UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA

APR 1978
Comunicação para Vitor de Paula
Desluz
Francisco
Edmundo

SBI-IFUSP

305M810T0403

V.T. 403

VIBRAÇÕES MONOPOLARES ISOESCALARES EM ALGUNS
NÚCLEOS DUPLAMENTE MÁGICOS

Tese de Doutorado
Diógenes Galetti
Orientador
Prof. Dr. A. F. R. de Toledo Piza

São Paulo

1978

515.7

G-154

D

ex. 1

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA

VICARIA GERAL DE ECONOMIA E FINANÇAS

DEPARTAMENTO DE ECONOMIA

DEPARTAMENTO DE ECONOMIA

DEPARTAMENTO DE ECONOMIA

DEPARTAMENTO DE ECONOMIA

DEPARTAMENTO DE ECONOMIA

Errata

— pág. 14

$$a^2 = \frac{\hbar}{M\Omega} - \frac{1}{45}$$

— pág. 15

$$K(\alpha, \alpha') \rightarrow \frac{\hbar^2}{2M} \delta''(\alpha - \alpha') + \left[\frac{1}{2} M\Omega^2 \left(\frac{\alpha + \alpha'}{2} \right)^2 + E_g \right] \delta(\alpha - \alpha')$$

— pág. 31

$$\int U_{x'}^+(\alpha) U_x(\alpha) d\alpha = \delta(x - x')$$

— pág. 46

$$\begin{aligned} \langle x_1 | H | x_2 \rangle = \text{sech}^T(x_1 - x_2) & \left[A \text{sech}(x_1 - x_2) e^{\frac{x_1 + x_2}{b_0^2}} + \frac{B}{b_0^3} \cosh^{3/2}(x_1 - x_2) e^{\frac{3}{2}(x_1 + x_2)} \right. \\ & \left. + \frac{C}{b_0^5} \cosh^{5/2}(x_1 - x_2) e^{\frac{5}{2}(x_1 + x_2)} + \frac{D}{b_0^6} \cosh^3(x_1 - x_2) e^{3(x_1 + x_2)} \right] \end{aligned}$$

Para

Geni, Ana Maria e Cecília

Ressaltando que posso estar, por esquecimento, cometendo omissões imperdoáveis, gostaria de externar aqui meus agradecimentos a diversas pessoas que, de alguma maneira, me ajudaram no desenvolvimento deste meu trabalho de tese :

Ao prof. A. Toledo Piza, pela orientação segura e pela leitura crítica dos manuscritos ;

Ao prof. Emerson V. de Passos, pelo interesse constante e sugestões valiosas ;

À Marilena M. Watanabe de Moraes, pela disposição que sempre manifestou em discutir física (e generalidades) comigo ;

Aos amigos bolsistas do Depto., que frequentemente me incentivaram ;

À Geni, simplesmente ;

À FAPESP, pelo suporte financeiro ;

Aos meus pais, pelo muito que lhes devo.

RESUMO

Usamos o formalismo de A. Toledo e E. Pessos, que usa o método de coordenadas geradoras e o Teorema Espectral da Análise Funcional, para obter uma hamiltoniana coletiva para as vibrações monopolares isoescalares nos núcleos duplamente mágicos ${}^4\text{He}$, ${}^{16}\text{O}$ e ${}^{40}\text{Ca}$. As funções de onda do oscilador harmônico são tomadas como funções de onda geradoras, e a interação de muitos corpos é aquela de Skyrme.

Com esta hamiltoniana coletiva calculamos o espectro de energias do modo monopolar isoescalar, parâmetros de inércia e módulos de incompressibilidade para aqueles núcleos e comparamos com os resultados de Flocard e Vautherin, que resolvem numericamente a equação de Griffin - Wheeler. Foram calculados ainda os raios quadráticos médios nucleares.

Os efeitos espúrios dos movimentos do centro de massa são eliminados exatamente para o ${}^4\text{He}$ e recalculamos aquelas propriedades nucleares.

ABSTRACT

The isoscalar monopole vibrational mode in ${}^4\text{He}$, ${}^{16}\text{O}$ and ${}^{40}\text{Ca}$ is studied with the aid of collective hamiltonians obtained from a general formalism proposed by A. Toledo Piza and E. Passos, which makes use of the generator coordinate method and Functional Analysis' Spectral Theorem.

Our generator wave functions are that of the harmonic oscillator and use is made of the Skyrme's schematic effective interaction.

Using the collective hamiltonian we can calculate the energy spectrum, inertial parameters and incompressibility modulus and compare with numerical results of Flocard and Vautherin. R. m. s. radii are also calculated.

Center of mass spurious effects are exactly eliminated and the forementioned nuclear properties are calculated again for ${}^4\text{He}$.

ÍNDICE

I - Introdução	1
II- O método de coordenadas geradoras	7
III-As dificuldades do método de coordenadas geradoras	17
IV- A função de superposição e o núcleo de energia para as vibrações monopolares isoscalares	34
a) Cálculo da função de superposição	35
b) Cálculo do núcleo de energia	38
V - A hamiltoniana coletiva para vibrações monopolares	48
A) Expansão bosônica para a hamiltoniana coletiva	51
B) Convergência da hamiltoniana coletiva	63
C) Efeitos espúrios do centro de massa nas funções de onda coletivas	72
VI -Conclusões	79
Apêndice A	83
Apêndice B	87
Apêndice C	90
Tabelas	94

CAPÍTULO I

Introdução

A completa caracterização de movimentos coletivos nos núcleos atômicos, na década de 50, com as comprovações experimentais dos trabalhos teóricos de Bohr e Mottelson (Bo -52, Bo Mo -53), deu origem a uma série de trabalhos de cunho teórico que visam uma descrição quanto mecânica destes movimentos nucleares.

É interessante, porém, distinguir os tratamentos microscópicos e os modelos fenomenológicos quando se pretende considerar teorias que descrevam movimentos coletivos nos núcleos. Se por um lado os modelos fenomenológicos baseados nos trabalhos de Bohr e Mottelson apresentam uma certa simplicidade de uso e permitem que tenhamos uma visão intuitiva do movimento coletivo, a desvantagem, por outro lado, é que propriedades nucleares como parâmetros de inércia e constantes de força não podem ser calculados a partir de primeiros princípios de maneira consistente.

Teorias microscópicas objetivam calcular propriedades nucleares usando alguma hamiltoniana nuclear de muitos corpos; o exemplo mais bem sucedido de uma teoria deste tipo, RPA (Random Phase Approximation), é baseado no uso do modelo de camadas e dá uma descrição do movimento coletivo em termos de excitações partícula-buraco. É possível calcular-se propriedades de estados excitados vibracionais através do método RPA usando-se uma dada interação nucleon-nucleon, porém este método nos remete a grandes dificuldades computacionais devido ao tamanho das matrizes com que se deve trabalhar (principalmente para núcleos pesados), e também não apresenta a facilidade de nos possibilitar a visualização do movimento coletivo, descrito agora no espaço de estados de muitas partículas.

Paralelamente a estas abordagens foram realizadas muitas tentativas de se obter as expressões das hamiltonianas coletivas

dos modelos fenomenológicos a partir de teorias microscópicas tendo-se usado para isso coordenadas coletivas definidas em termos das coordenadas das partículas independentes.

De forma geral podemos dizer que estas tentativas se constituem em procurar relações da forma :

$$\bar{X} = f(\bar{x}_1, \dots, \bar{x}_N)$$

onde $\bar{X}$ é a coordenada coletiva (o que requer um certo conhecimento a priori, ou uma expectativa de que certos parâmetros semi-clássicos estejam associados a variáveis coletivas) e os $\bar{x}_i$ são as coordenadas da i-ésima partícula; e de posse daquela coordenada coletiva procurar escrever a função de onda do sistema de maneira a separar a parte coletiva da intrínseca :

$$\Psi(\bar{x}_1, \dots, \bar{x}_N) = \Phi_{int}(\bar{x}_i) \xi_{col}(\bar{X})$$

Estes cálculos, porém, sempre encontram uma certa dificuldade (além da dificuldade da não existência de um procedimento matemático geral para se usar no problema de muitos corpos) quando se pretende uma definição clara da variável dinâmica coletiva em termos das variáveis das N partículas constituintes do núcleo atômico.

Embora estes métodos de coordenadas coletivas tenham tido sucesso na obtenção dos termos de energia cinética da hamiltoniana coletiva fenomenológica de Bohr e Mottelson, eles esbarram em sérias dificuldades ao calcular o potencial coletivo a partir da interação nucleon - nucleon (Vil -57, Le Ba -63, Ta -68).

Griffin e Wheeler (Gri Whe -57) desenvolveram e formalizaram uma idéia inicialmente proposta por Hill e Wheeler (Hi Whe -53) e que se constituiu numa alternativa para o tratamento de movimentos nucleares coletivos. O método por eles proposto, conhecido como método de coordenadas geradoras, tem como característica peculiar o fato de não usar coordenadas coletivas, em contraposição aos métodos

descritos anteriormente. Desta forma o método de coordenadas geradoras não apresenta aquelas dificuldades típicas dos métodos de coordenadas coletivas podendo, contudo, ter seu uso limitado face a dificuldades inerentes ao próprio método.

O procedimento do método de coordenadas geradoras visa a construção de funções de onda coletivas a partir de uma superposição linear de funções de onda de muitos corpos dependentes de um parâmetro auxiliar, chamado coordenada geradora, e que é responsável pela introdução dos efeitos coletivos, com funções peso que também dependem daquele parâmetro:

$$\Psi(\bar{x}_1, \dots, \bar{x}_N) = \int \Phi(\bar{x}_1, \dots, \bar{x}_N; \alpha) f(\alpha) d\alpha \quad \text{I.1}$$

A função peso, que forma juntamente com o espectro de energias do movimento coletivo o conjunto de objetivos do método, é a solução, quando existe, de uma equação integral determinada pelo método variacional de Ritz :

$$\int [K(\alpha, \alpha') - E N(\alpha, \alpha')] f(\alpha') d\alpha' = 0 \quad \text{I.2}$$

onde $K(\alpha, \alpha')$ é chamado núcleo de energia e $N(\alpha, \alpha')$ função de superposição. Esta equação integral é conhecida como equação de Griffin - Wheeler.

No capítulo II descrevemos o procedimento original de Griffin e Wheeler para a obtenção da equação do método de coordenadas geradoras (I.2), bem como a aplicação deste método na restauração de simetrias em funções de onda. Ainda nesse capítulo descrevemos a aproximação quadrática por se constituir numa ferramenta bem adaptada ao estudo de pequenas oscilações em sistemas que tenham uma situação de equilíbrio estável, e que, portanto, pode ser usada para se estudar movimentos vibracionais coletivos de pequena amplitude em núcleos atômicos.

