeitos de *blocking* e projeção em número de partículas, na interação entre as quasipartículas foram examinadas nos capítulos III e IV, onde a necessidade da inclusão de um dos efeitos ficou demonstrada. Assim, limitar-nos-emos a comparação dos resultados obtidos com BQPCV e PQPCV e com os dados experimentais existentes. Como ilustração os espectros calculados com QPCV são também apresentados.

5.a. Espectros

Usamos a interação SDI para a interação entre as quasipartículas; para as energias de partícula única os mesmos valores utilizados com o caroço inerte, dados na seção III.2; para os parâmetros da SDI $G=0.40$ MeV ($\sim 23/A$)²¹, $\hbar\omega_2 = 1.20$ MeV e $a=0.81$ ¹⁰¹). Esses valores foram fixados para todos os isótopos. Nenhum ajuste foi efetuado.

Consideramos apenas os estados com $N \leq 2$ fônons e a base foi truncada de modo a incluir no *cluster* todos os estados de 3QP com $\nu=1$ e, dentre os demais, aqueles com energia $E=N\hbar\omega_2 + E_{qp} \leq 4.0$ MeV. A fim de examinar a influência do corte em energia, efetuamos também o cálculo completo com a versão projetada PQPCV. As dimensões da base envolvida em cada caso são apresentados na tabela V.1.

Tabela V.1. Número de vetores presentes na base, por "spin", nos cálculos com ACQPV para os isótopos do Zinco

SPIN	ESPAÇO TRUNCADO				ESPAÇO COMPLETO
	^{61}Zn	^{63}Zn	^{65}Zn	^{67}Zn	$^{61},^{63},^{65},^{67}\text{Zn}$
1/2	47	53	39	39	61
3/2	80	90	65	65	104
5/2	94	106	76	76	124
7/2	83	96	65	65	113
9/2	65	76	50	50	91

Enquanto que com o modelo de camadas a base chega a 2.000 vetores³⁹⁾, o emprego do acoplamento ACQPV envolve no máximo 124 vetores.

Os espectros calculados e os experimentais adotados são apresentados nas figuras V.3 a V.6, onde os espectros obtidos com o modelo de camadas³⁹⁾ são também mostrados. Notamos que os espectros dos $^{61},^{63}\text{Zn}$ são igualmente bem reproduzidos com os modelos BQPCV e PQPCV; ambos modelos apresentam também espectros semelhantes para os isótopos $^{65},^{67}\text{Zn}$, porém, para esses isótopos o corte em energia efetuado mostrou-se menos adequado.

Comparando os espectros calculados com PQPCV (no espaço completo) e com MC observamos que até 1.5 MeV eles são bastante semelhantes. Acima de 1.5 MeV os cálculos com MC produzem uma densidade de estados maior do que com PQPCV. Isto é devido à existência de estados baseados em estados de nêutrons com desemparelhamento maior ou igual a 5, e a limitação imposta no nosso cálculo ao espaço de fônons ($N \leq 2$). A fim de reproduzir a densidade de estados acima de 1.5 MeV, é indispensável aumentar a dimensão do espaço de fônons, com ACQPV.

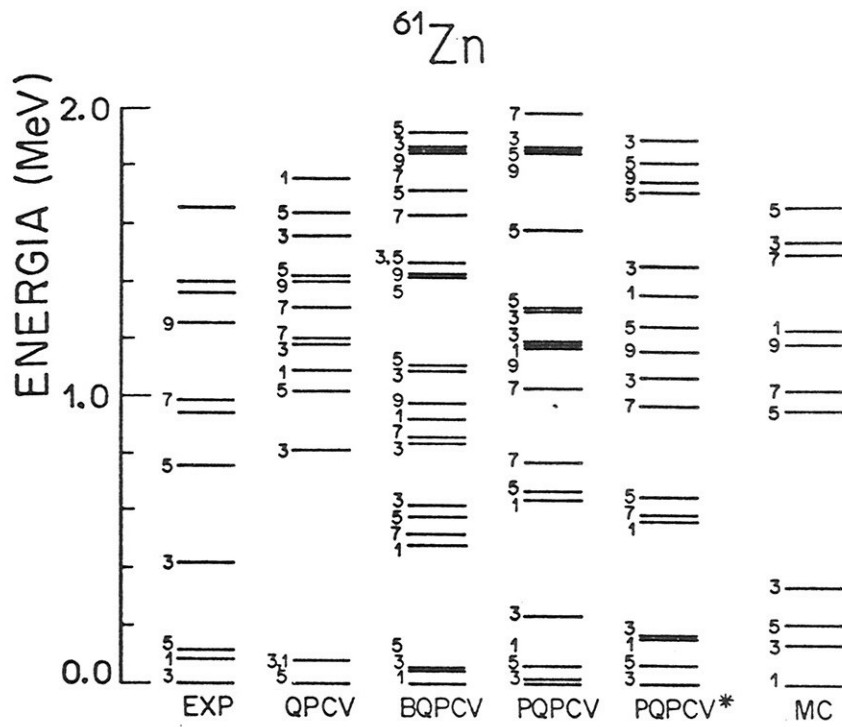


Figura V.3. Espectros de energia para o ^{61}Zn , experimental (EXP)^{80,102}, calculados com MC³⁹, e calculados com o espaço truncado (BQPCV e PQPCV) e com o espaço completo (PQPCV*), para os estados de paridade negativa. Os "spins" estão na forma $2J$.

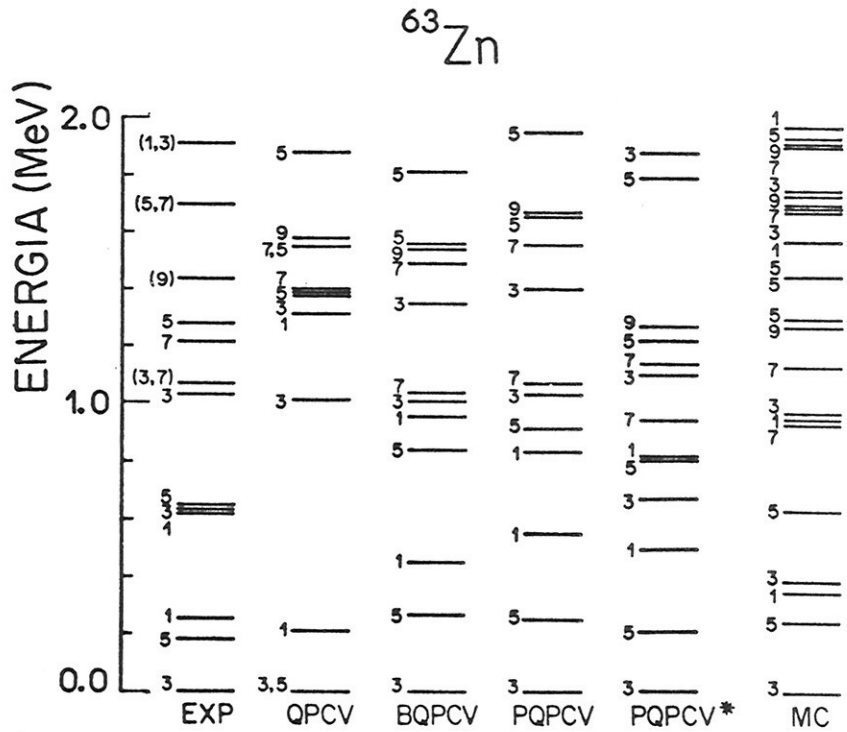


Figura V.4. Espectros de energia para o ^{63}Zn . VEja a legenda da figura V.3.

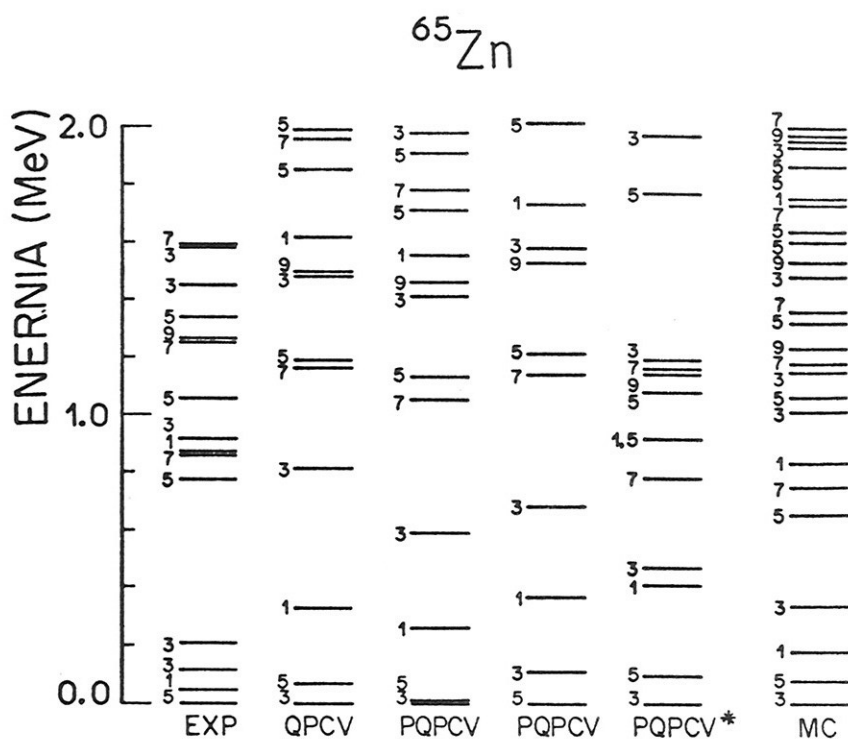


Figura V.5. Espectros de energia para o ^{65}Zn . Veja a legenda da figura V.3.

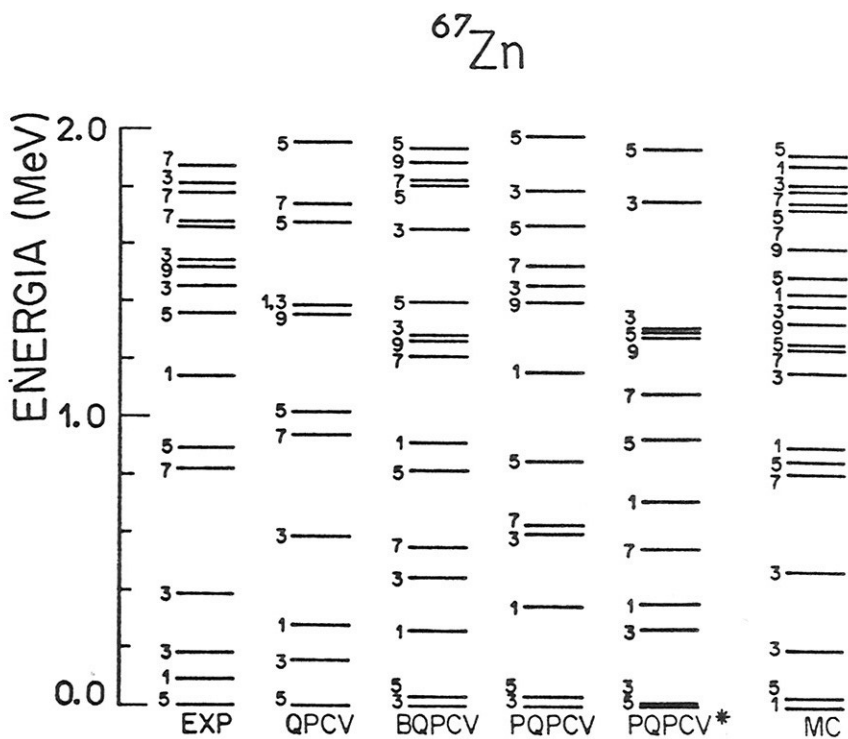


Figura V.6. Espectros de energia para o ^{67}Zn . Veja a legenda da figura V.3.

Tabela V.2. Funções de onda selecionadas do ^{63}Zn , calculadas com BQPCV (B) e PQPCV (P), considerando o espaço truncado. Adotamos a seguinte representação para os estados de partícula única: $p_{3/2}^3 \bar{3}, f_{5/2}^5$ e $p_{1/2}^1 \bar{1}$. As combinações lineares para os estados de $3QF(\nu=1)$ da base de PQPCV, representadas por $|J_a J_a 0 J_c\rangle$, são dadas abaixo.