As dificuldades de se estabelecer uma correspondência formal entre a equação do método de coordenadas geradoras e uma

equação de Schrödinger num subespaço coletivo, e as diferentes tentativas de se eliminar as anomalias que podem ocorrer na função peso são discutidas no capítulo III. Ainda no capítulo III são comentados, com base no trabalho de A. Toledo Piza e E. Passos (Pi Pa et al -77), os problemas que ocorrem no método de coordenadas geradoras quando se usa uma coordenada real e localiza-se a origem do comportamento anômalo da função peso. Com base nesta análise apresenta-se, como uma extensão do método anterior, o formalismo geral desenvolvido também por A. Toledo Piza e E. Passos (Pi Pa -77). O procedimento deste formalismo geral objetiva a construção de uma base ortonormalizada no subespaço coletivo do espaço de Hilbert de muitos corpos, e a projeção de uma hamiltoniana de muitos corpos, escolhida previamente, nesse subespaço. A possibilidade de obtenção de uma equação de Schrödinger para o movimento coletivo se constitui numa vantagem com relação ao método de coordenadas geradoras, tratado em termos da função peso, uma vez que não apresenta restrições e dificuldades inerentes àquele método. Além dessas vantagens de caráter técnico, a obtenção de uma hamiltoniana coletiva, construída com base em uma de muitos corpos, se constitui numa fonte de informações dos fatores microscópicos que determinam os parâmetros coletivos, o que nos permite efetivar uma análise mais realista das propriedades nucleares que estamos interessados em estudar.

O formalismo desenvolvido por A. Toledo Piza e E. Passos (Pi Pa et al -77, Pi Pa -77) permite ainda a análise das técnicas numéricas desenvolvidas para se resolver a equação integral do método de coordenadas geradoras (Flo Vau -75, 76), possibilitando a localização de erros numéricos decorrentes de truncamentos indevidos do subespaço coletivo (Ga Pi -78).

O aparato formal desenvolvido no capítulo III é aplicado no cálculo de vibrações monopolares isoscalares nos núcleos duplamente mágicos ^4He , ^{16}O e ^{40}Ca respectivamente.

No capítulo IV fazemos nossa escolha da coordenada geradora e calculamos, como definidos no capítulo II, a função de super-

posição e o núcleo de energia a partir de funções de onda de muitos corpos determinantis (determinantes de Slater montados com funções de onda de oscilador harmônico) e a interação dependente da densidade de Skyrme (Sky -59).

A expressão analítica para a hamiltoniana coletiva do modo monopolar de vibrações é obtida no capítulo V fazendo-se uma aproximação gaussiana para $\text{sech}^2(\alpha - \alpha')$, que é a função de superposição exata, e uma expansão em série de potências para o núcleo de energia. A justificativa para essas aproximações reside na dificuldade de cálculo com as expressões exatas, além do fato que o tratamento exato nos levaria também a expressões do tipo série de potências para a hamiltoniana coletiva. A validade destas aproximações que fizemos é verificada pela comparação dos resultados assim obtidos com aqueles de Flocard e Vautherin (Flo Vau -75, 76), que resolvem numericamente a equação (1.2) para o mesmo problema.

De maneira esperada a hamiltoniana coletiva para o ^{16}O e ^{40}Ca são bem aproximadas por uma de oscilador harmônico, e pode-se calcular trivialmente as expressões para parâmetros de massa e energias de transição em função dos coeficientes de expansão do núcleo de energia e do expoente da função de superposição. A expansão gaussiana resulta não ser uma boa aproximação para a função de superposição do ^4He , e consequentemente os parâmetros coletivos obtidos da hamiltoniana coletiva para este núcleo devem ser vistos como estimativas para os valores que seriam obtidos por um tratamento exato.

Os efeitos espúrios do movimento de centro de massa são eliminados exatamente no caso do ^4He através da construção de uma nova função de onda de muitos corpos, que separa exatamente a contribuição do centro de massa por efeito da fixação do valor de sua coordenada geradora. Os resultados obtidos nesta nova abordagem nos mostram o grau de participação destas contribuições espúrias nos resultados obtidos a partir de funções de onda de muitos corpos que não fixam o valor da coordenada geradora da sua contribuição do centro de massa.

Essa correção, embora importante, não é, contudo, o elemento capaz de nos levar à melhor hamiltoniana coletiva para o ^4He , pois a aproximação gaussiana para a função de superposição é a fonte de erro não corrigido para a obtenção daquela hamiltoniana.

As propriedades nucleares estudadas com base na hamiltoniana coletiva foram respectivamente o raio nuclear, energias de transição e o módulo de incompressibilidade nuclear.

Os resultados obtidos são apresentados no capítulo V. Como a aproximação quadrática é satisfatória para o ^{16}O e ^{40}Ca , os resultados das propriedades nucleares para estes núcleos são obtidos diretamente dos coeficientes da hamiltoniana coletiva correspondente se qualquer dificuldade. Para o ^4He , contudo, recorreremos à solução numérica da equação de Griffin e Wheeler (I.2), com a técnica proposta por Flo-card e Vautherin (Flo Vau -75, 76), para a obtenção da energia de transição e raio nuclear usando a função de superposição e o núcleo de energia exatos nas situações em que se elimina ou não a contribuição do movimento do centro de massa.

Finalmente no capítulo VI ressaltamos uma série de pontos que, tendo-se apresentado ao longo do desenvolvimento deste trabalho, foram considerados relevantes face a sua importância no estudo de movimentos nucleares coletivos.

CAPÍTULO II

O método de coordenadas geradoras

Em 1957 Griffin e Wheeler (Gri Whe -57) propuseram um método variacional que era uma versão melhorada daquele desenvolvido anteriormente por Hill e Wheeler (Hi Whe -53). O método de Griffin e Wheeler, também conhecido como método de coordenadas geradoras, tem como característica básica a construção de funções de onda coletivas sem que, para isso, se use variáveis dinâmicas coletivas; e como tal é um método de introduzir efeitos coletivos em funções de onda de muitos corpos determinadas previamente. Essa introdução de efeitos coletivos é conseguida pela variação de parâmetros que aparecem nas funções de onda de partícula independente com as quais se constroi a função de onda de muitos corpos. Esse parâmetro é chamado coordenada geradora.

Na formulação original de Griffin e Wheeler a função de onda coletiva é escrita como :

$$\Psi(\bar{x}_1, \dots, \bar{x}_N) = \int \Phi(\bar{x}_1, \dots, \bar{x}_N; \alpha) f(\alpha) d\alpha . \quad \text{II.1}$$

A função desconhecida $f(\alpha)$, chamada função peso, determina como os graus de liberdade controlados por α são envolvidos na construção da função de onda tentativa Ψ . $\Phi(\bar{x}_1, \dots, \bar{x}_N; \alpha)$ é a função de onda de muitos corpos construída a partir de estados de partícula independente.

A função de onda tentativa de forma :

$$\Psi(\bar{x}_1, \dots, \bar{x}_N) = \int \Phi(\bar{x}_1, \dots, \bar{x}_N; \alpha) F(\bar{x}_1, \dots, \bar{x}_N; \alpha) f(\alpha) d\alpha$$

onde $F(\bar{x}_1, \dots, \bar{x}_N; \alpha)$ é uma função que impõe correlações adicionais entre as partículas do sistema descrito por Φ , é mais geral que a anterior e a escolha de formas específicas para a função F pode nos mostrar como o método de coordenadas geradoras se relaciona com outros métodos de tratar movimentos coletivos.

Como mostrado por Griffin e Wheeler, para a escolha

$$F(\bar{x}_1, \dots, \bar{x}_N; \alpha) = \delta\left[\alpha - g(\bar{x}_1, \dots, \bar{x}_N)\right]$$

aplicada ao caso de movimento coletivo de translação, onde pode-se escrever :

$$g(\bar{x}_1, \dots, \bar{x}_N) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \bar{x}_i$$

obtem-se a função de onda tentativa na forma daquela de Bohr e Mottelson :

$$\Psi(\bar{x}_1, \dots, \bar{x}_N) = \Phi(\bar{x}_1, \dots, \bar{x}_N; g(\bar{x}_1, \dots, \bar{x}_N)) f(g(\bar{x}_1, \dots, \bar{x}_N))$$

A escolha feita por Griffin e Wheeler recai, porém, em fazer $F(\bar{x}_1, \dots, \bar{x}_N; \alpha) = 1$ e assim a função de onda tentativa só dependerá do número de partículas do sistema através dos números quânticos que caracterizam a função de onda de muitos corpos e da função peso $f(\alpha)$.

A determinação desta função peso $f(\alpha)$ é o problema central do método de coordenadas geradoras.

Se a coordenada geradora está associada a graus de liberdade "cinemáticos", ou seja, se ela é um parâmetro de um grupo de simetria da hamiltoniana que foi quebrado na construção das funções de onda de muitos corpos, então a função peso pode ser determinada usando-se métodos de teoria de grupos e o procedimento global correspondente a se fazer uma restauração da simetria que foi violada. Este procedimento pode ser melhor compreendido no exemplo particular da constru-

ção de uma função de onda invariante por rotações a partir de funções de onda que violam aquela simetria. Neste caso os parâmetros associados à simetria quebrada podem ser tomados como ângulos de Euler que indicam a orientação dos estados deformados. Para se restaurar a simetria usa-se então o ansatz de Griffin e Wheeler (II.1), o qual elimina a arbitrariedade da escolha de uma direção simplesmente integrando a função de onda sobre todos os valores permitidos com uma função peso que é uma representação irredutível do grupo de simetria em questão, ou seja,

$$f(\Omega) = \int D_{KM}^J(\Omega)$$

onde $D_{KM}^J(\Omega)$ são as matrizes de Wigner.

O estudo do método de coordenadas geradoras como técnica de restauração de simetria foi desenvolvida basicamente nos trabalhos de Peierls e Yoccoz (Pe Yo -57) e Peierls e Thouless (Pe Tho-62); porém não nos deteremos sobre esse aspecto do método.

Em geral a coordenada geradora está ligada às propriedades dinâmicas do sistema considerado, isto é, ela é um parâmetro que não está simplesmente associado às simetrias conhecidas da hamiltoniana, porventura quebradas na construção das funções de onda de muitos corpos. Nesse caso acha-se uma equação integral para $f(\alpha)$, a qual deverá ser determinada através do método variacional de Ritz.

Originalmente Griffin e Wheeler desenvolveram o método para este caso, construindo a função de onda de muitos corpos com um procedimento que pode ser compreendido por seu esquema operacional.

Inicialmente simula-se o potencial real que uma partícula sente no núcleo por um potencial auxiliar simplificado e que depende de um parâmetro α , o qual dá informação sobre a forma deste potencial e que está associado ao grau de liberdade correspondente ao movimento em questão. Acha-se a seguir as funções de onda da partícula independente nesse potencial e a partir destas funções de onda de par-

tícula independente constroi-se uma função de onda de muitos corpos; por exemplo um determinante de Slater :

$$\Phi(\bar{x}_1, \dots, \bar{x}_N; \alpha) = \det \{ \phi(\bar{x}_i; \alpha) \} .$$

Cada função de onda $\phi(\bar{x}_i; \alpha)$ de partícula independente varia com α , e deste modo é capaz de descrever como o nucleon responderá aos vínculos coletivos representados por α . Nota-se claramente que a função de onda de muitos corpos dependerá do parâmetro do potencial. Como para cada valor do parâmetro α o potencial tem uma forma diferente o movimento coletivo pode ser imaginado como aquele realizado pelos nucleons nestes potenciais que têm a forma variável.

Assim constroi-se a função de onda tentativa do movimento coletivo como uma superposição das funções de onda de muitos corpos $\Phi(\bar{x}_1, \dots, \bar{x}_N; \alpha)$ na forma da combinação linear (II.1)

$$\Psi(\bar{x}_1, \dots, \bar{x}_N) = \int \Phi(\bar{x}_1, \dots, \bar{x}_N; \alpha) f(\alpha) d\alpha .$$

Como o parâmetro α que caracteriza a forma do potencial auxiliar serve para gerar a função de onda tentativa ele é chamado coordenada geradora.

A equação integral para $f(\alpha)$ é obtida da imposição que o valor do funcional de energia nestas funções de onda tentativas deva ser um extremo com respeito a variações daquela função peso $f(\alpha)$, ou seja

$$\frac{\delta E}{\delta f} = 0$$

O funcional de energia é definido como ($\bar{x}$ denota todas as coordenadas $\bar{x}_i$)

$$E = \frac{\int \Psi^*(\bar{x}) H \Psi(\bar{x}) d^3x_1 \dots d^3x_N}{\int \Psi^*(\bar{x}) \Psi(\bar{x}) d^3x_1 \dots d^3x_N} ,$$

e H é a hamiltoniana de muitos corpos e que depende somente dos graus de liberdade das partículas. Podemos substituir a função de onda tentativa $\Psi(\bar{x})$ por sua expressão (II.1), considerando para isto

$$\Psi^*(\bar{x}) = \int \Phi^*(\bar{x}; \alpha) f^*(\alpha) d\alpha$$

e

$$\Psi(\bar{x}) = \int \Phi(\bar{x}; \alpha') f(\alpha') d\alpha'$$

A expressão para o funcional da energia fica então

$$E = \frac{\int f^*(\alpha) K(\alpha, \alpha') f(\alpha') d\alpha d\alpha'}{\int f^*(\alpha) N(\alpha, \alpha') f(\alpha') d\alpha d\alpha'} ,$$

onde $K(\alpha, \alpha')$ e $N(\alpha, \alpha')$ são os resultados das integrações nas coordenadas das partículas

$$K(\alpha, \alpha') = \int \Phi^*(\bar{x}; \alpha) H \Phi(\bar{x}; \alpha') d^3x_1 \dots d^3x_N$$

e

$$N(\alpha, \alpha') = \int \Phi^*(\bar{x}; \alpha) \Phi(\bar{x}; \alpha') d^3x_1 \dots d^3x_N .$$

$K(\alpha, \alpha')$ é chamado de núcleo de energia e $N(\alpha, \alpha')$ função de superposição. Ambas têm a propriedade de hermiticidade

$$N(\alpha, \alpha') = N^*(\alpha', \alpha)$$

$$K(\alpha, \alpha') = K^*(\alpha', \alpha) .$$

Agora a condição de estacionariedade sobre a varia-

ção do funcional de energia, $\delta E = 0$, dá uma equação integral que é a base do método de coordenadas geradoras e que ficou conhecida como equação de Griffin - Wheeler

$$\int [K(\alpha, \alpha') - E N(\alpha, \alpha')] f(\alpha') d\alpha' = 0 \quad \text{II.2}$$

Deve-se notar que esta equação só será formalmente uma equação de Schrödinger escrita na forma integral no caso em que

$$N(\alpha, \alpha') = \delta(\alpha - \alpha'),$$

o que implica, porém, na ortonormalidade das funções geradoras. Como temos em geral que

$$N(\alpha, \alpha') \neq \delta(\alpha - \alpha')$$

a equação de Griffin - Wheeler não corresponde a uma equação de Schrödinger e teremos então que procurar resolver a equação (II.2) numericamente na maioria dos casos.

Existem, contudo, tipos especiais de núcleos de energia e funções de superposição que permitem soluções analíticas para a equação (II.2).

O caso mais extensamente discutido por Griffin e Wheeler é chamado de aproximação quadrática. As considerações que caracterizam este caso especial não são pertinentes ao esquema geral do método de coordenadas geradoras, mas antes se constituem em um conjunto de suposições feitas de tal forma a permitir se estudar, numa aproximação de pequenas oscilações, sistemas que tenham uma situação de equilíbrio estável. Embora este caso seja particular ainda assim ele é importante por se constituir numa ferramenta com possibilidade de uso constante para esses problemas. Vale lembrar que, se o sistema que apresenta a situação de equilíbrio estável é um oscilador puro, então aquele conjunto de suposições deixa de constituir numa aproximação para gerar um tratamento exato.

As suposições que caracterizam este caso se referem à forma da função de superposição e à possibilidade de se expandir $K(\alpha, \alpha') / N(\alpha, \alpha')$ em série de potências. De maneira explícita :

- a) A função de superposição é considerada como uma função somente da diferença dos valores da coordenada geradora, e tem como expressão analítica uma gaussiana

$$N(\alpha, \alpha') = \frac{1}{\sigma} e^{-\frac{1}{2\sigma^2}(\alpha - \alpha')^2}$$

- b) Se o sistema que estamos considerando tem esta estabilidade com relação à deformação que consideramos, deformação esta que é caracterizada pela coordenada geradora, e se a função de onda é adaptada para reconhecer esta estabilidade, então a parte diagonal do núcleo de energia (que se obtém fazendo $\alpha = \alpha'$) deve ter um mínimo; o que é fácil de compreender, pois neste caso ($\alpha = \alpha'$) o núcleo de energia é o valor esperado da energia para funções de onda que possuam o parâmetro variacional α .

Redefinindo os parâmetros como

$$\delta = \alpha - \alpha'$$

e

$$\gamma = \frac{\alpha + \alpha'}{2}$$

e tomando o ponto de equilíbrio em $\alpha = \alpha' = 0$ (o que pode ser feito por uma escolha conveniente da origem) expande-se a parte diagonal do núcleo de energia ($\delta = 0$) em uma série de potências até segunda ordem

$$K(\alpha, \alpha') = K(\gamma, \gamma) = C_0 + \frac{1}{2} C_2 \gamma^2 + \dots$$

Na direção perpendicular fixa-se γ e varia-se δ ; ou seja, varia-se $\alpha - \alpha'$. Para valores grandes de δ , os valores de α e α' diferem bastante, o que acarreta um valor pequeno para a função de superposição. Assim expande-se o núcleo de energia levando-se em conta esta diminuição da função de superposição:

$$K(\alpha, \alpha') \simeq N(\alpha, \alpha') \left(C_0 + \frac{1}{2} C_1 \gamma^2 + \frac{1}{2} C_2 \delta^2 \right)$$

onde, por razões justificadas posteriormente se escreve

$$C_0 = E_g + \frac{\hbar^2}{2M} 2s$$

$$C_1 = M\Omega^2$$

$$C_2 = -4s^2 \frac{\hbar^2}{2M}$$

A equação de Griffin - Wheeler é resolvida com estas aproximações por uma solução tentativa da função peso do tipo:

$$f(\alpha') = N e^{-\frac{\alpha'^2}{2a^2}}$$

onde a é uma constante a ser determinada.

A solução da equação de Griffin - Wheeler, quando existir, é tal que as energias são

$$E_n = E_g + \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\Omega - \frac{M\Omega^2}{16s} \quad \text{II.3}$$

A largura a^2 da gaussiana $f(\alpha')$, por outro lado, é dada por:

$$a^2 = \frac{\hbar^2}{M\Omega} - \frac{1}{4s} \quad \text{II.4}$$

que deve ser um número positivo para que exista uma solução $f(\alpha')$ que

seja de quadrado integrável.

Supondo que isto ocorra de fato, isto é,

$$a^2 > 0,$$

a partir dessas duas equações teremos o espectro coletivo de energias e as funções peso $f_n(\alpha)$, onde $e^{-\frac{\alpha^2}{2a^2}}$

$$f_n(\alpha) = N_n P_n(\alpha) e^{-\frac{\alpha^2}{2a^2}}$$

e $P_n(\alpha)$ não é um polinômio de Hermite comum, mas sim um polinômio dado pela seguinte relação de recorrência :

$$P_n(\alpha) = \left[\alpha - \left(\frac{1}{2} + \frac{M\Omega}{8\hbar s} \right) \frac{d}{d\alpha} \right] P_{n-1}(\alpha).$$

As conclusões que seguem das equações (II.3) e (II.4) são muito importantes. Vamos inicialmente que a energia do n -ésimo estado só terá a forma conhecida :

$$E_n = E_g + \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \Omega$$

da energia de um oscilador harmônico quando $s \rightarrow \infty$, o que implica em uma função de superposição de largura muito estreita, podendo mesmo ser substituída por uma distribuição delta de Dirac. Nesse caso a largura da função peso tentativa a assume o valor característico de uma função de oscilador

$$a^2 \rightarrow \frac{\hbar}{M\Omega},$$

e o núcleo de energia se reduz a

$$K(\alpha, \alpha') \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2M} \delta''(\alpha - \alpha') + \left[\frac{1}{2} M\Omega^2 \left(\frac{\alpha + \alpha'}{2} \right)^2 + E_g \right] \delta(\alpha - \alpha')$$

A equação de Griffin - Wheeler (II.2) escrita com este núcleo de energia pode ser então resolvida e resulta numa equação de Schrödinger de um oscilador harmônico :

$$-\frac{\hbar^2}{2M} f''(x) + \left(E_g + \frac{1}{2} M\Omega^2 x^2 - E_n \right) f(x) = 0$$

Neste limite de função de superposição muito estreita a função peso funciona como uma função de onda coletiva e Q se comporta como uma variável coletiva.

É importante considerar ainda a possibilidade de que

$$\frac{\hbar}{M\Omega} < \frac{1}{45}$$

; II.5

ou seja, $Q^2 < 0$. Essa situação se constitui numa restrição para a existência de soluções da equação de Griffin - Wheeler. A ocorrência de restrições é, porém, mais uma característica do método de coordenadas geradoras do que uma consequência da aproximação quadrática especificamente, como veremos no capítulo seguinte.

CAPÍTULO III

As dificuldades do método de coordenadas geradoras

Embora não possamos estabelecer, em geral e a priori, uma correspondência entre a coordenada geradora usada para se descrever um certo movimento coletivo e uma variável dinâmica coletiva associada a esse movimento, podemos, porém, procurar estabelecer um vínculo entre a função peso, $f(X)$, cujo argumento é uma coordenada geradora, e uma função de onda que dependa de uma variável dinâmica coletiva "verdadeira". A partir desta vinculação podemos procurar também estabelecer uma correspondência entre a equação básica do método de coordenadas geradoras, (II.2) e uma equação de Schrödinger no subespaço coletivo $\mathcal{H}$ do espaço de Hilbert das funções de onda de muitos corpos.