I ⁻			I ⁻			I ⁻		
B	P		B	P		B	P	
$\bar{1};00$.706	.656	$\bar{1};00$.197	.261	$\bar{5};12$	-.721	-.713
$\bar{3};12$.431	.468	$\bar{3};12$.646	.630	$\bar{5};24$.206	.193
$\bar{1};20$.202	.205	$\bar{5};12$.322	.257	$\bar{3};12$	-.187	-.214
$(\bar{3})^2 \bar{2}\bar{1};5/2;12$	-.203	-.193	$(\bar{3})^2 0\bar{1};1/2;00$	-.105	-.216	$(\bar{5})^2 4\bar{1};7/2;00$.323	.309
			$(\bar{5})^2 2\bar{3};1/2;00$.266	.222			
$\bar{3};00$.685	.686	$(\bar{3}\bar{1})2\bar{5};1/2;00$	-.246	-.235			
$\bar{3};12$.304	.292						
$\bar{3};20$.207	.228						
$\bar{5};00$.754	.725						
$\bar{5};12$	-.225	-.217						
$\bar{5};20$.214	.228						
$\bar{3};12$	-.647	-.681						
$(\bar{5})^2 2\bar{5};7/2;00$.310	.283						
$(\bar{3}\bar{5})4\bar{1};7/2;00$.336	.249						
$(\bar{3}\bar{5})3\bar{1};7/2;00$	-.134	-.239						
$\bar{5};12$.759	.781						
$(\bar{3}\bar{5})4\bar{1};9/2;00$.242	.247						

$(\bar{3})^2 0\bar{1};1/2 \rangle = -0.0054 | \bar{1} \rangle + 1.0 | (\bar{3})^2 0\bar{1} \rangle$

Tabela V.3. Funções de onda selecionadas do ^{65}Zn , calculadas considerando o espaço truncado. Veja a legenda da tabela V.2.

I^-			I^-			I^-		
	B	P		B	P		B	P
$1/2_4$								
1;00	.767	.747	3;12	.454	.423	1;12	.597	.645
1;20	.207	.226	3;22	.227	.207	3;12	-.299	-.266
(5) 21,3/2;12	-.239	-.250	5;12	.522	.576	5;12	.343	.295
(5) 21,5/2;12	-.270	-.287	(5) 23,1/2;00	.315	.298	(35) 21,3/2;00	.387	.343
$3/2_1$								
3;00	.731	.719	(35) 11,1/2;00	-.447	-.411	$5/2_3$		
3;12	.201	.181	3/2_2			3;12	.557	.424
3;20	.225	.240	5;12	-.542	-.618	3;22	-.218	-.161
(35) 31,7/2;12	.071	.201	1;12	.244	.233	3;24	.205	.119
(35) 41,7/2;12	-.242	-.166	(5) 45,3/2;00	.365	.350	5;12	.149	.434
$5/2_1$								
5;00	.767	.748	(5) 21,3/2;00	.438	.403	1;12	.230	.411
5;20	.218	.240	(5) 21,3/2;12	.218	.148	(5) 23,5/2;00	.311	.139
(5) 45,3/2;12	.201	.229	5/2_2			(35) 31,5/2;00	-.363	-.280
(5) 21,3/2;12	.220	.224	1;12	-.567	-.562	$9/2_1$		
(5) 41,7/2;12	.263	.274	5;12	.491	.510	5;12	.772	.791
$7/2_1$								
5;12	.696	.732	(1) 05,5/2;00	-.203	-.239	(5) 45,9/2;00	.256	.233
(5) 41,7/2;00	-.417	-.387	(5) 21,5/2;00	.315	.301	(5) 21,3/2;24	.210	.228
(5) 41,7/2;24	.172	.207	7/2_2			(5) 45,3/2;24	.198	.222
			3;12	.542	.540			
			3;24	.291	.304			
			(5) 23,7/2;00	-.346	-.342			
			(5) 41,7/2;00	-.262	-.217			
			(35) 31,7/2;00	.154	.292			
			(35) 41,7/2;00	-.392	-.287			

$$|(1\bar{1})^2 05.5/2\rangle = 0.0665|5\rangle + 0.3463|(3)^2 05\rangle + 1.0641|(\bar{1})^2 05\rangle$$

As funções de onda selecionadas para os estados dos isótopos $^{63}, ^{65}\text{Zn}$, calculadas com BQPCV e PQPCV (no espaço truncado), são apresentadas nas tabelas V.2 e V.3. Vemos que as componentes individuais mais importantes nas funções de onda dos estados menos energéticos são estados de $1QP$ e $1QP \otimes 1\text{-fônon}$. Entretanto, as misturas de $3QP$ são consideráveis. Em todos os isótopos considerados temos como estados menos energéticos o tripleto $1/2_1^-$, $3/2_1^-$ e $5/2_1^-$, porém nenhum deles é um estado puro de $1QP$; isto é devido ao valor intermediário da intensidade do acoplamento partícula-vibrador empregado. As mesmas características e, praticamente, a mesma composição para os estados menos energéticos dos isótopos do Zinco, são obtidas com os modelos BQPCV e PQPCV.

5.b. Propriedades Eletromagnéticas

Os parâmetros usados, fixos para todos os isótopos considerados, foram: $e_p = 0.5 e$, $e_{\text{vib}} = 2.7e$, $g_\lambda = 0$, $g_s = 0.7$, $g_s^{\text{livre}} = 2.67$ e $g_R = Z/A$. Apenas a carga efetiva do vibrador empregada é um pouco maior do que a usada em cálculos anteriores ($e_{\text{vib}} = 2.0.e$). Com o acoplamento partícula-cluster-vibrador (APCV) para o $^{67}\text{Zn}^{101}$; os demais valores são análogos. Para os isótopos $^{61}, ^{67}\text{Zn}$ o cálculo com APCV é mais simples, assim nos limitamos a comparar os resultados obtidos para os isótopos $^{63}, ^{65}\text{Zn}$.

Nas tabelas V.4 e V.5, apresentamos os momentos estáticos, de quadrupolo elétrico e de dipolo magnético, para os isótopos $^{63}, ^{65}\text{Zn}$, calculados com BQPCV e PQPCV. Os resultados são comparados aos obtidos com o modelo de camadas (MC)³⁹⁾ e aos dados experimentais existentes⁸⁰⁾.

Tabela V.4. Momentos estáticos de quadrupolo elétrico Q , e de dipolo magnético μ para o ^{63}Zn , calculados com o espaço truncado, com BQPCV (B) e PQPCV (P), com o espaço completo com PQFCV (P*), e com o modelo de camadas MC³⁹). Os dados experimentais (EXP) foram extraídos da referência 80.

I_i^-	Q (e b)					μ (n.m)				
	Exp	B	P	P*	MC	Exp	B	P	P*	MC
3/2 ₁		.20	.19	.22	.23	-.28	-1.02	-1.07	-.88	-.71
5/2 ₁		-.17	-.17	-.18	-.10		1.02	1.00	1.01	1.49
1/2 ₁							.37	.38	.37	
3/2 ₂		.01	-.05	.08			.30	.28	.37	
5/2 ₂		-.07	-.07	-.06			-.16	-.18	-.21	
1/2 ₂							.72	.71	.69	
7/2 ₁		-.06	-.05	-.06			-.18	-.24	.16	
9/2 ₁		-.16	-.15	-.12			1.83	1.74	1.83	
3/2 ₃		-.01	.05	-.12			.69	.78	.78	
5/2 ₃		.07	.09	.09			.83	.90	.96	
7/2 ₂		-.09	-.08	-.07			1.21	1.18	.84	

Tabela V.5. Momentos estáticos de quadrupolo elétrico Q e de dipolo magnético μ para o ^{65}Zn . Veja a legenda da tabela V.4.

I_i^-	Q (e b)					μ (n.m)				
	Exp	B	P	P*	MC	Exp	B	P	P*	MC
3/2 ₁		.12	.11	.23	.22	-.78	-1.11	-1.11	-.80	-1.06
5/2 ₁		-.02	.03	.03	.06	.77	.98	.98	.90	1.43
1/2 ₁							.42	.42	.45	
3/2 ₂		.18	.14	.09	.12	.73	.38	.37	.52	
5/2 ₂		-.02	-.04	.04			1.22	1.18	1.02	
1/2 ₂							.61	.53	.66	
7/2 ₁		-.07	-.05	-.01			1.27	1.29	1.09	
9/2 ₁		-.01	.01	.03			1.79	1.75	1.83	
3/2 ₃		-.08	-.05	-.14			.76	.80	.89	
5/2 ₃		-.01	—	-.10			-.05		-.07	
7/2 ₂		-.14	—	.11			.08		-.04	

Os valores calculados com os modelos BQPCV e PQPCV (no espaço truncado) são praticamente análogos. A influência do corte efetuado na base é pequena, e seus resultados são semelhantes aos obtidos com a base completa.

Comparando os valores calculados com PQPCV (com o espaço completo) e com MC, verificamos um acordo muito bom. Com ambos modelos os sinais para os momentos estáticos são os mesmos, exceto para o $\mu_{5/2}^-$ no ^{65}Zn , e as magnitudes são similares. Os dados experimentais são raros, contudo, em relação aos valores medidos, nosso cálculo com PQPCV apresenta, geralmente, um acordo melhor do que com MC.

Nas tabelas V.6 e V.7, apresentamos as taxas BE2 e BM1, para os isótopos $^{63}, ^{65}\text{Zn}$, calculadas com BQPCV e PQPCV. Os valores calculados são comparados aos obtidos com MC³⁹⁾ e aos valores experimentais estimados⁸⁰⁾. Até o presente, os dados experimentais existentes não permitem a avaliação dos valores calculados para o ^{63}Zn e, para o ^{65}Zn os valores foram estimados a partir das razões de mistura e *branching ratios*, mas com grandes incertezas. Os desvios podem ser da ordem de 50% a 100% do valor estimado; tais valores aparecem indicados nas tabelas com o símbolo \approx .

Novamente, os cálculos no espaço truncado, com os modelos BQPCV e PQPCV, levam a resultados semelhantes. O corte efetuado na base não altera os valores das taxas BM1 calculados, porém, pode implicar em diferenças significativas para as taxas BE2.

As taxas BE2 calculadas com MC foram obtidas através de ajustes das cargas efetivas dos prótons e dos nêutrons, enquanto em nossos cálculos os valores das cargas efe

Tabela V.6. Probabilidades de transição BE2 e BM1 para o ^{63}Zn .
Veja a legenda da tabela V.4.

Transição	BE2 ($e^2 b^2$) * 10^{-2}				BM1 (n.m) 2 * 10^{-2}			
	Exp	B	P	P*	Exp	B	P	P*
5/2 ₁ →3/2 ₁		.09	.08	.25	<10 ⁻⁷	<10 ⁻⁴	<10 ⁻⁴	
1/2 ₁ →3/2 ₁		.003	.07	.05	.61	.68	.59	
+5/2 ₁		1.81	1.79	2.17				
3/2 ₂ →3/2 ₁		.29	.73	.07	.05	.06	.05	
+5/2 ₁		2.12	1.91	3.10	<10 ⁻³	<10 ⁻³	<10 ⁻⁴	
+1/2 ₁		.02	.16	<10 ⁻⁷	.02	.01	.01	
5/2 ₂ →3/2 ₁		3.28	3.44	3.51	.11	.08	.13	
+5/2 ₁		.11	.18	.18	<10 ⁻²	<10 ⁻²	<10 ⁻²	
+1/2 ₁		.03	.06	.06				
1/2 ₂ →3/2 ₁		1.93	2.17	1.97	.02	<10 ⁻²	<10 ⁻⁴	
+5/2 ₁		.96	.75	.45				
+1/2 ₁					<10 ⁻²	<10 ⁻³		
7/2 ₁ →3/2 ₁		2.40	2.65	1.69				
+5/2 ₁		.13	.21	1.08	.06	.04	.03	
9/2 ₁ →5/2 ₁		2.93	2.95	3.28				
7/2 ₂ →5/2 ₁		2.51	2.71	2.20	<10 ⁻²	<10 ⁻²	.01	

Tabela V.7. Probabilidades de transição BE2 e BM1 para o ^{65}Zn .
Veja a legenda da tabela V.4. Aqui, os dados experimentais foram extraídos da referência 39.