Neste capítulo é nosso objetivo mostrar as tentativas realizadas no sentido de se estabelecer esta correspondência e as diversas dificuldades encontradas para sua completa realização. Mostramos ainda como estas dificuldades podem ser superadas com o formalismo desenvolvido por A. Toledo Piza e E. Passos (Pi Pa et al -77, Pi Pa -77) e como desta maneira podemos obter e resolver uma equação de Schrödinger para o movimento coletivo em lugar da equação de Griffin e Wheeler (II.2).

Originalmente Griffin e Wheeler (Gri Whe -57) procuraram transformar a função peso, $f(X)$, em uma função $g(Y)$, onde Y deve estar associado a uma variável dinâmica coletiva, de tal forma que as normas sejam relacionadas por

$$\int f_n^*(\alpha) N(\alpha, \alpha') f_{n'}(\alpha') d\alpha d\alpha' = \int g_n^*(r) g_{n'}(r) dr$$

com a ajuda de duas funções

$A(r, \alpha)$, chamada núcleo de um operador de alargamento e

$E(\alpha, r)$, chamada núcleo de um operador de estreitamento ;

sendo que devem satisfazer as seguintes propriedades :

$$i) \quad \int E^*(\alpha, r) N(\alpha, \alpha') E(\alpha', r') d\alpha d\alpha' = \delta(r - r')$$

$$ii) \quad \int A(r, \alpha) E(\alpha, r) d\alpha = \delta(r - r')$$

$$iii) \quad \int E(\alpha, r) A(r, \alpha') dr = \delta(\alpha - \alpha') .$$

Usando aquelas funções puderam relacionar f e g da seguinte forma

$$f_n(\alpha) = \int E(\alpha, r) g_n(r) dr \quad \text{III.1a}$$

$$g_n(r) = \int A(r, \alpha) f_n(\alpha) d\alpha \quad \text{III.1b}$$

A mecânica quântica restrita ao subsistema coletivo fica definida se substituirmos agora o núcleo de energia transformado com as funções de estreitamento

$$\bar{H}(\gamma, \gamma') = \int E^*(\alpha, \gamma) K(\alpha, \alpha') E(\alpha', \gamma') d\alpha d\alpha'$$

na equação (II.2). A equação de Schrödinger obtida então fica :

$$\int \bar{H}(\gamma, \gamma') g_n(\gamma') d\gamma' = E_n g_n(\gamma)$$

Porém, no caso da função de superposição ser uma gaussiana,

$$N(\alpha, \alpha') = e^{-s(\alpha - \alpha')^2}$$

a função de estreitamento é uma ultra-distribuição

$$E(\alpha, \gamma) \propto \int \exp\left[\frac{q^2}{8s} + iq(\alpha - \gamma)\right] dq$$

(i. é., a integração em q só deve ser feita após a integração em γ).

Nota-se claramente daí que a integral (III.1a)

que dá $f(\alpha)$ em termos de $g(\gamma)$ não convergirá, a menos que as componentes de Fourier de ordem alta de $g(\gamma)$ caiam suficientemente rápido, o que acarreta problemas na obtenção da função peso $f(\alpha)$. Estas dificuldades são exatamente aquelas mencionadas no final do capítulo anterior.

Wong (Wo -70) mostrou, porém, que existe uma correspondência formal entre o procedimento original de Griffin e Wheeler, como acabamos de descrever, e uma equação de Schrödinger numa representação não ortogonal num subespaço $\mathcal{H}$ do espaço de Hilbert do sistema de muitos corpos.

Para caracterizar esta correspondência considerou o problema de autovalores de uma hamiltoniana H num espaço de Hilbert de estados normalizados de muitos corpos

$$H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$$

e tomou uma base não ortogonal $\{|\alpha_i\rangle\}$ num subespaço $\mathcal{H}$ de dimensão N do espaço de Hilbert original. Tomando-se o complemento biortogonal daquela base, $\{|\tilde{\alpha}_j\rangle\}$, a qual deve satisfazer as condições

$$\langle \tilde{\alpha}_j | \alpha_i \rangle = \langle \alpha_i | \tilde{\alpha}_j \rangle = \delta_{ij}$$

e

$$\hat{1} = \sum_{i=1}^N |\alpha_i\rangle \langle \tilde{\alpha}_i| = \sum_{i=1}^N |\tilde{\alpha}_i\rangle \langle \alpha_i| ,$$

pôde reescrever a equação de autovalores no subespaço $\mathcal{H}$ como

$$\sum_{j=1}^N \left[\langle \alpha_i | H | \alpha_j \rangle - E \langle \alpha_i | \alpha_j \rangle \right] \langle \tilde{\alpha}_j | \Psi \rangle = 0$$

Esta é, porém, reconhecidamente uma versão discretizada da equação do método de coordenadas geradoras se fizermos as correspondências

$$\langle \alpha_i | H | \alpha_j \rangle \longrightarrow H(\alpha_i, \alpha_j)$$

$$\langle \alpha_i | \alpha_j \rangle \longrightarrow N(\alpha_i, \alpha_j)$$

$$\langle \tilde{\alpha}_j | \Psi \rangle \longrightarrow f(\alpha_j)$$

e que pode assumir a forma integral se fizermos α variar continuamente.

A correspondência entre os dois procedimentos fica então completamente realizada quando se faz a associação

$$E(\alpha, \gamma) \longrightarrow \langle \tilde{\alpha} | \gamma \rangle$$

e

$$A(\gamma, \alpha) \longrightarrow \langle \gamma | \alpha \rangle$$

uma vez que as relações trivialmente verificadas

$$\int \langle \gamma | \tilde{\alpha} \rangle \langle \alpha | \alpha' \rangle \langle \tilde{\alpha}' | \gamma' \rangle d\alpha d\alpha' = \delta(\gamma - \gamma')$$

$$\int \langle \gamma | \alpha \rangle \langle \tilde{\alpha} | \gamma' \rangle d\alpha = \delta(\gamma - \gamma')$$

$$\int \langle \tilde{\alpha} | \gamma \rangle \langle \gamma | \alpha' \rangle d\gamma = \delta(\alpha - \alpha'),$$

quando o conjunto de vetores $\{|\gamma\rangle\}$ é ortonormalizado, são exatamente as relações i), ii) e iii) de Griffin e Wheeler. Neste esquema o novo núcleo de energia é reinterpretado como :

$$\tilde{H}(\gamma, \gamma') = \int \langle \gamma | \tilde{\alpha} \rangle \langle \alpha | H | \alpha' \rangle \langle \tilde{\alpha}' | \gamma' \rangle d\alpha d\alpha'$$

O aparecimento das anomalias na função peso $f(\alpha)$, que como já visto aparecem no formalismo de Griffin e Wheeler, fica melhor caracterizado do ponto de vista cinemático com o formalismo de bases biortogonais e pode-se assim localizar mais facilmente a origem do comportamento daquela função. Esta análise das anomalias da função peso pode ser feita novamente para o caso de uma função de superposição ser uma gaussiana. Neste caso obtém-se a expressão

$$\langle \tilde{\alpha} | \tilde{\alpha}' \rangle = \text{constante} \int \exp\left[\frac{q^2}{4s} + iq(\alpha - \alpha')\right] dq$$

para a norma dos estados biortogonais, que é novamente uma ultra-distribuição.

Como

$$f(\alpha) = \langle \tilde{\alpha} | \Psi \rangle = \int \langle \tilde{\alpha} | \tilde{\alpha}' \rangle \langle \alpha' | \Psi \rangle d\alpha',$$

notamos claramente que $f(\alpha)$ poderá divergir mesmo quando $|\Psi\rangle$ é um estado normalizado do espaço de Hilbert $\mathcal{H}$, pois $\langle \tilde{\alpha} | \tilde{\alpha}' \rangle$ é uma ultra distribuição. A função $f(\alpha)$ pode divergir se as componentes de Fourier de ordem alta de $\langle \alpha' | \Psi \rangle$ não caem suficientemente rápido, cor-

respondendo, desta maneira, exatamente às condições descritas para a convergência daquela função quando definida em (III.1a). O aparecimento destas funções de comportamento não desejado está ligado ao fato de termos usado os estados complementares biortogonais $|\tilde{\alpha}_i\rangle$ que não são estados do espaço de Hilbert original $\mathcal{H}$. Esta é a origem, como vista no contexto do formalismo de bases biortogonais, do comportamento anômalo da função peso $f(\alpha)$ mencionado no capítulo II.

Paralelamente a estas funções $f(\alpha)$ que podem crescer sem limites ocorrem aquelas soluções que são finitas e que se constituem nas soluções da equação (II.2), as quais formam o subespaço $\mathcal{H}_{CG}$ do espaço $\mathcal{H}$.

O ponto crucial apontado por esta análise é a existência de dois subespaço $\mathcal{H}$ e $\mathcal{H}_{CG}$, onde $\mathcal{H}_{CG}$ pode estar contido em $\mathcal{H}$. Neste caso ocorrem estados em $\mathcal{H}$ que não podem ser gerados pelo ansatz (II.1) de Griffin e Wheeler. Para estes casos a função peso $f(\alpha)$ tem comportamento anômalo.

Estes problemas decorrentes da tentativa de extensão do subespaço $\mathcal{H}_{CG}$ para o espaço $\mathcal{H}$ aparecem também no enfoque alternativo de Brink e Weiguny (Bri We -68), no qual os autores procuram uma base ortonormal para o espaço $\mathcal{H}$ com os estados de base rotulados por um parâmetro q ; ou seja, os vetores $|q\rangle$ satisfazem as relações :

$$\langle q|q'\rangle = \delta(q-q')$$

e

$$\hat{1} = \int |q\rangle\langle q| dq$$

Supõe-se ainda a existência de uma função $\chi(q, \alpha)$

definida como

$$\chi(q, \alpha) \equiv \langle q|\alpha\rangle$$

e que satisfaz

$$\int \chi^*(q, \alpha) \chi(q, \alpha') dq = N(\alpha, \alpha')$$

e

$$\int \chi^*(q, \alpha) h(q, q') \chi(q', \alpha') dq dq' = H(\alpha, \alpha') .$$

Com estas funções assim definidas pode-se também transformar a equação de Griffin - Wheeler em uma equação integral de Schrödinger no subespaço

$$\int [h(q, q') - E \delta(q - q')] g(q') dq' = 0 \quad \text{III.2}$$

onde

$$g(q) \equiv \int \chi(q, \alpha') f(\alpha') d\alpha' .$$

Uma vez que o conjunto $\{|q\rangle\}$ é uma base ortonormal para o espaço $\mathcal{H}$ pode-se procurar as soluções da equação III.2 em todo aquele espaço. Novamente aqui pode ocorrer que, em virtude de se procurar resolver a equação de Schrödinger no subespaço $\mathcal{H}$ em substituição à equação do método de coordenadas geradoras, apareçam soluções $g(q)$ para as quais a função peso correspondente não existe.

A solução procurada para se contornar os problemas que podem ocorrer com a função peso quando se usa, em particular, uma função de superposição da forma gaussiana e coordenadas geradoras reais foi a introdução de coordenadas geradoras complexas. Estas já tinham sido usadas, porém, no contexto de projeção dupla de Peierls e Thouless (Pe Tho -62) onde o método de coordenadas geradoras é empregado para se restaurar a invariância de Galileu em funções de onda nucleares. Neste esquema usa-se um par de coordenadas geradoras (α, p) , onde p pode ser interpretado como um parâmetro associado ao par canônico conjugado da variável dinâmica associada a α .

Por outro lado, na situação em que α afeta propriedades dinâmicas, no sentido do capítulo II, a extensão para valores complexos da coordenada geradora foi desenvolvido basicamente por Brink e Weiguny (Bri We -68) e Wong (Wo -70), que usando funções de superposição gaussianas de variáveis complexas conseguiram encontrar funções peso $f(\alpha)$ que não mais divergem.

Este formalismo é baseado na verificação de Bargmann (Ba -61) de que existe um mapeamento unitário do espaço de Hilbert de funções de quadrado integrável em um espaço de funções analíticas inteiras, no qual o produto escalar hermitiano é definido como

$$\langle f | g \rangle = \int f^*(z) g(z) d\mu(z)$$

onde $d\mu(z) = \frac{1}{\pi} \exp(-z^*z) dz$.

Em particular, neste espaço, as potências z^n de uma variável complexa z satisfazem a relação de ortonormalidade

$$\frac{1}{\pi} \int z^m z^{*n} e^{-z^*z} dz = n! \delta_{nm}$$

Quando se toma a expansão em série da função de superposição

$$\exp\left[-\frac{1}{2}(z^*-z')^2\right] = \sum_{n=0}^{\infty} \left[\exp\left(-\frac{z^{*2}}{2}\right) \frac{z^{*n}}{\sqrt{n!}} \right] \left[\exp\left(-\frac{z'^2}{2}\right) \frac{z^n}{\sqrt{n!}} \right]$$

e se define

$$\langle z | n \rangle = \exp\left(-\frac{z^{*2}}{2}\right) \frac{z^{*n}}{\sqrt{n!}}$$

então aquela fórmula de Bargmann nos dá a relação de ortonormalidade

$$\frac{1}{\pi} \int \langle m | z \rangle \exp\left[\frac{1}{2}(z-z^*)^2\right] \langle z | n \rangle dz = \delta_{nm}.$$

Como os estados $|n\rangle$ pertencem ao subespaço $\mathcal{H}$ e são ortonormalizados consequentemente eles podem ser usados como uma base para aquele subespaço.

Wong (Wo -70) usando a expansão formal do operador unidade nos estados biortogonais e a ortonormalidade dos estados pôde encontrar que

$$\langle \tilde{z} | n \rangle = \exp \left[\frac{1}{2} (z - z^*)^2 \right] \frac{\langle z | n \rangle}{\pi} .$$

Desta maneira a função peso $f(\alpha)$, obtida da projeção de um estado normalizado $|\Psi\rangle$ de $\mathcal{H}$,

$$f(\alpha) = \langle \tilde{z} | \Psi \rangle$$

não mais diverge, pois $|\tilde{z}\rangle$ é agora um estado deste espaço.

De maneira mais pedestre podemos explicitar a diferença entre o tratamento com coordenadas geradoras reais e complexas da seguinte forma.

Consideremos a função $g(q)$ normalizada na forma

$$g(q) = \exp(-\gamma q^2) \quad , \quad \text{III.3}$$

onde $\text{Re } \gamma > 0$ e expressemos esta função na forma da integral

$$\text{i) } g(q) = \int \lambda(q, \alpha) f(\alpha) d\alpha \quad ; \quad \alpha \text{ real}$$

$$\text{ii) } g(q) = \int \lambda(q, z) f(z) d\mu_z \quad ; \quad z \text{ complexo}$$

com a função $\lambda(q, z)$ definida como

$$\lambda(q, z) = C \exp \left[-(q - z)^2 + \frac{1}{2} z^2 \right] .$$

Para o caso complexo a função peso é calculada como

$$f(z) = C_0 \exp \left(-\frac{1}{2} \frac{\gamma}{1+\gamma} z^{*2} \right)$$

enquanto que no caso real é

$$f(\alpha) = C_1 \exp \left(-\frac{1}{2} \frac{2\gamma}{1-\gamma} \alpha^2 \right) .$$

Nota-se daqui que a integral ii) convergirá para valores de γ com $\text{Re } \gamma > 0$, enquanto que i) somente convergirá se $\text{Re } \gamma < 1$. Consequentemente as funções $g(q)$ do tipo (III.3) podem ser representadas pela integral com coordenadas geradoras complexas enquanto que somente aquelas que não tenham picos agudos podem ser representadas pela integral com coordenadas geradoras reais. Vale ressaltar novamente aqui que estes problemas que aparecem no contexto de coordenadas geradoras reais são exatamente aqueles mencionados no capítulo II.

Os problemas surgidos dentro do contexto do método de coordenadas geradoras com uma coordenada real não podem, porém, ser eliminados com os tratamentos mencionados.

Com o objetivo de analisar as origens das dificuldades mencionadas anteriormente, A. Toledo Piza e E. Passos (Pi Pa et al -77) estudaram as propriedades da equação de Griffin - Wheeler no caso particular em que a função de superposição, $N(\alpha, \alpha')$, é o núcleo de um operador de Hilbert - Schmidt no espaço das funções de quadrado integrável, i.é,

$$\int |N(\alpha, \alpha')|^2 d\alpha d\alpha' < \infty$$

Nesta situação há uma decomposição da função de superposição em funções ortonormais

$$N(\alpha, \alpha') \equiv \langle \alpha | \alpha' \rangle = \sum_{\substack{n \\ \lambda_n \neq 0}} \lambda_n u_n^*(\alpha') u_n(\alpha)$$

onde os u_n satisfazem a equação de autovalores

$$\int \langle \alpha | \alpha' \rangle u_n(\alpha') d\alpha' = \lambda_n u_n(\alpha)$$

O conjunto das funções $\{u_n(\alpha)\}$ forma uma base no espaço das funções de quadrado integrável se incluirmos também as auto-funções de autovalor zero; i.é,

$$\sum_n u_n^*(\alpha') u_n(\alpha) = \delta(\alpha - \alpha')$$

$$\int u_{n'}(\alpha) u_n^*(\alpha) d\alpha = \delta_{nn'}.$$

Assim os vetores

$$|n\rangle = \int u_n(\alpha) |\alpha\rangle d\alpha,$$

que formam um conjunto completo no subespaço (em geral não fechado) gerado pelo ansatz de Griffin - Wheeler, têm norma

$$\langle n | n' \rangle = \lambda_n \delta_{nn'}.$$

Paralelamente é importante notar que as autofunções da função de superposição que tenham autovalor zero gerarão vetores de norma nula no espaço de Hilbert gerado pelo ansatz de G.W. e que

$$\lambda_n \geq 0$$

uma vez se constituem na norma de vetores definidos naquele espaço. A existência de autovalores zero é uma manifestação do fato que os estados geradores $|\alpha\rangle$ não são linearmente independentes, e consequentemente concluímos que devemos nos restringir a tomar os auto estados com autovalores diferentes de zero para se evitar estas dependências lineares.

Estes fatos nos permitem escrever um conjunto de vetores ortonormais para $\lambda_n \neq 0$ na forma

$$|\bar{n}\rangle = \frac{1}{\sqrt{\lambda_n}} |n\rangle$$

O fato relevante é que o subespaço fechado do espaço de Hilbert de muitos corpos gerado pelos estados ortonormais $|\bar{n}\rangle$ é o subespaço coletivo $\mathcal{H}$, que em geral contém $\mathcal{H}_{CG}$ (gerado pelo ansatz de G.W.) como subespaço. O método proposto por A. Toledo Piza e E. Passos consiste então na construção de uma representação ortonormal no subespaço coletivo $\mathcal{H}$, a partir de propriedades da função de

superposição e do ansatz de G.W., o que permite, em princípio, diagonalizar a hamiltoniana de muitos corpos nesse subespaço e investigar uma variável dinâmica coletiva apropriada para o movimento.

Os vetores que exibem propriedades de biortogonalidade com relação ao estado gerador $|\alpha\rangle$, podem ser escritos formalmente como

$$\langle \tilde{\alpha} | \tilde{n} \rangle = \frac{u_n(\alpha)}{\sqrt{\lambda_n}}$$

e têm norma

$$\langle \tilde{\alpha} | \tilde{\alpha}' \rangle = \sum_{\substack{n \\ \lambda_n \neq 0}} \frac{u_n^*(\alpha) u_n(\alpha')}{\lambda_n} \quad \text{III.4}$$

A análise da norma dos vetores biortogonais pode ser realizada com ajuda da propriedade dos núcleos de operadores do tipo Hilbert - Schmidt, a qual garante que, se as autofunções de autovalor diferente de zero se constituem na base de um espaço de dimensão infinita, seus autovalores, λ_n , têm um ponto de acumulação em $\lambda = 0$, e este é o único ponto de acumulação possível (Re Si). Com este resultado fica claro que, embora $u_n(\alpha)$ seja uma função normalizada, pode ter zero como ponto de acumulação, o que provoca o aparecimento de uma norma não finita para $|\tilde{\alpha}\rangle$. A única possibilidade para que $|\tilde{\alpha}\rangle$ tenha norma finita será o caso em que a dimensão do espaço de autofunções $u_n(\alpha)$ de autovalores diferentes de zero, $\mathcal{F}$, seja finita. Isto é verificado trivialmente uma vez que nesta situação existe um limite inferior para os autovalores.

Quando $\mathcal{F}$ tem dimensão finita a função peso

$$f(\alpha) = \langle \tilde{\alpha} | \Psi \rangle$$

é sempre uma função de quadrado integrável e o ansatz de G.W. gera um subespaço fechado do espaço de Hilbert de muitos corpos, que é idêntico ao subespaço coletivo $\mathcal{H}_0$, e conseqüentemente a diagonalização da hamiltoniana neste subespaço coletivo é equivalente a se resolver a equação integral (II.2) com aquela função peso.

Por outro lado se $\mathcal{F}$ tem dimensão infinita ($|\tilde{\alpha}\rangle$ não tem norma finita) existem vetores no subespaço coletivo que não podem ser expressos pelo ansatz de G.W. com uma função peso regular, e desta maneira concluímos novamente que existem soluções que não podem ser obtidas convenientemente da equação integral do método de coordenadas geradoras. Dentro desta argumentação é importante ainda notar que não se pode garantir de antemão que as duas equações tenham o mesmo conjunto de soluções; isto é, não se pode garantir a priori que as soluções da equação de G.W. sejam de quadrado integrável sem o uso explícito de uma hamiltoniana.

Desta forma, do ponto de vista desta abordagem, as singularidades que aparecem no método de coordenadas geradoras reais surgem então como consequência da tentativa de se expandir certos vetores de estado em um conjunto completo de vetores linearmente independentes que têm norma arbitrariamente pequena. Assim estas dificuldades têm origens de caráter puramente cinemático e podem ser evitadas por uma renormalização dos vetores da base, o que também tem cunho estritamente cinemático. Estas dificuldades, porém, não se constituem mais em um impedimento porquanto se trabalhe agora no subespaço coletivo $\mathcal{H}$ e não mais se procura resolver o problema no subespaço $\mathcal{H}_{CG}$.