Transição	BE2 ($e b$) 2 * 10^{-2}					BM1 (n.m) 2 * 10^{-2}				
	Exp	B	P	P*	MC	Exp	B	P	P*	MC
5/2 ₁ →3/2 ₁	1.60	.28	.30	.62	.003	3.00	<10 ⁻²	<10 ⁻³	.01	.87
1/2 ₁ →3/2 ₁		.03	.03	.33	.82	>13.6	.70	.74	.73	7.40
+5/2 ₁	1.03 ₀₆	.66	.45	1.21	.98					
3/2 ₂ →3/2 ₁		.002	.002	.15			.08	.09	.06	
+5/2 ₁	~1.60	2.83	3.53	3.86	4.10	.50	<10 ⁻⁴	<10 ⁻⁵	<10 ⁻²	.20
+1/2 ₁	~4.50	.67	.60	.49	.07	5.40	.02	.02	.03	13.00
5/2 ₂ →3/2 ₁		.06	.03	1.46			<10 ⁻²	<10 ⁻²	.04	
+5/2 ₁		1.36	1.47	1.63	.13		<10 ⁻³	<10 ⁻⁵	.01	2.10
+1/2 ₁		2.06	2.21	.82						
1/2 ₂ →2/2 ₁		1.31	1.27	2.22			<10 ⁻²	<10 ⁻²	<10 ⁻³	
+5/2 ₁		1.01	1.24	.25						
+1/2 ₁							<10 ⁻²	<10 ⁻²	<10 ⁻²	
7/2 ₁ →3/2 ₁		.29	.18	.78						
+5/2 ₁		2.95	3.33	3.28	2.60		<10 ⁻²	<10 ⁻²	<10 ⁻³	.80
9/2 ₁ →5/2 ₂		2.89	3.07	3.38						
7/2 ₂ →5/2 ₁		1.87		.44			.04		<10 ⁻²	

tivas do vibrador e dos nêutrons foram fixados. Mesmo assim, em relação aos dados experimentais, as magnitudes calculadas com ACQPV apresentam um acordo um pouco melhor, especialmente para a transição $5/2_1^- \rightarrow 3/2_1^-$ no ^{65}Zn .

O mau acordo entre as taxas BM1 calculadas com ACQPV e os valores medidos experimentalmente é devido à proibição por Δl , onde, para essas transições o operador tensorial $[Y_2 \otimes \vec{S}_1]^{103}$ não considerado em nossos cálculos tem um papel importante.

5.c. Sumário

Em relação aos dados experimentais para os isótopos do Zinco, nossos resultados, obtidos com os modelos BQPCV e PQPCV, e os calculados com MC, apresentam para os espectros de baixa energia (~ 1.50 MeV) e para as propriedades eletromagnéticas examinadas, exceto para as taxas BM1, o mesmo acordo. Todavia, o emprego do acoplamento ACQPV leva a uma enorme redução no espaço de configurações, de 2.000 para 124 vetores. Logo, o cálculo com ACQPV simplifica apreciavelmente o cálculo computacional, com um formalismo bem mais transparente que possibilita uma interpretação mais simples das funções de onda e elementos de matriz.

Os resultados obtidos para o ^{65}Zn indicam que devemos ter cuidado no corte da base com ACQPV.

Por fim, os valores calculados com os modelos BQPCV e PQPCV, no espaço truncado, do ponto de vista da comparação com o cálculo no espaço completo, são equivalentes. Portanto, na descrição das propriedades dos isótopos $^{61}, ^{63}, ^{65}, ^{67}\text{Zn}$, em baixo espectro, o emprego do modelo mais

simples, BQPCV, é suficiente.

6. CÁLCULOS PARA OS ISÓTOPOS DO CÉSIO

Várias medidas das propriedades eletromagnéticas dos estados de acoplamento anômalo (AC) têm revelado, claramente, o caráter coletivo desses estados. Uma das mais importantes observações é que as transições E2 dos estados $(j-1)$ aos estados de 1QP com *spin* j são fortemente favorecidas, enquanto as transições M1 correspondentes são moderadamente inibidas. O incremento das transições E2 é comparável (ou da mesma ordem de grandeza) as transições E2 dos estados de 1-fônon 2^+ aos estados fundamentais no núcleo par-par adjacente. Isto demonstra a natureza coletiva dos estados AC.

A presente aplicação da versão projetada PQPCV aos isótopos ^{135}Cs e ^{133}Cs , ilustra o poder de descrição dos estados $5/2^+$, gerados pelo acoplamento anômalo, com o acoplamento ACQPV.

Descrevemos os estados dos isótopos do Césio, com as quasipartículas distribuídas entre os estados de partícula independente: $1g_{7/2}$, $2d_{5/2}$, $3s_{1/2}$, $2d_{3/2}$ e $1h_{11/2}$, acoplados a zero, um e dois fônons. A interação SDI foi empregada para a interação residual entre as quasipartículas.

Nenhum ajuste de parâmetro foi efetuado, os valores empregados são os adotados no cálculo com o caroço inerte, veja a seção 2 do capítulo IV, e os parâmetros do vibrador empregados, $\hbar\omega_2 = 0.80$ MeV e 0.60 MeV, respectivamente, para os isótopos ^{135}Cs e ^{133}Cs , foram tomados a partir dos da-

dos experimentais para os isótopos vizinhos correspondentes, assumindo⁴⁰⁾ $\hbar\omega_2 = [\hbar\omega_2(Z-1) + \hbar\omega_2(Z+1)]/2$, e o parâmetro $\beta=0.050$ ($a=0.315$) foi fixado a partir do valor empregado na referência 40.

A base foi truncada de modo a incluir os estados: $1Q \otimes N$ -fônons ($N \leq 2$), $3QP \otimes$ zero-fônons e $3QP(\nu=1) \otimes N$ -fônons ($N \leq 1$) permitindo no máximo uma partícula nos orbitais $d_{3/2}$ e/ou $s_{1/2}$, com a qual a dimensão máxima envolve 156 vetores.

Na figura V.7, apresentamos as tendências, experimental (EXP) e calculadas com PQPCV, das energias de excitação dos dois primeiros estados $5/2^+$ dos isótopos $^{133,135}\text{Cs}$. Notamos que a tendência experimental é reproduzida.

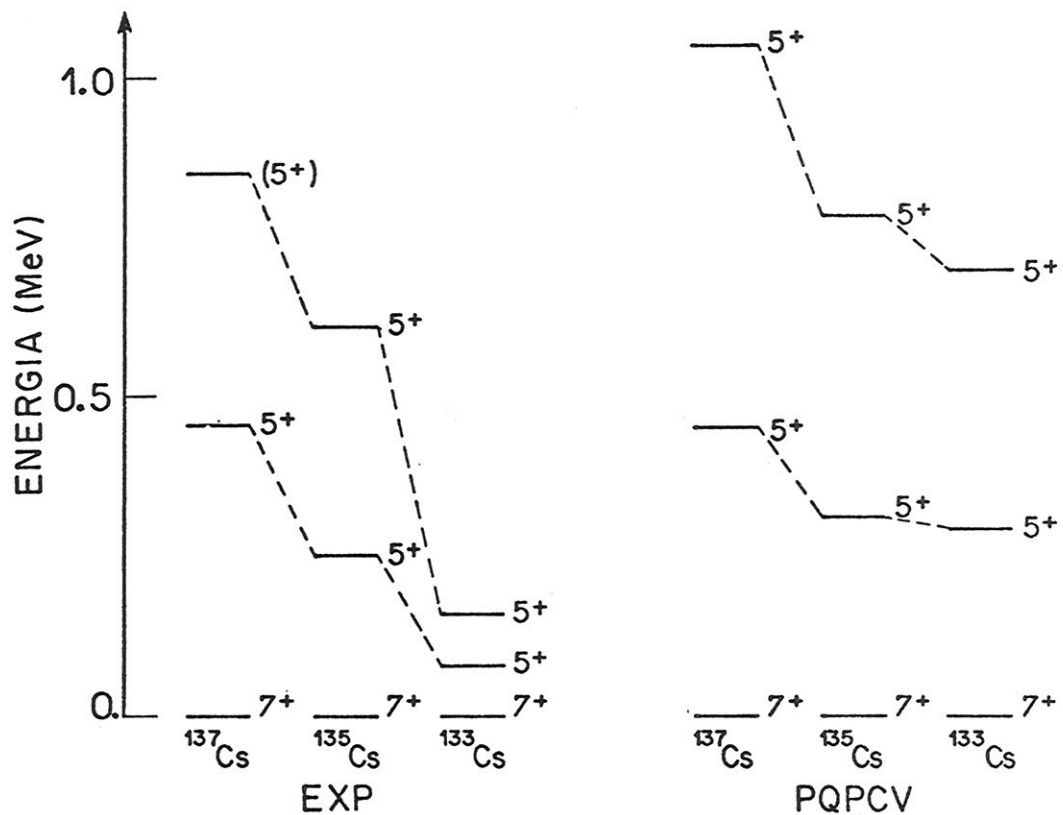


Figura V.7. Tendência das energias de excitação experimental (EXP) e calculadas com a versão projetada do ACQPV.

As taxas BE2 foram calculadas com a carga efetiva do próton $e_p^{eff}=2$ e, a mesma empregada com o caroço inerte, e a carga efetiva do vibrador $e_{vib}^{eff} = \frac{Ze\beta}{\sqrt{5}} = 1.23$ e.

Nas tabelas V.8 e V.9, apresentamos, respectivamente, as funções de onda e as taxas BE2, calculadas com ACQPV. Os valores das taxas BE2 são comparados aos calculados microscopicamente por Kuriyama et al.⁴⁰⁾. Observamos que o acoplamento ACQPV proporciona uma descrição apropriada e simples da estrutura dos estados coletivos $5/2_2^+$, e os valores calculados das transições E2 apresentam um acordo muito bom com os calculados com o modelo microscópico⁴⁰⁾.

Tabela V.8. Funções de onda selecionadas para os isótopos do Cs, calculadas com PQPCV. Apenas as contribuições maiores ou iguais a 4% para a função de onda total foram incluídas.

$7/2_1^+$	^{133}Cs	^{135}Cs
$\tilde{7};00$.887	.906
$5/2_1^+$	^{133}Cs	^{135}Cs
$\tilde{5};00$.827	.855
$\tilde{5};12$	-.262	-.234
$5/2_2^+$	^{133}Cs	^{135}Cs
$\tilde{7};12$.784	.743
$(\tilde{7})^2 4\tilde{7}, 5/2;00$	-.493	-.552

$$\tilde{7} \equiv g_{7/2}$$

$$\tilde{5} \equiv d_{5/2}$$

Tabela V.9. Taxas BE2 calculadas com PQPCV e microscopicamente⁴⁰⁾ denotadas por EXACT e ACS, em unidades $(e^2 \cdot \text{fm}^4) \times 10^2$.

	$5/2_2^+ \rightarrow 7/2_1^+$			$5/2_2^+ \rightarrow 5/2_1^+$	
	PQPCV	EXACT	ACS	PQPCV	EXACT
^{133}Cs	7.8	8.8	12.9	0.3	0.3
^{135}Cs	8.1	6.9	8.4	0.3	0.1

CAPÍTULO VI. DISCUSSÕES E CONCLUSÕES

As discussões e conclusões apresentadas neste capítulo estão expressas de forma detalhada nas seções III.3.c, 4.c, 5.c, 6.c, IV.3.c, 4.c, 5.c, 6 e V.5.c, 6.

Cálculos comparativos entre aproximações ao modelo de camadas apresentam, geralmente, algumas limitações importantes, decorrentes da dificuldade de se ter um cálculo "exato" como referência, e/ou da impossibilidade de se empregar o mesmo conjunto de parâmetros devido ao emprego de interações residuais distintas.

Na primeira parte do nosso trabalho, apresentamos a primeira comparação sistemática e completa, para sistemas com várias partículas de valência ($n=3,5,7$ e 9), entre aproximações no espaço de uma e três quasipartículas dentro da aproximação BCS. Tomamos como referência o cálculo com o modelo de camadas completo ou truncado em desemparelhamento ($v \leq 3$), empregando o mesmo conjunto de parâmetros e a mesma interação residual (SDI), considerando situações físicas realistas. Embora nosso interesse esteja na comparação entre os resultados teóricos, várias previsões podem ser feitas a partir dos nossos resultados sobre as indeterminações experimentais existentes para os núcleos considerados.

Anteriormente, estudos comparativos no espaço de $1QP+3QP$ foram feitos somente por Otaviani e Savoia⁷⁾ no cálculo do espectro do ^{117}Sn com as aproximações BCS e PBCS; e por H. Dias e F. Krmpotić^{14,15)} no cálculo dos espectros e propriedades eletromagnéticas para os isótonos com $N=82$ com BCS, BBCS, PBCS e PBBCS, onde as aproximações foram

comparadas ao MC só para o sistema com 3 partículas de valência.

Malgrado a dificuldade de avaliar-se como entram em jogo de forma individual as correções introduzidas pelo efeito de *blocking* e a projeção em número de partículas, a análise qualitativa desenvolvida em nosso trabalho, tanto com o caroço inerte como com ACQPV, permite uma compreensão clara do efeito das correções introduzidas em BCS, especialmente com BBCS, e proporciona um método simples para o exame das diferenças mais específicas.