Esta análise da cinemática quântica no método de coordenadas geradoras, quando a função de superposição é o núcleo de um operador de Hilbert - Schmidt, é extremamente importante para realizações práticas. Na situação particular em que se resolve a equação de G.W. numericamente a função de superposição é automaticamente transformada em um núcleo de Hilbert - Schmidt. A equação (II.2) é substituída por

$$\sum_{j=1}^N \left(\langle \alpha_i | H | \alpha_j \rangle - E \langle \alpha_i | \alpha_j \rangle \right) f(\alpha_j) = 0$$

onde os α_i 's formam um conjunto discreto e finito de pontos e consequentemente toda análise desenvolvida anteriormente vale nesse caso. Além disso é possível mostrar que qualquer caso, por uma mudança conveniente de rótulos, pode ser reduzido ao caso de um núcleo de Hilbert-Schmidt, portanto sem perda de generalidade.

Um exemplo importante de solução numérica da equação (II.2) é o trabalho de Flocard e Vautherin (Flo Vau -75,76), no qual procuram espectros vibracionais do tipo monopulares, dipolares e quadrupolares nos núcleos de ^4He , ^{16}O e ^{40}Ca . A função de superposição nestes trabalhos não é o núcleo de um operador de Hilbert - Schmidt; contudo, com a solução numérica ela é assim transformada. Consequentemente uma análise dos resultados destes trabalhos pode ser feita com o formalismo descrito. Operacionalmente o procedimento de Flocard e Vautherin consiste em :

- a) Diagonalizar a matriz correspondente à função de superposição.
- b) Eliminar os autoestados com autovalor menor que um certo valor ϵ dado.
- c) Definir a função

$$g_i = N_i^{\frac{1}{2}} f_i$$

- d) Projeter e diagonalizar a matriz correspondente ao núcleo de energia no subespaço truncado gerado pelos autoestados da função de superposição com autovalores maiores que ϵ .
- e) Testa-se a estabilidade das energias finais variando-se os valores de ϵ do truncamento.

O espectro obtido corresponde aos autovalores procurados para o movimento coletivo em estudo.

A extensão deste método para tipos mais gerais de funções de superposição foi também desenvolvida por A. Toledo Piza e E. Passos (Pi Pa -77).

O ingrediente básico desse novo formalismo é a diagonalização da função de superposição com o uso do Teorema Espectral da Análise Funcional (Re Si); nestas condições existe a restrição, porém que a função de superposição, considerada como núcleo de operador, seja auto adjunto (i.é. ,positivo e limitado). Como, porém, as funções de superposição são em geral deste tipo o método tem uma larga margem de aplicação.

Assim procura-se inicialmente uma transformação tal que

$$\int U_{x'}^{\dagger}(\alpha') N(\alpha', \alpha) U_x(\alpha) d\alpha d\alpha' = \Lambda(x) \delta(x - x') \quad \text{III.5}$$

com

$$\int U_{x'}^{\dagger}(\alpha') U_x(\alpha) d\alpha d\alpha' = \delta(x - x')$$

e

$$\int U_{x'}^{\dagger}(\alpha') U_x(\alpha) dx = \delta(\alpha - \alpha').$$

$\Lambda(x)$ é o espectro do operador $N(\alpha, \alpha')$.

Novamente aqui o espaço nulo de $N(\alpha, \alpha')$ está associado com uma dependência linear entre os estados geradores $|\alpha\rangle$, embora não se possa interpretar $\Lambda(x)$ como dando uma norma de vetores de um conjunto ortogonal no subespaço coletivo como no caso anterior. Isto permite que se elimine o espaço nulo sem perda de generalidade quando se constroi o espaço coletivo com o ansatz de G.W. .

Sem o espaço nulo podemos escrever analogamente ao caso anterior a projeção do vetor $|\bar{\Psi}\rangle$, gerado pelo ansatz de G.W., na direção do estado gerador

$$\langle \alpha | \Psi \rangle = \int \langle \alpha | \alpha' \rangle f(\alpha') d\alpha' \equiv \int N(\alpha, \alpha') f(\alpha') d\alpha' \quad \text{III.6}$$

Como podemos reescrever (III.5) como

$$\int \frac{U_x^+(\alpha)}{\sqrt{\Lambda(x)}} \langle \alpha | \alpha' \rangle \frac{U_{x'}(\alpha')}{\sqrt{\Lambda(x')}} d\alpha d\alpha' = \delta(x-x') \quad \text{III.7}$$

podemos também escrever, em analogia ao caso anterior, as funções ortogonais no subespaço coletivo

$$g(x) \equiv \langle x | \Psi \rangle = \int \frac{U_x^+(\alpha)}{\sqrt{\Lambda(x)}} \langle \alpha | \Psi \rangle = \sqrt{\Lambda(x)} \int U_x^+(\alpha) f(\alpha) d\alpha$$

(onde usou-se III.7 e III.6); as quais têm também um inverso formal

$$f(\alpha) = \int \frac{g(x)}{\sqrt{\Lambda(x)}} U_x(\alpha) dx$$

Conclui-se de novo desta expressão para a função peso, $f(\alpha)$, que nem todo vetor de estado que admite a representação g estará no subespaço coletivo regular gerado pelo ansatz de G.W., uma vez que o operador $\Lambda^{-1}(x)$ pode não ser limitado; de forma geral a relação entre o conjunto de vetores que admitem uma representação g e o subespaço coletivo regular gerado pelo ansatz de G.W. dependerá da natureza particular do espectro $\Lambda(x)$.

Com este formalismo podemos reescrever a equação

(II.2) como

$$\int [\langle x | H | x' \rangle - E \delta(x-x')] g(x') dx' = 0 \quad \text{III.8}$$

onde agora

$$\langle x | H | x' \rangle = \int \frac{U_x^\dagger(\alpha)}{\sqrt{\Lambda(x)}} \langle \alpha | H | \alpha' \rangle \frac{U_{x'}(\alpha')}{\sqrt{\Lambda(x')}} d\alpha d\alpha' \quad \text{III.9}$$

é uma hamiltoniana definida no subespaço coletivo $\mathcal{H}$, e $g(x)$ tem interpretação de função de onda coletiva cujo argumento é uma boa coordenada coletiva, no sentido que os vetores $|x\rangle$ do subespaço coletivo satisfazem as condições de ortonormalidade.

Neste formalismo é possível então passar-se do problema de Griffin - Wheeler para um problema de uma equação de Schrödinger num subespaço coletivo do espaço de Hilbert de muitos corpos. Este fato se constitui em uma grande vantagem, pois que pode-se então obter hamiltonianas coletivas a partir de hamiltonianas que descrevem interações de muitos corpos, e que agem em estados de um espaço de Hilbert de funções de onda de quadrado integrável.

Esta extensão do método de coordenadas geradoras é feita sem se manifestem as anomalias provenientes da representação usada no subespaço coletivo, as quais tinham caráter estritamente cinemático; e apresenta de uma maneira completa como o subespaço coletivo relevante é determinado a partir do conjunto de funções de onda geradoras adotado.

Usaremos a seguir este formalismo para os cálculos que faremos para o movimento coletivo particular do modo monopolar de vibrações em núcleos esféricos. Particularmente nos restringiremos aos casos específicos dos núcleos de ^4He , ^{16}O e ^{40}Ca .

CAPÍTULO IV

A função de superposição e o núcleo de energia para as vibrações monopolares isoescares

Dentre os muitos modos que um sistema esfericamente simétrico pode oscilar existem modos que mantêm a simetria esférica. Estas oscilações correspondem a oscilações de densidade e podem envolver também a variação do raio da esfera harmonicamente com o tempo de maneira isotrópica. Estes modos de oscilação incluem o análogo clássico das vibrações monopolares isoescares em núcleos esféricos, que também são conhecidos como modos de respiração, e que se constituirão em nosso objeto de estudo no trabalho subsequente. Serão feitas aplicações ao caso particular dos núcleos de ${}^4\text{He}$, ${}^{16}\text{O}$ e ${}^{40}\text{Ca}$ com o método de coordenadas geradoras e usando a interação de Skyrme.

Este programa foi realizado em parte por Flocard e Vautherin (Flo Vau -75,76), tendo sido o objetivo desses trabalhos a obtenção dos espectros das vibrações através da resolução numérica da equação de Griffin - Wheeler, e não o estabelecimento da mecânica quântica correspondente, como pretendemos realizar aqui. As diferenças entre os dois tratamentos se fazem sentir na compreensão das causas de certas características básicas do método de coordenadas geradoras, que são completamente obscurecidas pelo cálculo numérico, e na possibilidade que se tem então de, exibindo uma hamiltoniana coletiva, estudar as expressões para energias de transição e parâmetros de massa como função das características da interação de Skyrme usada.

Neste capítulo obteremos as expressões analíticas para a função de superposição e o núcleo de energia quando usamos a interação de Skyrme para os núcleos de ${}^4\text{He}$, ${}^{16}\text{O}$ e ${}^{40}\text{Ca}$.

IV.a) Cálculo da função de superposição

A escolha natural para a coordenada geradora neste caso recai sobre um parâmetro que esteja associado ao raio quadrático médio nuclear.

Desta forma a nossa função de onda geradora será escolhida como sendo o determinante de Slater construído com funções de onda de oscilador harmônico como estados de partícula independente e consideraremos preliminarmente o inverso do parâmetro do oscilador

$$\alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

como nossa coordenada geradora.

De forma explícita podemos escrever

$$|\alpha\rangle \equiv \Phi(\bar{r}; \alpha) = \det \{ \varphi_j(\bar{r}; \alpha) \}$$

onde j indica todos os números quânticos que caracterizam uma partícula num nível de energia do oscilador harmônico e

$$\varphi_{nlm}(\bar{r}; \alpha) = \sqrt{\frac{2\alpha^3 n! (2l+1)(l-m)!}{\Gamma(n+l+\frac{3}{2}) 4\pi (l+m)!}} \frac{R_{nl}(r\alpha)}{r\alpha} Y_{lm}(\theta, \phi)$$

é a parte espacial, onde

$$R_{nl}(r\alpha) = \exp\left(-\frac{r^2\alpha^2}{2}\right) (r\alpha)^{l+1} L_n^{l+\frac{1}{2}}(r^2\alpha^2)$$

e a normalização é aquela encontrada em (Ba Pro).

Sabemos, porém, que para estados determinantis descrevendo núcleos mágicos com $N = Z$ vale a relação (Bri -66)

$$N(\alpha, \alpha') \equiv \langle \alpha' | \alpha \rangle = \left\{ \det \left[\int \varphi_j^*(\bar{r}; \alpha') \varphi_k(\bar{r}; \alpha) d^3r \right] \right\}^4$$

ou seja, a função de superposição calculada para dois determinantes é igual ao determinante da matriz montada com as funções de superposição

das funções de onda de partícula independente. O expoente 4 leva em conta a degenerescência de spin e isospin.