Da análise dos espectros e das propriedades eletromagnéticas dos isótopos do Níquel e dos isótonos com $N=82$, chegamos às conclusões apresentadas a seguir.

Em relação aos graus de liberdade não considerados, observamos que a influência das componentes de $\nu=5$ é relevante nos estados presentes a partir de aproximadamente 1.50 MeV de energia de excitação; mais precisamente, nos isótopos do Níquel, a partir da 2ª solução com $\nu \approx 3$ de cada *spin* e, nos isótonos com $N=82$, a partir da 3ª solução com $\nu \approx 3$ de cada *spin*. Isto indica que as correlações de 5QP ($\nu=5$) em baixo espectro são menos relevantes para os núcleos mais pesados. Ainda, a influência das correlações de 5QP ($\nu=3$) é desprezível em baixo espectro, e a base de BCS com 1QP+3QP é uma excelente aproximação para o cálculo com o modelo de camadas truncado em desemparelhamento ($\nu \leq 3$), MC3.

Com respeito às correções introduzidas em BCS, observamos que o efeito de *blocking* é importante, especialmente para a descrição das propriedades dos estados de $\nu=3$. O emprego da aproximação BECS conduz a resultados bastante semelhantes a PBCS, exceto em alguns casos, onde a quan

tidade examinada varia abruptamente de um isótopo para outro, como observado no cálculo das taxas BE2 dos isótonos com $N=82$. A aproximação PBCS é mais adequada para a descrição das propriedades específicas de um dado núcleo, independente do comportamento médio dessas propriedades. Contudo, o formalismo com PBCS é pouco transparente fisicamente, e seu emprego é insuficiente para a descrição das propriedades eletromagnéticas dos estados de $v \approx 3$.

Na segunda parte do nosso trabalho, os graus de liberdade coletivos do caroço foram introduzidos através do acoplamento quasipartícula-*cluster*-vibrador, e quatro versões para o ACQPV foram derivadas. Anteriormente, K. Allart e outros³⁸⁾ empregaram o acoplamento ACQPV, porém, apenas o efeito da projeção em número de partículas foi considerado. Apresentamos em nosso trabalho a primeira versão para o ACQPV com o efeito de *blocking* incluído no *cluster*, de tal forma que, o nosso formalismo possibilita tanto a inclusão de *blocking* como a projeção em número de partículas.

As versões com *blocking* BQPCV e com PQPCV foram aplicadas aos isótopos do Zinco. Nenhum ajuste de parâmetro foi efetuado; estes foram fixados a partir dos dados experimentais e dos valores empregados na referência 101. A única variação, é claro, é o número de partículas de valência. Da comparação dos espectros e das propriedades eletromagnéticas observamos que os resultados com ambas versões são semelhantes. Os resultados foram também comparados aos obtidos com o modelo de camada MC³⁹⁾, revelando um bom acordo para os espectros em baixa energia e para as propriedades eletromagnéticas, exceto para as taxas BM1 para as quais se faz necessário introduzir em nossos cálculos o operador $[Y_2 \otimes \vec{S}_1]$.

Ainda, os resultados se mostraram extremamente sensíveis ao corte da base com ACQPV, indicando a necessidade de critérios mais elaborados para esse procedimento de simplificação.

A versão projetada PQPCV foi aplicada aos isótopos do Césio na descrição do acoplamento anômalo $I=j-1$. Nenhum ajuste de parâmetro foi efetuado. Os valores foram os mesmos empregados com o caroço inerte, e para o vibrador tomamos as energias experimentais, o único parâmetro não fixo, e a intensidade de acoplamento partícula-vibrador fixada a partir do valor empregado na referência 40. Verificamos que a natureza coletiva do estado gerado por esse tipo de acoplamento é qualitativamente reproduzida com o ACQPV.

Para o acoplamento ACQPV, as limitações verificadas com *blocking* e com projeção no cálculo das propriedades eletromagnéticas são apreciavelmente menos relevantes. Uma vez que, nesse caso, para as transições elétricas a contribuição coletiva é largamente dominante ($\sim 80\%$)²¹). Portanto, na descrição das propriedades dos estados presente em baixo espectro dos núcleos esféricos par-ímpar, considerando o acoplamento ACQPV, é suficiente o emprego da versão com *blocking*, BQPCV, introduzida em nosso trabalho.

APÊNDICE A. ELEMENTOS DE MATRIZ E OUTRAS EXPRESSÕES NECESSÁRIAS AO CÁLCULO DE ESPECTROS NUCLEARES E TRANSIÇÕES ELETROMAGNÉTICAS

A.1. OS OPERADORES E A BASE DE QUASE-PARTÍCULAS

A fim de calcular os elementos de matriz do hamiltoniano do modelo de camadas,

$$H = \sum_{\alpha} \varepsilon_{\alpha} c_{\alpha}^{+} c_{\alpha} + \frac{1}{4} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle \alpha\beta | V | \gamma\delta \rangle_a c_{\alpha}^{+} c_{\beta}^{+} c_{\delta} c_{\gamma}, \quad (\text{A.1})$$

e do operador de um corpo

$$T_{\lambda\mu} = \sum_{\alpha\beta} \langle \alpha | T_{\lambda\mu} | \beta \rangle c_{\alpha}^{+} c_{\beta}, \quad (\text{A.2})$$

onde c_{α}^{+} (c_{α}) é o operador de criação (destruição) de partícula, $\alpha \equiv (j_a, m_a)$ e $\bar{\alpha} = (-)^{j_a - m_a} (j_a, -m_a)$, introduzimos simultaneamente o efeito de *blocking* e a projeção em número de partículas através da transformação canônica¹⁵⁾:

$$d_{\alpha} = \sqrt{\sigma_a} (u_a c_{\alpha} - z v_a c_{\bar{\alpha}}^{+}), \quad (\text{A.3})$$

$$d_{\alpha}^{*} = \sqrt{\sigma_a} (u_a' c_{\alpha}^{+} - z v_a' c_{\bar{\alpha}}),$$

com

$$\sigma_a = (u_a u_a' + z^2 v_a v_a')^{-1}. \quad (\text{A.4})$$

onde (u_a, v_a) e (u_a', v_a') são os parâmetros de BCS nos estados

de *ket* e nos estados de *bra*, respectivamente, e o símbolo * denota a conjugação hermitiana (\dagger) mais a transformação $(u_a, v_a) \Leftrightarrow (u'_a, v'_a)$. É fácil ver que:

$$\{d_\alpha^*, d_\beta\} = \delta_{\alpha\beta}, \quad (\text{A.5})$$

e

$$d_\alpha |0; z\rangle = \langle 0; z | d_\alpha^* = 0, \quad (\text{A.6})$$

onde

$$|0; z\rangle = \prod_{\alpha>0} (u_a + z v_a c_\alpha^+ c_\alpha^+) |0\rangle, \quad (\text{A.7})$$

e $|0\rangle$ representa o vácuo de partícula.

Por meio da transformação inversa:

$$c_\alpha^+ = \sqrt{\sigma_a} (u_a d_\alpha^* + z v_a' d_{\bar{\alpha}}), \quad (\text{A.8})$$

$$c_\alpha = \sqrt{\sigma_a} (u_a' d_\alpha + z v_a d_{\bar{\alpha}}^*),$$

podemos reescrever o hamiltoniano do modelo de camadas, como:

$$H = H_{00} + H_{11} + H_{20} + H_{20}^* + H_{22} + H_{31} + H_{31}^* + H_{40} + H_{40}^*, \quad (\text{A.9})$$

com

$$H_{00} = \sum_a \hat{a}^2 \sigma_a z^2 [v_a v_a' (\epsilon_a - \frac{1}{2} u_a) - \frac{1}{2} u_a v_a' \Delta_a], \quad (\text{A.10})$$

$$H_{11} = - \sum_a \hat{\alpha} \sigma_a [(u_a u'_a - z^2 v_a v'_a) (\epsilon_a - \mu_a) + z^2 (u_a v'_a \Delta_a + u'_a v_a \Delta'_a)] \bar{D}_{00}(aa), \quad (A.11)$$

$$H_{20} = \sum_a \hat{\alpha} \sigma_a [z u_a v_a (\epsilon_a - \mu_a) - \frac{1}{2} (u_a^2 \Delta_a - z^2 v_a^2 \Delta'_a)] D_{00}^*(aa), \quad (A.12)$$

$$H_{22} = \frac{1}{8} \sum_{abcdJM} (\sigma_a \sigma_b \sigma_c \sigma_d)^{1/2} \{ (u_a u_b u'_c u'_d + z^4 v_a v_b v'_c v'_d) g_J(abcd) + 4z^2 u_a v_b u'_c u'_d f_J(abcd) \} D_{JM}^*(ab) D_{JM}(cd), \quad (A.13)$$

$$H_{31} = - \frac{1}{4} \sum_{abcdJM} (\sigma_a \sigma_b \sigma_c \sigma_d)^{1/2} z g_J(bacd) (u_a u_b u'_c v'_d - z^2 v_a v_b v'_c v'_d) \times (-)^{J+M} D_{J-M}^*(ba) \bar{D}_{JM}(cd), \quad (A.14)$$

$$H_{40} = - \frac{1}{8} \sum_{abcdJM} (\sigma_a \sigma_b \sigma_c \sigma_d)^{1/2} z^2 g_J(bacd) u_a u_b v_c v'_d (-)^{J+M} D_{J-M}^*(ba) D_{JM}^*(cd), \quad (A.15)$$

onde os operadores $\bar{D}_{JM}(ab)$ e $D_{JM}^*(ab)$ são definidos como

$$\bar{D}_{JM}(ab) = \sum_{m_\alpha m_\beta} (j_a m_a j_b m_b | JM) d_{\beta \alpha}^* d_{-}, \quad (A.16)$$

e

$$D_{JM}^*(ab) \equiv [D_{JM}(ab)]^* = \sum_{m_\alpha m_\beta} (j_a m_a j_b m_b | JM) d_{\beta \alpha}^* d_{-}^*. \quad (A.17)$$

Os parâmetros de *gap* Δ_a e os potenciais químicos μ_a são dados por:

$$\Delta_a = -\frac{z}{4} \hat{a}^{-1} \sum_a \hat{c} g_0(aacc) \sigma_c v_c u_c', \quad (\text{A.18})$$

e

$$\mu_a = -\frac{z}{2} \hat{a}^{-1} \sum_c \hat{c} f_0(aacc) \sigma_c v_c v_c'. \quad (\text{A.19})$$

com

$$\hat{a}^2 \equiv (2j_a + 1) \quad (\text{A.20})$$

As quantidades $f_J(abcd)$ e $g_J(abcd)$ são os elementos de matriz antissimetrizadas da interação efetiva.

Do mesmo modo o operador transição (A.2) toma a forma:

$$\begin{aligned} T_{\lambda\mu} = & -\hat{\lambda}^{-1} \sum_{ab} \sqrt{\sigma_a \sigma_b} \langle a || T_\lambda || b \rangle \{ [(-)^x u_a u_b' - z^2 v_a' v_b] \bar{D}_{\lambda\mu}(ab) \\ & + \frac{1}{2} z [u_a v_b + (-)^x v_a u_b] D_{\lambda\mu}^*(ab) \\ & + \frac{1}{2} z [v_a' v_b' + (-)^x v_a' v_b'] D_{\lambda\bar{\mu}}(ab) \\ & + \delta_{\lambda 0} \delta_{\mu 0} \sum_a \hat{a} v_a v_a' \sigma_a \langle a || T_\lambda || a \rangle, \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$

onde para os operadores elétricos $\chi=0$, e para os magnéticos $\chi=1$.

As funções geratrizes para os estados com uma quase-partícula (II.41) e três quase-partículas (II.42) são reescritas, respectivamente, como:

$$|\alpha; z\rangle = \sqrt{\sigma_a} z d_\alpha^* |0, z\rangle, \quad (\text{A.22})$$

e

$$\begin{aligned} |[(ab)J, c; IM; z\rangle = \sqrt{\sigma_a \sigma_b \sigma_c} \{z^3 \sum_{mm_Y} (JMj_c m_Y | IM) d_Y^* D_{JM}^* (ab) \\ - z^2 H(abJc, I) d_{IM}^* \} |0; z\rangle, \end{aligned} \quad (\text{A.23})$$

onde

$$\begin{aligned} H(abJc; I) = \delta_{J0} \delta_{ab} \delta_{cI} \hat{a}(u_a v_a' z^2 - v_a u_a') \\ - \hat{J} \hat{I}^{-1} \delta_J(ab; cI) (u_c v_c' z^2 - v_c u_c'), \end{aligned} \quad (\text{A.24})$$

e

$$\delta_J(ab, cd) = \delta_{ac} \delta_{bd} - (-)^{J+j_a+j_b} \delta_{ad} \delta_{bc}. \quad (\text{A.25})$$

A.2. OS ELEMENTOS DE MATRIZ E OS PRODUTOS ESCALARES

Por meio da técnica das funções geratrizes⁷⁾, os elementos de matriz são obtidos das relações anteriores, e das relações II.46, II.47 e II.48. Para o hamiltoniano (A.9) temos os seguintes elementos de matriz:

$$\langle \phi_{2p+1}(\alpha) | H | \phi_{2p+1}(\alpha) \rangle = R_0^{2p}(a) + R_{11}^{2p}(aa) \quad (\text{A.26})$$

$$\langle \phi_{2p+1}(JM) | H | \phi_{2p+1}(abJ_1c, JM) \rangle =$$

$$\begin{aligned} & \hat{a} \delta_{J_1 0} \delta_{cJ} [v_a u'_a (R_0^{2p}(aJ) + R_{11}^{2p}(JJa)) - u_a v'_a (R_0^{2p-2}(aJ) + R_{11}^{2p-2}(JJa))] - \\ & - \hat{J}_1 \hat{J}^{-1} \delta_{J_1} (ab; cJ) [v_c u'_c (R_0^{2p}(cJ) + R_{11}^{2p}(JJc)) - u_c v'_c (R_0^{2p-2}(cJ) + R_{11}^{2p-2}(JJc))] + \\ & + \delta_{J_1 0} \delta_{Jc} R_{02}^{2p}(aac) - \hat{J}_1 \hat{a}^{-1} \hat{b}^{-1} \delta_{J_1} (ab; cJ) R_{02}^{2p}(ccJ) + R_{13}^{2p}(abcJJ_1) \quad (A.27) \end{aligned}$$

$$\langle \phi_{2p+1}(abJ_1c, JM) | H | \phi_{2p+1}(de J_1'f, JM) \rangle =$$

$$\begin{aligned} & - \{ \delta_{J_1 0} \delta_{fJ} (u_a v'_a R_{20}^{2p-2}(dadJ) - v_a u'_a R_{20}^{2p}(dadJ)) - \hat{J}_1 \hat{d}^{-1} \hat{e}^{-1} \delta_{J_1} (de; fJ) (u_a v'_a R_{20}^{2p-2}(fafJ) - \\ & - v_a u'_a R_{20}^{2p}(fafJ)) + u_a v'_a R_{13}^{2p-2}(de fJaJ_1') - v_a u'_a R_{13}^{2p}(de fJaJ_1') \} \hat{a} \delta_{J_1 0} \delta_{cJ} + \\ & + [a \leftrightarrow c] \hat{J}_1 \hat{J}^{-1} \delta_{J_1} (ab; cJ) + \{ d \leftrightarrow a, e \leftrightarrow b, c \leftrightarrow f, J_1 \leftrightarrow J_1', u \leftrightarrow u', v \leftrightarrow v' \} + \\ & \hat{d} \hat{a} \delta_{J_1 0} \delta_{J_1 0} \delta_{fJ} \delta_{cJ} [u'_a v_a u'_d v'_d (R_0^{2p-4}(adJ) + R_{11}^{2p-4}(JJad)) - \\ & - (v'_a u_a u'_d v'_d + u'_a v_a v'_d u'_d) (R_0^{2p-2}(adJ) + R_{11}^{2p-2}(JJad)) + v'_a u_a v'_d u'_d (R_0^{2p}(adJ) + \\ & + R_{11}^{2p}(JJad))] - \hat{d} \delta_{J_1 0} \delta_{fJ} \hat{J}_1 \hat{J}^{-1} \delta_{J_1} (ab; cJ) [a \leftrightarrow c] + \\ & - \hat{a} \delta_{J_1 0} \delta_{cJ} \hat{J}_1 \hat{J}^{-1} \delta_{J_1} (de; fJ) [d \leftrightarrow f] + \hat{J}_1 \hat{J}_1 \hat{J}^{-2} \delta_{J_1} (de; fJ) \delta_{J_1} (ab; cJ) [a \leftrightarrow c, d \leftrightarrow f] + \\ & + D_3(abJ_1c, de J_1'f, J) [R_0^{2p-2}(abc) + R_{11}^{2p-2}(aabc) + R_{11}^{2p-2}(babac) + R_{11}^{2p-2}(cabac)] + \\ & + \delta_{cf} \delta_{J_1 J_1'} R_{22}^{2p}(abde J_1 f) - \hat{P}(de J_1) \{ \delta_{ce} (-)^{J_1 + J_1' + J + d} \hat{J}_1 \hat{J}_1 W(edJf; J_1 J_1) R_{22}^{2p}(abdfJ_1 c) \} - \\ & - \hat{P}(abJ) \{ a \leftrightarrow d, b \leftrightarrow e, c \leftrightarrow f, J_1 \leftrightarrow J_1' \} + \\ & + \sum_{J''} \hat{P}(abJ_1) \hat{P}(de J_1') [\delta_{ad} \hat{J}_1 \hat{J}_1 \hat{J}''^2 W(abJc; J_1 J'') W(de Jf; J_1 J'') R_{22}^{2p}(bcefJ''a)] \end{aligned}$$

As quantidades R são definidas por:

$$R_0^K(p \dots t) = \sum_a \hat{a}^2 v_a v'_a \varepsilon_a I^{K-2}(ap \dots t) + \\ + \frac{1}{8} \sum_{ab} \hat{a} \hat{b} [2v_a v'_a v_b v'_b f_0(aabb) I^{K-4}(abp \dots t) + u_a v'_a u'_b v_b g_0(aabb) I^{K-2}(abp \dots t)] \quad (A.29)$$

$$R_{20}^K(pp' \dots t) = -2\hat{p} u_p v_p \varepsilon_p I^{K-2}(pp' \dots t) - \\ - \frac{1}{4} \sum_a \hat{a} \{4u_p v_p v'_a v'_a f_0(aapp) I^{K-4}(app' \dots t) - g_0(aapp) [v_p^2 v'_a u'_a I^{K-4}(app' \dots t) - \\ - u_p^2 v'_a u'_a I^{K-2}(app' \dots t)]\} \quad (A.30)$$

$$R_{02}^K(pp' \dots t) = -2\hat{p} u'_p v'_p I^{K-2}(pp' \dots t) - \\ - \frac{1}{4} \sum_a \hat{a} \{4u'_p v'_p v'_a v'_a f_0(aapp) I^{K-4}(app' \dots t) - g_0(aapp) [v_p'^2 v'_a u'_a I^{K-4}(app' \dots t) - \\ - u_p'^2 v'_a u'_a I^{K-2}(app' \dots t)]\} \quad (A.31)$$

$$R_{11}^K(pp' \dots t) = \varepsilon_p [u'_p u_p I^K(pp' \dots t) - v'_p v_p I^{K-2}(pp' \dots t)] + \\ + \frac{1}{2} \sum_a \hat{a} \hat{p}^{-1} \{v_a v'_a f_0(aapp) [u'_p u_p I^{K-2}(app' \dots t) - v'_p v_p I^{K-4}(app' \dots t)] - \\ - g_0(aapp) I^{K-2}(app' \dots t) [u_a v'_a u'_p v_p + u'_a v_a u_p v'_p]\} \quad (A.32)$$

$$R_{22}^K(pp'qq'Js) = \frac{1}{8} \hat{P}(pp'J)\hat{P}(qq'J) \{ [u_p u_p, u_q' u_q', I^{K-2}(pp'qq's) + \\ + v_p v_p, v_q' v_q', I^{K-4}(pp'qq's)] g_J(pp'qq') + 4v_p u_p, v_q' u_q', I^{K-4}(pp'qq') f_J(pp'qq') \} \quad (A.33)$$

$$R_{13}^K(pp'qq' \dots tJ) = \frac{1}{2} \hat{J}\hat{q}'^{-1} \{ [u_p u_p, u_q' v_q' I^{K-2}(p \dots t) - v_p v_p, v_q' u_q' I^{K-4}(p \dots t)] \\ g_J(pp'qq') + (-)^{J+q+q'} f_J(pp'q'q) [u_p u_q u_q', v_p, I^{K-2}(p \dots t) - v_p v_q v_q', u_p, I^{K-4}(p \dots t)] - \\ - f_J(pp'qq') [u_p, u_q u_q', v_p I^{K-2}(p \dots t) - v_p, v_q v_q', u_p I^{K-4}(p \dots t)] \} \quad (A.34)$$

onde W é o coeficiente de Racah, o operador D_3 é definido por:

$$D_3(abJ_1c, deJ_1'f, J) = \delta_{cf} \delta_{J_1J_1'} \delta_{J_1}(ab, de) \\ + \sqrt{(2J_1+1)(2J_1'+1)} [\delta_{ce} (-)^{J_1+J_1'+3J+d} W(edJf, J_1'J_1) \delta_{J_1}(ab, df) \\ + \delta_{cd} (-)^{J_1+3J+d} W(deJf, J_1'J_1) \delta_{J_1}(ab, ef)] , \quad (A.35)$$

o operador \hat{P} é definido por:

$$\hat{P}(abJ) = [1 - (-)^{J+a+b} (a \leftrightarrow b)] , \quad (A.36)$$

a notação $\{a \leftrightarrow b\}$ representa a expressão precedente $\{\dots\}$ com a substituído por b e vice-versa, e as integrais de resíduo I^K são definidas pela relação (A.46).

Para o operador de um corpo (A.21) de grau λ ($\lambda \neq 0$), obtemos os seguintes elementos de matriz reduzidos:

$$\langle \phi_{2p+1}(\alpha) \parallel T_\lambda \parallel \phi_{2p+1}(\beta) \rangle = \langle a \parallel T_\lambda \parallel b \rangle.$$

$$[u_a u'_b I^{2p}(ab) - (-)^x v_a v'_b I^{2p-2}(ab)] \tag{A.37}$$

$$\langle \phi_{2p+1}(\rho) \parallel T_\lambda \parallel \phi_{2p+1}(deJ_1 f, JM) \rangle =$$

$$\begin{aligned} & \{-\tilde{J}(-)^x [\delta_{\lambda J_1} \delta_{fr} \hat{\lambda}^{-1} \langle d \parallel T_\lambda \parallel e \rangle (u'_d v'_e + (-)^x v'_d u'_e) + \\ & + \tilde{J}_1 \hat{P}(de J) \delta_{dr} \begin{Bmatrix} d & e & J_1 \\ f & J & \lambda \end{Bmatrix} \langle f \parallel T_\lambda \parallel e \rangle (u'_f v'_e + (-)^x v'_f u'_e)] I^{2p-2}(def) + \\ & + (-)^x \langle r \parallel T_\lambda \parallel J \rangle \cdot [\delta_{J_1 0} \delta_{de} \delta_{fJ} \hat{d} \{ (-)^x u_r u'_J [v_d u'_d I^{2p}(drJ) - u_d v'_d I^{2p-2}(drJ)] + \\ & - v_r v'_J [v_d u'_d I^{2p-2}(drJ) - u_d v'_d I^{2p-4}(drJ)] + \\ & - \tilde{J}_1 \tilde{J}^{-1} \{ (-)^x u_r u'_J [v_f u'_f I^{2p}(frJ) - u_f v'_f I^{2p-2}(frJ)] + \\ & - v_r v'_J [v_f u'_f I^{2p-2}(frJ) - u_f v'_f I^{2p-4}(frJ)] \} \hat{P}(de J_1) \delta_{df} \delta_{eJ}] \} \end{aligned} \tag{A.38}$$

$$\langle \phi_{2p+1}(abJ_1 c; \rho) \parallel T_\lambda \parallel \phi_{2p+1}(JM) \rangle =$$

$$= (-)^{r-J+\lambda+x} \{ a \leftrightarrow d, b \leftrightarrow e, c \leftrightarrow f, J_1 \leftrightarrow J_1, r \leftrightarrow J, u \leftrightarrow u', v \leftrightarrow v' \} \tag{A.39}$$

$$\langle \phi_{2p+1}(abJ_1 c, JM) \parallel T_\lambda \parallel \phi_{2p+1}(de J_1 f, J'M) \rangle =$$

$$-\tilde{J} \tilde{J}' \tilde{J}_1 \tilde{J}'_1 \hat{P}(abJ_1) \hat{P}(de J_1) \langle d \parallel T_\lambda \parallel a \rangle [(-)^x u_a u'_d I^{2p-2}(adef) - v_a v'_d I^{2p-4}(adef)] \cdot$$