Com a finalidade de simplificar nossos cálculos posteriores vamos expandir as funções de onda de partícula independente, que dependem do parâmetro α em novas funções de onda que dependam de outro parâmetro $\bar{\alpha}$. Por conveniência posterior introduzimos a quantidade α'^2 através de

$$\bar{\alpha}^2 = \frac{\alpha^2 + \alpha'^2}{2}$$

Esta transformação pode ser levada a efeito com a ajuda da expressão para os polinômios de Laguerre (Ba Pro) :

$$L_n^{l+\frac{1}{2}}(r^2\alpha^2) = \sum_{t=0}^n A_{nt}(\alpha^2, \bar{\alpha}^2) L_t^{l+\frac{1}{2}}(r^2\bar{\alpha}^2)$$

onde

$$A_{nt}(\alpha^2, \bar{\alpha}^2) = \frac{\Gamma(n+l+\frac{3}{2})}{\Gamma(t+l+\frac{3}{2})(n-t)!} \left(\frac{\alpha}{\bar{\alpha}}\right)^{2t} \left(1 - \frac{\alpha^2}{\bar{\alpha}^2}\right)^{n-t}$$

é uma matriz triangular.

Desta forma a função de onda de partícula independente se transforma como

$$\varphi_j^*(\bar{r}; \alpha') = \exp\left[\frac{r^2}{4}(\alpha^2 - \alpha'^2)\right] \sum_{\nu} L_{j\nu} \varphi_{\nu}^*(\bar{r}; \bar{\alpha})$$

onde a matriz $L_{j\nu}$ é escrita como

$$L_{j\nu} = A_{j\nu} \left(\frac{\alpha'}{\bar{\alpha}}\right)^{l+\frac{3}{2}}$$

Deve-se notar ainda que

$$\varphi_k(\bar{r}; \alpha) = \exp\left[-\frac{r^2}{4}(\alpha^2 - \alpha'^2)\right] \sum_{\mu} M_{\mu k} \varphi_{\mu}(\bar{r}; \bar{\alpha})$$

e analogamente

$$M_{\mu k} = A_{\mu k} \left(\frac{\alpha}{\bar{\alpha}}\right)^{l + \frac{3}{2}}$$

Podemos agora mostrar a relação importante

$$\begin{aligned} I_{jk} &\equiv \int \varphi_j^*(\bar{r}; \alpha') \varphi_k(\bar{r}; \alpha) d^3r = \sum_{\nu \mu} \int L_{j\nu} M_{\mu k} \varphi_{\nu}^*(\bar{r}; \bar{\alpha}) \varphi_{\mu}(\bar{r}; \bar{\alpha}) d^3r \\ &= \sum_{\nu \mu} L_{j\nu} M_{\mu k} \int \varphi_{\nu}^*(\bar{r}; \bar{\alpha}) \varphi_{\mu}(\bar{r}; \bar{\alpha}) d^3r \\ &= \sum_{\nu \mu} L_{j\nu} M_{\mu k} \delta_{\mu\nu} = \sum_{\nu} L_{j\nu} M_{\nu k} \end{aligned}$$

Assim

$$I_{jk} = (\tilde{L} \tilde{M})_{jk}$$

IV.1

Ora, como a função de superposição $N(\alpha, \alpha')$ é determinada como

$$N(\alpha, \alpha') = [\det \tilde{I}]^4$$

temos somente que tomar

$$\det \tilde{I} = \det(\tilde{L} \tilde{M}) = \det \tilde{L} \cdot \det \tilde{M}$$

As matrizes $\tilde{L}$ e $\tilde{M}$ são triangulares, logo seus determinantes são obtidos pelo produto de seus elementos diagonais, o que dá

$$\det \tilde{I} = \prod_{N=0}^{N_{\max}} \left[\frac{(\alpha \alpha')^{l+\frac{3}{2}}}{\bar{\alpha}^{2l+3}} \right]^{2l+1} \prod_{n=0}^{\left[\frac{N}{2}\right]} \left(\frac{\alpha \alpha'}{\bar{\alpha}^2} \right)^{2n}$$

onde N é o número quântico principal do oscilador ($= 2n+1$), $N_{\max}$ é o número quântico principal do oscilador que indica a última camada correspondente a cada núcleo e $\left[\frac{N}{2}\right]$ indica o maior inteiro contido em $N/2$. O expoente $(2l+1)$, do primeiro termo, corresponde à degenerescência em m .

Esta expressão pode ser reescrita como

$$\det \tilde{I} = \prod_{N=0}^{N_{\max}} \prod_{n=0}^{\left[\frac{N}{2}\right]} \left(\frac{\alpha \alpha'}{\bar{\alpha}^2} \right)^{2n} \left[\frac{(\alpha \alpha')^{N-2n+\frac{3}{2}}}{\bar{\alpha}^{2N-4n+3}} \right]^{2N-4n+1}$$

Finalmente podemos escrever a expressão analítica da função de superposição :

$$N(\alpha, \alpha') \equiv \langle \alpha' | \alpha \rangle = (\det \tilde{I})^4 = \left(\frac{\alpha \alpha'}{\bar{\alpha}^2} \right)^T = \left(\frac{2\alpha \alpha'}{\alpha^2 + \alpha'^2} \right)^T \quad \text{IV.2}$$

onde $T = 6$ para o ^4He , 36 para o ^{16}O e 120 para o ^{40}Ca .

IV.b) Cálculo do núcleo de energia

A) A interação de Skyrme

A interação de Skyrme (Sky -59) na sua forma original é escrita como um potencial

$$V = \sum_{ij} v_{ij} + \sum_{ijk} v_{ijk}$$

com uma interação de dois corpos v_{ij} e uma interação de três corpos v_{ijk} .

A expressão para a parte de dois corpos pode ser vista como parte de uma expansão de uma interação de curto alcance no espaço de momentos e é dada por

$$\langle \bar{k} | v_{12} | \bar{k}' \rangle = t_0 (1 + \chi_0 P_\sigma) + \frac{1}{2} t_1 (\bar{k}^2 + k'^2) + t_2 \bar{k} \cdot \bar{k}' + i W_0 (\bar{\sigma}_1 + \bar{\sigma}_2) \cdot \bar{k} \times \bar{k}'$$

onde $\bar{k}$ e $\bar{k}'$ são vetores de onda relativos de dois nucleons. Nesta expressão P_σ é o operador de troca de spin e os $\bar{\sigma}$'s são matrizes de Pauli.

Para fins práticos, porém, a forma mais conveniente para a interação de Skyrme é aquela escrita no espaço de configurações:

$$v_{12}(\bar{r}_1, \bar{r}_2) = t_0 (1 + \chi_0 P_\sigma) \delta(\bar{r}_1 - \bar{r}_2) + \frac{t_1}{2} \left[\delta(\bar{r}_1 - \bar{r}_2) \bar{k}^2 + \bar{k}'^2 \delta(\bar{r}_1 - \bar{r}_2) \right] + t_2 \bar{k}' \cdot \delta(\bar{r}_1 - \bar{r}_2) \bar{k} + i W_0 (\bar{\sigma}_1 + \bar{\sigma}_2) \cdot \bar{k}' \times \delta(\bar{r}_1 - \bar{r}_2) \bar{k}$$

Nesta expressão, $\bar{k}$ denota o operador $\frac{\bar{\nabla}_1 - \bar{\nabla}_2}{2i}$ agindo à direita e $\bar{k}'$ o operador $-\frac{\bar{\nabla}_1 - \bar{\nabla}_2}{2i}$ agindo à esquerda.

A contribuição de três corpos da interação de Skyrme é tomada simplesmente como uma força de Wigner de alcance zero :

$$v_{123}(\bar{r}_1, \bar{r}_2, \bar{r}_3) = t_3 \delta(\bar{r}_1 - \bar{r}_2) \delta(\bar{r}_2 - \bar{r}_3)$$

Ela pode ser reescrita como uma interação de dois corpos dependente da densidade no caso de núcleos par - par (Vau Bri -72). Desta maneira esta contribuição fica

$$v_{123}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{t_3}{6} (1 + P_\sigma) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \rho\left(\frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{2}\right).$$

Este termo de três corpos é a simulação fenomenológica mais simples dos efeitos de muitos corpos e descreve a maneira como a interação de dois corpos é influenciada pela presença de outras partículas.

Deve ser ressaltado mais uma vez que a interação de Skyrme é uma representação aproximada da força nucleon - nucleon efetiva que deve ter validade somente para movimentos relativos baixos.

Originalmente Skyrme fixou o valor numérico dos parâmetros t_0 , t_1 , t_2 e t_3 , ajustando a energia de ligação e a densidade da matéria nuclear ($E/A = -17,04$ Mev e $k_F = 1,37$ fm $^{-1}$) e também a energia de ligação e diferenças de massa em alguns núcleos leves. A interação de Skyrme com estes parâmetros é tradicionalmente conhecida como SI.

Outros conjuntos de parâmetros foram obtidos por ajustes de outras propriedades nucleares e estes ajustes têm sido mesmo efetuados em um número muito grande de elementos da tabela periódica.

Em nossos cálculos usaremos os seis conjuntos de parâmetros apresentados por Beiner (Be et al -75), dispostos na Tabela I e nos restringiremos a usar as interações de Skyrme sem as contribuições dos termos de spin - órbita e coulombiano.

B) O núcleo de energia

O cálculo da expressão analítica para o núcleo de energia é bastante simplificado quando se usa uma observação do apêndice de (Bri -66), que permite escrever

$$\langle \alpha' | H | \alpha \rangle = \langle \alpha' | \alpha \rangle \int H(\bar{r}) d^3r$$

quando o estado

$$|\alpha\rangle \equiv \Phi(\bar{r}; \alpha) = \det \{ \varphi_j(\bar{r}; \alpha) \}$$

é um determinante de Slater.

O funcional de energia $H(\bar{r})$ pode ser calculado com o uso explícito da expressão dada por Brink (Bri -66) para operadores de um e dois corpos respectivamente

$$\langle \alpha' | T | \alpha \rangle = \langle \alpha' | \alpha \rangle \sum_{\lambda \mu} \langle \varphi_\lambda | t_\mu | \varphi_\mu \rangle (I^{-1})_{\mu\lambda} \quad \text{IV.3a}$$

$$\begin{aligned} \langle \alpha' | V | \alpha \rangle &= \frac{\langle \alpha' | \alpha \rangle}{2} \sum_{\substack{ijkl \\ aa'bb'}} \langle \varphi_{ia} \varphi_{jb} | V | \varphi_{ka'} \varphi_{lb'} \rangle \times \\ &\times \left[(I^{-1})_{ki} (I^{-1})_{lj} \delta_{aa'} \delta_{bb'} - (I^{-1})_{kj} (I^{-1})_{li} \delta_{ab'} \delta_{ba'} \right] \quad \text{IV.3b} \end{aligned}$$

onde $\tilde{I}$ é a matriz IV.1, cujo determinante está associado à função de superposição.