$$\begin{aligned}
 & \cdot [\delta_{cf} \delta_{be} (-)^{J'-c+d+e+\lambda+J_1+J_1'} \left\{ \begin{matrix} \lambda & J_1 & J_1' \\ c & J' & J \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} \lambda & J_1 & J_1' \\ b & d & a \end{matrix} \right\} + \\
 & + \delta_{ce} \delta_{bf} (-)^{a+J+c+b} \left\{ \begin{matrix} a & b & J_1 \\ d & J_1' & c \\ \lambda & J' & J \end{matrix} \right\} + \\
 & - \hat{J} \hat{J}' \hat{J}_1 \hat{J}_1' \{ \hat{P}(abJ_1) \langle f \| T_\lambda \| a \rangle [(-)^{X_u u'_f I} 2^{p-2} (abcf) - v_a v'_f I 2^{p-4} (abcf)] \cdot \\
 & (-)^{a-J+J_1'} \left\{ \begin{matrix} J' & f & J_1' \\ a & J & \lambda \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} a & b & J_1 \\ c & J & J_1' \end{matrix} \right\} \hat{P}(deJ_1') \delta_{cd} \delta_{be} \} + \\
 & - \hat{J} \hat{J}' \hat{J}_1 \hat{J}_1' (-)^{J-J'+\lambda+X} \{ a \leftrightarrow d, b \leftrightarrow e, c \leftrightarrow f, J_1 \leftrightarrow J_1', J' \leftrightarrow J \} + \\
 & - \hat{J} \hat{J}' \delta_{J_1 J_1'} (-)^{c-J+J_1'} \langle f \| T_\lambda \| c \rangle [(-)^{X_u u'_f I} 2^{p-2} (abcf) - v_c v'_f I 2^{p-4} (abcf)] \cdot \\
 & \left\{ \begin{matrix} J' & f & J_1' \\ c & J' & \lambda \end{matrix} \right\} \hat{P}(de J_1') \delta_{ad} \delta_{be} + \\
 & - \{ \hat{J}' (-)^{X} [\delta_{\lambda J_1'} \delta_{fJ} \hat{\lambda}^{-1} \langle d \| T_\lambda \| e \rangle (u'_d v'_e + (-)^{X_{v'_d u'_e}}) + \\
 & + \hat{J}_1' \hat{P}(deJ_1') \delta_{dJ} \left\{ \begin{matrix} d & e & J_1' \\ f & J' & \lambda \end{matrix} \right\} \langle f \| T_\lambda \| e \rangle (u'_f v'_e + (-)^{X_{v'_f u'_e}})] \cdot \\
 & \cdot [\delta_{J_1 0} \delta_{ab} \delta_{cJ} \hat{a}(v'_a u_a I 2^{p-2} (deaf) - u'_a v_a I 2^{p-4} (deaf)) \\
 & - \hat{J}_1 \hat{J}^{-1} (v'_c u_c I 2^{p-2} (decf) - u'_c v_c I 2^{p-4} (decf)) \hat{P}(abJ_1) \delta_{ac} \delta_{bJ}] \} + \\
 & - (-)^{J-J'+\lambda+X} \{ a \leftrightarrow d, b \leftrightarrow e, c \leftrightarrow f, J_1 \leftrightarrow J_1', J \leftrightarrow J', u \leftrightarrow u', v \leftrightarrow v' \} + \\
 & + (-)^{J-J''+\lambda} \langle J' \| T_\lambda \| J \rangle \cdot \{ \delta_{J_1 0} \delta_{J_1' 0} \delta_{ab} \delta_{de} \delta_{cJ} \delta_{fJ'} \hat{a} N(ad) +
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & -\delta_{J_1 0} \delta_{ab} \delta_{cJ} \hat{a} \hat{J}_1 \hat{J}^{-1} \hat{P}(de J_1) \delta_{df} \delta_{eJ} N(af) + \\
 & -\delta_{J_1 0} \delta_{de} \delta_{fJ} \hat{d} \hat{J}_1 \hat{J}^{-1} \hat{P}(ab J_1) \delta_{ac} \delta_{bd} N(cd) + \\
 & + \hat{J}_1 \hat{J}_1 \hat{J}^{-1} \hat{J}^{-1} \hat{P}(ab J_1) \hat{P}(de J') \delta_{ac} \delta_{bJ} \delta_{df} \delta_{eJ} N(cf) \} \tag{A.40}
 \end{aligned}$$

onde

$$\begin{aligned}
 N(ad) = & (-)^x u_{J J'} u_{J'}^a, [u_{a a}^a v_{d d}^a I^{2p-4}(ad J J') - (u_{a a}^a v_{d d}^a + v_{a a}^a u_{d d}^a) I^{2p-2}(ad J J') + \\
 & + v_{a a}^a u_{d d}^a I^{2p}(ad J J')] - v_{J J'} v_{J'}^a, [u_{a a}^a v_{d d}^a I^{2p-6}(ad J J') - \\
 & - (u_{a a}^a v_{d d}^a + v_{a a}^a u_{d d}^a) I^{2p-4}(ad J J') + v_{a a}^a u_{d d}^a I^{2p-2}(ad J J')] \tag{A.41}
 \end{aligned}$$

Os produtos escalares pertinentes são dados por:

$$\langle \phi_{2p+1}(\alpha) | \phi_{2p+1}(\alpha) \rangle = I^{2p}(a) \tag{A.42}$$

$$\begin{aligned}
 \langle \phi_{2p+1}(JM) | \phi_{2p+1}(ab J_1 c, JM) \rangle = & \delta_{J_1 0} \delta_{cJ} \hat{a} [v_{a a}^a u_{a a}^a I^{2p}(ac) - u_{a a}^a v_{a a}^a I^{2p-2}(ac)] + \\
 & - \hat{J}_1 \hat{J}^{-1} \delta_{J_1} (ab; cJ) [v_{c c}^c u_{c c}^c I^{2p}(ab) - u_{c c}^c v_{c c}^c I^{2p-2}(ab)] \tag{A.43}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \langle \phi_{2p+1}(ab J_1 c; JM) | \phi_{2p+1}(de J_1 f; JM) \rangle = & I^{2p-2}(abc) D_3(ab J_1 c, de J_1 f, J) + \\
 & + \hat{a} \hat{d} \delta_{J_1 0} \delta_{J_1 0} \delta_{cJ} \delta_{fJ} M(adc) - \hat{a} \hat{d} \delta_{J_1 0} \delta_{cJ} \hat{J}_1 \hat{J}^{-1} \delta_{J_1} (de, fJ) M(afe) + \\
 & - \hat{d} \delta_{J_1 0} \delta_{fJ} \hat{J}_1 \hat{J}^{-1} \delta_{J_1} (ab; cJ) M(cda) + \hat{J}_1 \hat{J}_1 \hat{J}^{-2} \delta_{J_1} (de; fJ) \delta_{J_1} (ab; cJ) M(cfJ) \tag{A.44}
 \end{aligned}$$

onde

$$\begin{aligned}
 M(\text{adc}) = & u'_a v_a u'_d v'_d I^{2p-4}(\text{adc}) - (u'_a v_a v'_d u'_d + v'_a u'_a u'_d v'_d) I^{2p-2}(\text{adc}) \\
 & + v'_a u'_a v'_d u'_d I^{2p}(\text{adc})
 \end{aligned} \tag{A.45}$$

Nos cálculos numéricos as integrais de resíduo definidas por:

$$I^K(\text{pq} \dots t) = \frac{1}{2\pi i} \oint dz z^{-K-1} (\sigma_a \sigma_b \dots \sigma_t) \prod_{\alpha>0} (u'_a u'_a + z^2 v'_a v'_a) \tag{A.46}$$

são estimadas por somas finitas $L^K(\text{pq} \dots t)$ definidas por⁹⁾:

$$L^K(\text{pq} \dots t) = \frac{1}{M} \{ 1 + 2 \sum_{m=1}^{(M-1)/2} \text{Real}[(z_m)^{-K} (\sigma_a \sigma_b \dots \sigma_t) \prod_{\alpha>0} (u'_a u'_a + z^2 v'_a v'_a)] \} \tag{A.47}$$

onde

$$z_m = \exp(i\pi m/M) \tag{A.48}$$

e M é um número ímpar. A aplicação da soma L^K remove todas as contribuições da função de onda exceto daquelas com o número de partículas $2p+1, 2p+1 \pm M, 2p+1 \pm 2M, \dots$. Assim, se M é suficientemente grande*, somente as componentes com $2p+1$ partículas contribuem.

Finalmente, das relações anteriores, obtemos diretamente as expressões específicas, para cada um dos tratamentos empregados, impondo as seguintes condições:

$$\text{PBCS: } u'_a = u_a, v'_a = v_a;$$

$$\text{BBCS: } z = 1$$

$$\text{BCS: } u'_a = u_a, v'_a = v_a, \text{ e } z = 1.$$

A.3. ALGUMAS EXPRESSÕES EXPLÍCITAS DO ELEMENTO DE MATRIZ DO OPERADOR DE UM CORPO

A fim de ilustrar a independência dos elementos de matriz, dos particulares parâmetros de emparelhamento, nos casos em que as respectivas equações de *gap* apresentam indeterminação, veja a seção II.3, apresentmos, a seguir, as expressões explícitas com o operador transição T_λ , para dois desses casos:

- estado $|\psi(a)\rangle$ com $ja = \frac{1}{2}$:

$$\langle \psi(a) || T_\lambda || \psi(aa \text{ o } b;b) \rangle = \hat{a} (u'_b v_a + (-)^x v'_b u_a) \langle a || T_\lambda || b \rangle I^{2p}(ab) \quad (\text{A.49})$$

- estado $|\psi(bb \text{ o } a;a)\rangle$ com $ja = \frac{1}{2}$:

$$\begin{aligned} \langle \psi(bb \text{ o } a;a) || T_\lambda || \psi(aa \text{ o } b;b) \rangle = & (-)^x \sqrt{2} \{ 2\hat{b}^{-1} (-)^x u_b u_a - v_b v_a \} I^{2p-2}(abb) \\ & + \hat{b} [u'_a v'_b u_b v_a I^{2p}(abb) + ((-)^x v_b'^2 u_b u_a - u_b'^2 v_b v_a) I^{2p-2}(abb) - (-)^x u_b' v'_b v_b u_a I^{2p-4}(abb)] \} \end{aligned} \quad (\text{A.50})$$

* Em nossos cálculos foi suficiente empregar $M=11$.

Essa característica se constitui num critério útil para a verificação das fórmulas e num teste importante para os códigos de computação.

APÊNDICE B. OS ELEMENTOS DE MATRIZ DA INTERAÇÃO RESIDUAL

Neste trabalho, empregamos como interação residual a interação delta de superfície⁵⁷⁾ (SDI). A sua extrema simplicidade - só contém um parâmetro e não envolve nenhuma integral radial - facilita sobremaneira a análise de métodos aproximativos aos cálculos de modelo de camadas mais complexos, permitindo que se tenha uma solução "exata" como referência. O seu sucesso na descrição de várias propriedades nucleares, em cálculos com o modelo de camadas em diferentes regiões de massa⁵⁷⁾, justifica plenamente sua utilização.

Supondo que a força de dois corpos é do tipo delta, a interação tem lugar somente na superfície nuclear, e que a probabilidade de encontrar a partícula na superfície nuclear independa da partícula órbita em que ela se encontra, podemos expressá-la por:

$$V_{SDI}(1,2) = -4\pi G \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \delta(r_1 - R_0), \quad (B.1)$$

onde \vec{r}_1 e \vec{r}_2 são os vetores posição das partículas interagentes, R_0 é o raio nuclear e G é a intensidade da interação.

Com SDI, o elemento de matriz partícula-partícula é dado simplesmente por (+):

$$g_J(abcd) = G \tilde{a} \tilde{b} \tilde{c} \tilde{d} (-)^{l_a + l_c + j_b + j_d} i^{l_c + l_d - l_a - l_b} \begin{pmatrix} j_a & j_b & J \\ 1/2 & -1/2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_c & j_d & J \\ 1/2 & -1/2 & 0 \end{pmatrix} \times [1 + (-)^{l_c + l_d + J}] \quad (B.2)$$

onde para G , o único parâmetro ajustável da força, a estimativa de Kisslinger e Sorensen²¹⁾,

$$G = 25/A, \quad (\text{B.3})$$

costuma ser adequada. O elemento de matriz partícula-buraco pode ser obtido diretamente da relação:

$$f_J(abcd) = - \sum_{J'} (2J'+1) \left\{ \begin{matrix} a & b & J \\ c & d & J' \end{matrix} \right\} g_{J'}(adcb), \quad (\text{B.4})$$

onde $\left\{ \right\}$ é o coeficiente $6j$.

Particularmente para $J=0$, temos:

$$g_0(aabb) = -2G \hat{a} \hat{b}$$

$$\text{e } f_0(aabb) = -G \hat{a} \hat{b} \quad (\text{B.5})$$

Finalmente, com a interação de emparelhamento,

$$V(1,2) = -G \delta_{J,0}, \quad (\text{B.6})$$

empregada nas equações de *gap*, os elementos de matriz são dados por (+):

$$g_J(abcd) = -2G \hat{a} \hat{c} \delta_{ab} \delta_{cd} \delta_{JO} \quad (\text{B.7})$$

$$\text{e } f_J(abcd) = (-)^{j_a+j_b+J} G \delta_{ad} \delta_{bc} \quad (\text{B.8})$$

(+) Adotando a ordem de acoplamento $\vec{l}+\vec{s}=\vec{j}$ para os estados de partícula independente, e $i^l Y_{lm}(0,\phi)$ para a parte angular da função de onda de partícula independente.

APÊNDICE C. TÉCNICA PARA A ELIMINAÇÃO DE ESTADOS ESPÚRIOS

Um problema comum no tratamento com quase-partículas, devido ao uso de funções de onda que não possuem um número definido de partículas, é que algumas soluções da equação secular são espúrias. Isto porque existem certos estados, obtidos através de uma particular combinação linear de estados de base de BCS, que não contêm nenhuma componente com o número de partículas desejado (n_0), sendo portanto espúrios. Esses estados devem ser eliminados do espaço considerado antes da diagonalização da matriz H .

A técnica para a eliminação das soluções espúrias, em tratamentos que envolvem várias quase-partículas, está descrita em detalhes na referência (5). Neste apêndice, apresentamos a técnica específica empregada para a aproximação TDA no espaço de 1QP e 3QP.

Para cada estado de i QP (i =número de quase-partículas) com momento angular total J haverá um estado espúrio dado pela aplicação do operador $(\hat{N} - \langle N \rangle_J^i)$ nesse estado. Onde \hat{N} é operador de números de partículas, e

$$\langle N \rangle_J^i = \langle iQP | \hat{N} | iQP \rangle_J \quad (C.1)$$

Logo, o estado espúrio referente ao estado de uma quase-partícula $|\psi(\alpha)\rangle$ é dado por:

$$\psi_{e3} = \prod_{e3} (\hat{N} - \langle N \rangle) a_{\alpha}^+ | \psi_0 \rangle, \quad (C.2)$$

onde

$$\langle N \rangle = \langle \psi(\alpha) | \hat{N} | \psi(\alpha) \rangle = n_0 + (u_a^2 - v_a^2),$$

e N_{e3} é a constante de normalização. Este estado pode ser reescrito como:

$$\psi_{e3} = N_{e3} \sum_b \hat{b} u_b v_b \left[(a_b^+ \times a_b^+)^0 \times a_a^+ \right]_{m_a}^j | \psi_0 \rangle, \quad (C.3)$$

onde a constante de normalização é dada por:

$$N_{e3}^{-2} = \sum_a \hat{a}^2 u_a^2 v_a^2 \left(2 - \frac{4\delta_{ab}}{(2j_a+1)} \right). \quad (C.4)$$

Assim, vemos que ψ_{e3} é uma particular combinação linear de estados de 3QP com $v=1$.

A aplicação do operador $(\hat{N} - \langle \hat{N} \rangle_{ij})$ nos estados de 3QP também leva a outros estados espúrios, porém estes envolvem combinações lineares de estados de 5QP ($v=3$) que estão fora do espaço considerado.

A técnica para a projeção de estados espúrios é brevemente descrita a seguir. Suponha que para a diagonalização do hamiltoniano $H(\lambda)$ no espaço de vetores ϕ_i , $i = 1, \dots, n$, uma particular solução

$$\psi_e = \sum_i \eta_i \phi_i \quad ; \quad \sum_i \eta_i^2 = 1 \quad (C.5)$$

é espúria. Precisamos, portanto, eliminar este estado diagonalizando o hamiltoniano num subespaço de estados ortogonais a ϕ_i . No entanto, esse subespaço não precisa ser construído. Basta diagonalizar no espaço original a matriz projetada:

$$\tilde{H} = (1-P)H(1-P)^+ \quad (C.6)$$

com

$$(1-P)_{ij} = \delta_{ij} - n_i n_j, \quad (C.7)$$

que o estado espúrio ψ_e aparecerá como uma das autofunções com autovalor nulo.

Essa técnica pode ser generalizada para tratar casos onde existem mais que um estado espúrio a ser eliminado. Suponha que temos K estados espúrios, $K < n$. Primeiramente devemos ortonormalizá-los, denotando-os por:

$$\psi_e = \sum_i n_i^\alpha \phi_i, \quad \alpha=1\dots K \quad (C.8)$$

com

$$\langle \psi_e^\alpha | \psi_e^\beta \rangle = \delta_{\alpha\beta} \quad (C.9)$$

Para eliminá-los, nós devemos simplesmente diagonalizar \tilde{H} na mesma representação com \tilde{H} dado por:

$$\tilde{H} = (1-P_1-\dots-P_K)H(\lambda)(1-P_1-\dots-P_K)^+ \quad (C.10)$$

e

$$(1-P_1\dots)_{ij} = (\delta_{ij} - s_i^1 s_j^1 - \dots) \quad (C.11)$$

Todos os estados espúrios ψ_e^α aparecerão como

autoestados de \tilde{H} com autovalor zero, sendo ortogonais aos de
mais $n-K$ autoestados.

APÊNDICE D. ELEMENTOS DE MATRIZ DE PARTÍCULA ÚNICA DOS OPERADORES ELETROMAGNÉTICOS

A dedução detalhada dos elementos de matriz dos operadores multipolares, entre estados de partícula única, é facilmente encontrada na literatura. Assim, apresentamos diretamente as expressões necessárias na execução dos cálculos numéricos.

O operador tensorial elétrico de ordem λ e projeção μ é definido por:

$$T_{\lambda\mu}^E = e i^\lambda r^\lambda Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi) \quad (D.1)$$

sendo e a carga elétrica dos núcleons de valência, e $Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi)$ os harmônicos esféricos. Seu elemento de matriz reduzido é dado por:

$$\langle \alpha || T_{\lambda}^E || \beta \rangle = e \langle n_a \ell_a | \Omega^\lambda | n_b \ell_b \rangle f^\lambda(\alpha, \beta) i^{\ell_a - \ell_b + \lambda}, \quad (D.2)$$

com

$$f^\lambda(\alpha, \beta) = (-)^{j_a + 1/2} \frac{1}{2} \sqrt{\frac{(2j_a + 1)(2j_b + 1)(2\lambda + 1)}{2\pi}} \times [1 + (-)^{\ell_a + \ell_b + \lambda}] \begin{pmatrix} j_b & \lambda & j_a \\ 1/2 & 0 & -1/2 \end{pmatrix} \quad (D.3)$$

$$e \langle n_a \ell_a | r^\lambda | n_b \ell_b \rangle = \int_{r=0}^{\infty} R_{n_a \ell_a}(r) R_{n_b \ell_b}(r) r^2 dr \approx \frac{3}{\lambda + 3} r_0^\lambda A^{\lambda/3}, \quad (D.4)$$

onde, A é a massa atômica e $r_0 = 1.20$ fm.

Para as propriedades magnéticas o operador adequado é definido por:

$$T_{\lambda\mu}^M = \frac{e\hbar}{2mc} (g_s \vec{s}_\mu + \frac{2}{\lambda+1} g_l \vec{l}_\mu) \cdot \nabla r^\lambda Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi)$$

sendo $\frac{e\hbar}{2mc} \equiv \mu_N$ o *magneton* nuclear, g_s e g_l os fatores giromagnéticos de *spin* e orbital, respectivamente. Seu elemento de matriz reduzido, para $\lambda=1$, é dado por:

$$\langle \alpha \| T_{1\mu}^M \| \beta \rangle = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} (g_s \langle \alpha \| \vec{s}_1 \| \beta \rangle + g_l \langle \alpha \| \vec{l}_1 \| \beta \rangle) \mu_N, \quad (D.5)$$

com

$$\langle \alpha \| \vec{s}_1 \| \beta \rangle = (-)^{\ell_a + j_a + 3/2} \frac{1}{\sqrt{3/2(2j_a+1)(2j_b+1)}} \times \begin{Bmatrix} 1/2 & 1/2 & 1 \\ j_b & j_a & \ell_a \end{Bmatrix} \delta_{\ell_a \ell_b} \delta_{n_a n_b} \quad (D.6)$$

e

$$\langle \alpha \| \vec{l}_1 \| \beta \rangle = (-)^{\ell_a + j_b + 3/2} \frac{1}{\sqrt{\ell_a(\ell_a+1)(2\ell_a+1)(2j_a+1)(2j_b+1)}} \times \begin{Bmatrix} \ell_a & \ell_b & 1 \\ j_b & j_a & 1/2 \end{Bmatrix} \delta_{\ell_a \ell_b} \delta_{n_a n_b}. \quad (D.7)$$

APÊNDICE E. ELEMENTOS DE MATRIZ PARA O ACOPLAMENTO QUASIPARTÍCULA-CLUSTER-VIBRADOR

Os elementos de matriz do H_{ACQP} são escritos na forma:

$$\begin{aligned} \langle \psi(1), NR, I | H_{ACQP} | \psi(2), N'R', I \rangle = & \delta_{NN'} \delta_{RR'} \langle \psi(1) | H_{qp} | \psi(2) \rangle + \\ + \langle NR | H_{vib} | N'R' \rangle \langle \psi(1) | \psi(2) \rangle - & a\sqrt{4\pi} \begin{Bmatrix} r & R & I \\ R' & r' & 2 \end{Bmatrix} \langle NR || B_2 || N'R' \rangle \langle \psi(1) || Y_2^* || \psi(2) \rangle \end{aligned} \quad (E.1)$$

A relação (E.1) representa quatro tipos de elementos de matriz, com $|\psi(1)\rangle$ denotando $|\psi(J)\rangle$ ou $|\psi(abJ_1c;J)\rangle$ e $|\psi(2)\rangle$ denotando $|\psi(J')\rangle$ ou $|\psi(deJ'_1f;J')\rangle$. Os elementos de matriz do hamiltoniano H_{qp} , do operador de um corpo Y_2^* , e os respectivos *overlaps*, são dados no apêndice A. Para os bósons temos:

$$\langle NR | H_{vib} | N'R' \rangle = \delta_{NN'} \delta_{RR'} \hbar\omega_2 (N+5/2), \quad (E.2)$$

$$\begin{aligned} \langle NR || B_2 || N'R' \rangle = & \delta_{N', N-1} (-)^{R+R'} \langle NR || \} N-1R' \rangle \sqrt{N(2R+1)} + \\ + \delta_{N', N+1} \langle N+1R' || \} NR \rangle \sqrt{(N+1)(2R'+1)}, \end{aligned} \quad (E.3)$$

onde $\langle \dots || \} \dots \rangle$ são os coeficientes de *fractional parentage* para os fônons quadrupolares.

Os elementos de matriz reduzidos do operador transição T_λ podem ser escritos na forma:

$$\langle \psi(1), NR; I \parallel T_{\lambda} \parallel \psi(2), N'R'; I' \rangle = \langle \psi(1) \parallel T_{\lambda}^P \parallel \psi(2) \rangle \delta_{NN'} \delta_{RR'} \\ + \langle \psi(1) \mid \psi(2) \rangle \langle NR \parallel T_{\lambda}^{\text{vib}} \parallel N'R' \rangle \quad (\text{E.4})$$

onde T_{λ}^P representa o operador de um corpo de partícula; seus elementos de matriz são dados no apêndice A. Para os operadores quadrupolares elétricos temos:

$$\langle NR \parallel T_{E2}^{\text{vib}} \parallel N'R' \rangle = \frac{3}{4\pi} R_O^2 e_{\text{vib}} \langle NR \parallel B_2 \parallel N'R' \rangle, \quad (\text{E.5})$$

e, para os operadores dipolares magnéticos, temos:

$$\langle NR \parallel T_{M1}^{\text{vib}} \parallel N'R' \rangle = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \mu_N g_R \langle NR \parallel \vec{R} \parallel N'R' \rangle \quad (\text{E.6})$$

com

$$\langle NR \parallel \vec{R} \parallel N'R' \rangle = \delta_{NN'} \delta_{RR'} \times \{ \delta_{II'} [I(I+1)(2I+1)]^{1/2} \\ + \delta_{JJ'} (-)^{J+R+I'} [(2I+1)(2I'+1)J(J+1)(2J+1)]^{1/2} \times \begin{Bmatrix} I & I' & 1 \\ J' & J & R \end{Bmatrix} \} \quad (\text{E.7})$$

REFERÊNCIAS

1. M.H. Macfarlane - *Lectures in Theoretical Physics*, University of Colorado Press, Boulder, Colorado, 1966, p.583.
2. M. Baranger - *Phys.Rev.* 120 (1960) 957;
M. Baranger - "1962 Cargèse Lectures in Theoretical Physics", ed. M. Lévy, Benjamin, New York, 1963.
3. R. Arvieu and M. Veneroni - *C.R.* 250 (1960) 992, 2155.
4. L.S. Kisslinger and R.A. Sorensen - *Mat.Fys.Medd.Dan.Vid.Selsk.* 32 (1960) 9.
5. T.T.S. Kuo, E.U. Baranger and M. Baranger - *Nucl.Phys.* 79 (1966) 513.
6. K. Dietrich, H.J. Mang and J.H. Pradal - *Phys.Rev.* B22 (1964) 135.
7. P.L. Ottaviani and M. Savoia - *Phys.Rev.* 187 (1969) 1306;
P.L. Ottaviani and M. Savoia - *Nuovo Cimento* 67A (1970) 630;
P.L. Ottaviani and M. Savoia - *Phys.Rev.* 178 (1969) 1594.
8. K. Allaart and E. Boeker - *Nucl.Phys.* A168 (1971) 630;
K. Allaart and E. Boeker - *Nucl.Phys.* A198 (1972) 33.
9. K. Allaart and W.F. van Gunsteren - *Nucl.Phys.* A234 (1974) 53.
10. V.G. Soloviev - *Mat.Fys.Skr.Dan.Vid.Selsk.* 1, nº 11 (1961) e referências anteriores mencionadas neste.
11. S.G. Nilsson and O. Prior - *Mat.Fys.Medd.Dan.Vid.Selsk.* 32, nº 16 (1961).

12. S. Wahlborn - *Nucl.Phys.* 37 (1962) 554.
13. S.G. Nilsson - *Nucl.Phys.* 55 (1964) 97.
14. H. Dias - *Ph.D. Thesis, Universidade de São Paulo* (1980).
15. H. Dias e F. Krmpotić - *Phys.Lett.* 112B (1982) 103.
16. P.W.M. Glaudemans e outros - *Nucl.Phys.* A198 (1972) 609.
17. W.J. Baldrige - *Phys.Rev.* C18 (1978) 530;
W.J. Baldrige e outros - *Phys.Rev.* C18 (1978) 539.
18. G. Momoki, K. Ogawa and I. Tomozuka - *Institute for Nucl. Study, University of Tokyo, INS-Rep.-563, Dec. 1985.*
19. L. Landau - *J.Phys. USSR* 5 (1941) 71.
20. A. Bohr e B.R. Mottelson - *Mat.Fys.Medd.Dan.Vid.Selsk.* 27 (1953) n^o 16.
21. L.S. Kisslinger and R.A. Sorensen - *Rev.Mod.Phys.* 35 (1963) 853.
22. L.S. Kisslinger and K. Kumar - *Phys.Rev.Lett.* 19 (1967) 1239.
23. D. Janssen e outros - *Nucl.Phys.* A224 (1974) 93;
R.V. Jolos e outros - *Teor.Mat.Fys.* 20 (1974) 112.
24. D. Janssen - *in Problems of Vibrational Nuclei* (North-Holland, Amsterdam, 1975, p.75).
25. R.V. Jolos e outros - *Yad.Fiz.* 22 (1975) 965.
26. V. Paar - *in Structure of Medium-heavy Nuclei, Inst.Phys. Conf.Ser.* 49 (1979) p.53.

27. F. Iachello and O. Scholten - *Phys.Rev.Lett.* 43 (1979) 679.
28. O. Scholten - *Ph.D. Thesis, University of Groningen, 1980.*
29. A. Arima and F. Iachello - *Phys.Rev.Lett.* 35 (1975) 1069;
Ann.of Phys. 99 (1976) 253; 111 (1978) 201.
30. B.R. Mottelson - *J.Phys.Soc. Japan Suppl.* 24 (1968) 87.
31. A. Bohr and B.R. Mottelson - *Nucl.Struct. vol. II* (Benjamin, New York, 1975).
32. F. Dönau and D. Janssen - *Nucl.Phys.* A209 (1973) 101.
33. F. Dönau and U. Hagemann - *Nucl.Phys.* A256 (1976) 27.
34. I. Hamamoto - *Phys.Reports* 10C (1974) n° 2;
I. Hamamoto - in *Problems of Vibrational Nuclei* (North-Holland, Amsterdam, 1975, p.54);
P.F. Bortignon e outros - *Phys.Lett.* 64B (1976) 24;
P.F. Bortignon e outros - *Phys.Rep.* C30 (1977) 305;
O. Civitarese e outros - *Phys.Lett.* 72B (1977) 45.
35. G. Scharff-Goldhaber and J. Weneser - *Phys.Rev.* 98 (1955) 212.
36. B.J. Raz - *Phys.Rev.* 114 (1959) 1116.
37. G. Alaga - *Bull.Am.Phys.Soc.* 4 (1959) 359.
38. K. Allaart e outros - *Nucl.Phys.* A366 (1981) 384.
39. J.F.A. van Hienen e outros - *Nucl.Phys.* A269 (1976) 159.
40. A. Kuriyama e outros - *Supl.of Prog.of Theor.Phys.* 58 (1975) p.1.

41. J.B. French, E.C. Halbert, J.B. McGrory and S.S.M. Wong - *Advances in Nuclear Physics*, vol.3 (1969) 193.
42. A. de Shalit and I. Talmi - *Nuclear Shell Theory*, Academic Press, New York, 1963.
43. N. Auerbach - *Nucl.Phys.* 76 (1966) 321.
44. S. Cohen, R.D. Lawson, M.H. Macfarlane, S.P. Pandya and M. Soga - *Phys.Rev.* 160 (1967) 903.
45. A. Arima and H. Kwarada - *J.Phys.Soc. Japan* 19 (1964) 1768.
46. H. Watanabe - *Prog.Theor.Phys.* 32 (1964) 106.
47. R.D. Lawson and M.H. MacFarlane - *Nucl.Phys.* 66 (1965) 80.
48. L.S. Hsu - *University of Rochester, Ph.D. Thesis.*
49. K. Allaart and E. Boeker - *Nucl.Phys.* A168 (1971) 630;
K. Allaart and E. Boeker - *Nucl.Phys.* A198 (1972) 33.
50. J. Bardeen, L.N. Cooper and J.R. Schrieffer - *Phys.Rev.* 108 (1957) 1175.
51. A. Bohr, B.R. Mottelson and D. Pines - *Phys.Rev.* 110 (1958) 936.
52. J.Y. Zeng - *Physica Energiae Fortis et Physica Nuclearis* 3 (1979) 102.
53. J.Y. Zeng and T.S. Cheng - *Nucl.Phys.* A405 (1983) 1.
54. H.J. Mang, J.O. Rasmussen and R. Rho - *Phys.Rev.* 141 (1965) 941.
55. M. Kleber - *Z. Phys.* 231 (1970) 421.

56. P.M. Morse and H. Feshbach - *Methods of Theoretical Physics*, McGraw-Hill, New York (1953).
57. I.M. Green and S.A. Moszkowski - *Phys.Rev.* 139 (1965) 790;
A. Plastino e outros - *Phys.Rev.* 145 (1966) 837.
58. J.M. Blatt and V.F. Weisskopf - *Theoretical Nuclear Physics*, Wiley, New York (1952).
59. P.W.M. Glaudemans, P.M. Endt and A.E.L. Dieperink - *Ann. of Phys.* 63 (1971) 34;
M.J.A. de Voigt, P.W.M. Glaudemans, J. de Boer and B.H. Wildenthal - *Nucl.Phys.* A186 (1972) 65.
60. M. Pichevar, J. Delaunay and B. Delaunay - *Nucl.Phys.* A224 (1974) 34.
61. N. Feed and L.S. Kisslinger - *Nucl.Phys.* 25 (1961) 611-623.
62. J.Y. Zeng, T.S. Cheng, L. Cheng and C.S. Wu - *Nucl.Phys.* A411 (1983) 49-64.
63. S. Cohen, R.D. Lawson, M.H. MacFarlane, S.P. Pandaya and M. Soga - *Phys.Rev.* 160 (1967) 903.
64. J. Vervier - *Nucl.Phys.* 78 (1966) 497.
65. N. Auerbach - *Phys.Rev.* 163 (1967) 1203.
66. J.B. MacGrory - *Phys.Rev.* 160 (1967) 915.
67. R. Arvieu, O. Bohigas and C. Quesne - *Nucl.Phys.* A143 (1970) 577.
68. M.L. Rustgi, H.W. Kung, R. Raj, R.A. Nisley and M.H. Holl Jr. - *Phys.Rev.* C4 (1971) 854.
69. H. Horie and K. Ogawa - *Nucl.Phys.* A216 (1973) 407.

70. G. Vanden Berghe - *Z. Physik* A279 (1976) 223.
71. J.E. Koops and P.W.M. Glaudemans - *Z. Physik* A280 (1977) 181.
72. H.J. Kim - *Nucl.Data Sheets* 17 (1976) 485.
73. L.P. Ekström and J. Lyttkens - *Nucl.Data Sheets* 38 (1983) 463.
74. R.L. Auble - *Nucl.Data Sheets* 14 (1975) 119.
75. R.L. Auble - *Nucl.Data Sheets* 16 (1975) 351.
76. A. Wender - *Can.Journ.Phys.* 52 (1974) 1013.
77. J.D. Houtton e outros - *Nucl.Phys.* A206 (1973) 403.
78. K.S. Krane e outros - *Phys.Rev.* 14C (1976) 650.
79. N. Freed and N. Miles - *Nucl.Phys.* A167 (1970) 230.
80. C.M. Lederer and V.S. Shirley - *Table of Isotopes 7^{ed}*, Wiley, New York, 1978.
81. E.A. Henry - *Nucl.Data Sheets* 14 (1975) 191.
82. R.L. Bunting - *Nucl.Data Sheets* 15 (1975) 191.
83. W.R. Western e outros - *Phys.Rev.* C15 (1977) 1024.
84. K. Heide and M. Warouquier - *Nucl.Phys.* A167 (1971) 545.
85. G. Holm and S. Borg - *Ark.Phys.* 36 (1967) 91.
86. L.R. Greenwood - *Nucl.Data Sheets* 12 (1974) 139.
87. R.G. Kulkarni and K. Andhradev - *Can.J.Phys.* 57 (1979) 1940.

88. J.K. Tuli - *Nucl.Data Sheets* 23 (1978) 529.
89. Y. Nagai e outros - *Nucl.Phys.* A282 (1977) 29.
90. H. Prade e outros - *Nucl.Phys.* A370 (1981) 47.
91. J.K. Tuli - *Nucl.Data Sheets* 25 (1978) 603.
92. H. Prade e outros - *Nucl.Phys.* A333 (1980) 33.
93. D.G. Alkhazov e outros - *Izv.Akad.Nauk.SSSR, Ser.Fiz.* 29 (1965) 139.
94. R. Almar, O. Civitarese and F. Krmpotic - *Phys.Rev.* C8 (1973) 1518.
95. V. Paar - *Nucl.Phys.* A211 (1973) 29.
96. G. Alaga - in *Rendiconti Scuola Internazionale, Varenna* 40 Corso (1968) p.28.
97. V. Paar - *Phys.Lett.* 60B (1976) 129;
V. Paar and S. Brant - *Nucl.Phys.* A303 (1978) 96;
Phys.Lett. 74B (1978) 297.
98. J.J. Dikshit and B.P. Singh - *J.of Phys.* G 2 (1976) 219.
99. A. Weidinger and outros - *Nucl.Phys.* A149 (1970) 241.
100. A. Charvet e outros - *Phys.Rev.* C15 (1977) 1679.
101. G. Vanden Berghe - *Nucl.Phys.* A265 (1976) 479.
102. O.M. Mustafa e outros - *J.of Phys.* G 4 (1978) 99;
P.R.F. Lornie e outros - *J.of Phys.* G 4 (1978) 923;
A. Kogan e outros - *J.of Phys.* G 5 (1978) 755.

103. A. Bohr and B.R. Mottelson - *Nucl.Struct.*, Benjamin, New York (1969), vol. I;

K. Heyde and Waroquier - *Phys.Lett.* 29B (1969) 147;

V. Paar and S. Brant - *Phys.Lett.* 74B (1978) 297.