Com a ajuda das expressões para a densidade, densidade de energia cinética e densidade de corrente, definidas respectivamente como:

$$a) \quad \rho(\bar{r}) = 4 \sum_{\lambda \mu} (I^{-1})_{\mu\lambda} \varphi_\lambda^*(\bar{r}; \alpha') \varphi_\mu(\bar{r}; \alpha)$$

$$b) \quad T(\bar{r}) = 4 \sum_{\lambda \mu} (I^{-1})_{\mu\lambda} \nabla \varphi_{\lambda}^*(\bar{r}; \alpha') \cdot \nabla \varphi_{\mu}(\bar{r}; \alpha)$$

$$e) \quad \bar{j}(\bar{r}) = 2 \sum_{\lambda \mu} (I^{-1})_{\mu\lambda} \left[\varphi_{\lambda}^*(\bar{r}; \alpha') \nabla \varphi_{\mu}(\bar{r}; \alpha) - (\nabla \varphi_{\lambda}^*(\bar{r}; \alpha')) \varphi_{\mu}(\bar{r}; \alpha) \right]$$

podemos escrever o funcional de energia $H(\bar{r})$ (Apêndice A) para o modo monopolar isoescalar

$$H(\bar{r}) = \frac{\hbar^2}{2m} T(\bar{r}) + \frac{3}{8} t_0 \rho^2(\bar{r}) + \frac{1}{16} (3t_1 + 5t_2) (\rho(\bar{r}) T(\bar{r}) + \bar{j}^2(\bar{r})) + \frac{1}{64} (9t_1 - 5t_2) [\nabla \rho(\bar{r})]^2 + \frac{1}{16} t_3 \rho^3(\bar{r}) \quad \text{IV.4}$$

Este funcional de energia caracteriza o modo monopolar isoescalar de vibrações de núcleos esféricos devido a escolha específica da função de onda geradora que fizemos para estes núcleos e não por causa da interação adotada.

Quando se calculou os elementos de matriz da interação de Skyrme usou-se a densidade como definida anteriormente em a)

$$\rho(\bar{r}) = 4 \sum_{\lambda \mu} (I^{-1})_{\mu\lambda} \varphi_{\lambda}^*(\bar{r}; \alpha') \varphi_{\mu}(\bar{r}; \alpha)$$

que é a parte diagonal da densidade mais geral

$$\rho(\bar{r}, \bar{r}') = 4 \sum_{\lambda \mu} (I^{-1})_{\mu\lambda} \varphi_{\lambda}^*(\bar{r}; \alpha') \varphi_{\mu}(\bar{r}'; \alpha)$$

Embora esta densidade satisfaça as condições $\text{Tr } \rho = A$ e $\rho^2 = \rho$, ela não é auto adjunta; i.e.,

$$\rho^\dagger \neq \rho$$

É conveniente então exprimir ρ em termos de uma nova densidade que satisfaça todas aquelas condições. Isto é feito com

o mesmo recurso usado para o cálculo da função de superposição

$$\rho_0(\bar{r}, \bar{r}') = 4 \sum_{\kappa} \varphi_{\kappa}^*(\bar{r}; \bar{\alpha}) \varphi_{\kappa}(\bar{r}'; \bar{\alpha}) ;$$

ou seja, escrevemos uma nova densidade onde as funções de onda dependem agora de $\bar{\alpha}$, definido novamente como

$$\bar{\alpha}^2 = \frac{\alpha^2 + \alpha'^2}{2} ;$$

analogamente ao que foi feito no cálculo da função de superposição.

As duas densidades são relacionadas por

$$\rho(\bar{r}, \bar{r}') = e^{\frac{\chi(\bar{r}) - \chi(\bar{r}')}{2}} \rho_0(\bar{r}, \bar{r}') \quad \text{IV.5}$$

como é fácil de se verificar a partir de

$$\begin{aligned} \sum_{\lambda \mu} (I^{-1})_{\mu \lambda} \varphi_{\lambda}^*(\bar{r}; \alpha') \varphi_{\mu}(\bar{r}'; \alpha) &= \sum_{\lambda \mu} e^{\frac{r^2}{4}(\alpha^2 - \alpha'^2) - \frac{r'^2}{4}(\alpha^2 - \alpha'^2)} \times \\ &\times \sum_{\alpha \beta} (I^{-1})_{\mu \lambda} L_{\lambda \alpha} M_{\beta \mu} \varphi_{\alpha}^*(\bar{r}; \bar{\alpha}) \varphi_{\beta}(\bar{r}'; \bar{\alpha}) \end{aligned}$$

onde $\tilde{I}$ e $\tilde{M}$ são as matrizes definidas anteriormente. Usando-se (IV.1) e chamando

$$\chi(\bar{r}) = \frac{r^2}{4} (\alpha^2 - \alpha'^2)$$

$$\chi(\bar{r}') = \frac{r'^2}{4} (\alpha^2 - \alpha'^2)$$

obtemos (IV.5).

Desta forma a densidade definida originalmente é reescrita em termos dessa nova densidade como

$$\rho(\bar{r}) \equiv \rho(\bar{r}, \bar{r}) = \rho_0(\bar{r}, \bar{r})$$

Analogamente podemos relacionar as densidades de energia cinética e densidade de corrente com esta nova densidade (Apêndice B):

$$T(\bar{r}) = T_0(\bar{r}, \bar{r}) - \rho_0(\bar{r}, \bar{r}) [\bar{\nabla} \chi(\bar{r})]^2$$

$$\bar{j}(\bar{r}) = -\rho_0(\bar{r}, \bar{r}) \bar{\nabla} \chi(\bar{r})$$

Notamos, desta forma, que o termo $\rho T + \bar{j}^2$, que aparece na expressão (IV.4) para o funcional de energia, deve ser alterado então para $\rho_0 T_0$, o que nos dá finalmente

$$\begin{aligned} H(\bar{r}) = & \frac{\hbar^2}{2m} \left[T_0(\bar{r}, \bar{r}) - \rho_0(\bar{r}, \bar{r}) [\bar{\nabla} \chi(\bar{r})]^2 \right] + \frac{3}{8} t_0 \rho_0^2(\bar{r}, \bar{r}) + \\ & + \frac{1}{16} (3t_1 + 5t_2) \rho_0(\bar{r}, \bar{r}) T_0(\bar{r}, \bar{r}) + \frac{1}{64} (9t_1 - 5t_2) [\bar{\nabla} \rho_0(\bar{r}, \bar{r})]^2 + \\ & + \frac{1}{16} t_3 \rho_0^3(\bar{r}, \bar{r}). \end{aligned}$$

O núcleo de energia é calculado diretamente de

$$\langle \alpha' | H | \alpha \rangle = \langle \alpha' | \alpha \rangle \int H(\bar{r}) d^3 r$$

A integração do funcional $H(\bar{r})$ pode ser realizada facilmente e o resultado será escrito como uma função de α e α' , com dependência explícita em $\bar{\alpha}$, e coeficientes que dependem dos parâmetros da interação de Skyrme, além das constantes obtidas para cada núcleo em questão, mais uma contribuição proveniente do termo $(\bar{\nabla} \chi)^2$ que será função de $\alpha - \alpha'$.

Explicitamente

$$\begin{aligned} \int H(\bar{r}) d^3 r = & \frac{\hbar^2}{2m} 2c_1 \bar{\alpha}^2 + \frac{3t_0}{2(2\pi)^{3/2}} d_0 \bar{\alpha}^3 + \left[\frac{(3t_1 + 5t_2)}{8(2\pi)^{3/2}} h_0 + \right. \\ & \left. + \frac{(9t_1 - 5t_2)}{16(2\pi)^{3/2}} g_0 \right] \bar{\alpha}^5 + \frac{4t_3}{(\pi\sqrt{3})^3} f_0 \bar{\alpha}^6 - \frac{\hbar^2}{2m} 2c_1 \frac{(\alpha^2 - \alpha'^2)^2}{4\bar{\alpha}^2} \end{aligned}$$

onde

$$\int T_0(\bar{r}, \bar{r}; \bar{\alpha}) d^3r = \int \rho_0(\bar{r}, \bar{r}; \bar{\alpha}) r^2 d^3r = C_1 \bar{\alpha}^2$$

$$\int \rho_0^2(\bar{r}, \bar{r}; \bar{\alpha}) d^3r = C_2 \bar{\alpha}^3 = \frac{4 d_0}{(2\pi)^{3/2}} \bar{\alpha}^3$$

$$\int \rho_0^3(\bar{r}, \bar{r}; \bar{\alpha}) d^3r = C_3 \bar{\alpha}^6 = \frac{64 f_0}{(\pi\sqrt{3})^3} \bar{\alpha}^6$$

$$\int [\bar{\nabla} \rho_0(\bar{r}, \bar{r}; \bar{\alpha})]^2 d^3r = C_4 \bar{\alpha}^5 = \frac{4 g_0}{(2\pi)^{3/2}} \bar{\alpha}^5$$

$$\int \rho_0(\bar{r}, \bar{r}; \bar{\alpha}) T_0(\bar{r}, \bar{r}; \bar{\alpha}) d^3r = C_5 \bar{\alpha}^5 = \frac{2 h_0}{(2\pi)^{3/2}} \bar{\alpha}^5$$

As constantes C_1 , d_0 , g_0 , h_0 e f_0 , calculadas no apêndice C, são dadas para os núcleos ^4He , ^{16}O e ^{40}Ca na Tabela II.

Com todos os elementos definidos podemos agora escrever o núcleo de energia explicitamente:

$$\begin{aligned} \langle \alpha' | H | \alpha \rangle = & \left(\frac{2\alpha\alpha'}{\alpha^2 + \alpha'^2} \right)^T \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} 2C_1 \bar{\alpha}^2 + \frac{3t_3 d_0}{2(2\pi)^{3/2}} \bar{\alpha}^3 + \left[\frac{(3t_1 + 5t_2)}{8(2\pi)^{3/2}} h_0 + \right. \right. \\ & + \left. \frac{(9t_1 - 5t_2)}{16(2\pi)^{3/2}} g_0 \right] \bar{\alpha}^5 + \frac{4 t_3 f_0}{(\pi\sqrt{3})^3} \bar{\alpha}^6 + \\ & \left. - \frac{\hbar^2}{2m} 2C_1 \frac{(\alpha^2 - \alpha'^2)^2}{4\bar{\alpha}^2} \right\} \end{aligned} \quad \text{IV.6}$$

Esta expressão pode ser corrigida dos efeitos de movimentos de centro de massa. A maneira adotada foi subtrair a parte de um corpo do valor esperado de $\frac{P^2}{2mA}$, onde P é o momento total

do sistema e A é o número de partículas no núcleo. Este procedimento é exato para o ${}^4\text{He}$ e aproximado para o ${}^{16}\text{O}$ e ${}^{40}\text{Ca}$, sendo que para estes núcleos os efeitos de centro de massa são pequenos ($\propto \frac{1}{A}$). Esta correção não altera a forma do núcleo de energia; deve-se apenas substituir o coeficiente C_1 por $C_1 \frac{(A-1)}{A}$.

Neste estágio de nossos cálculos já poderíamos procurar a transformação que diagonaliza a função de superposição para então obtermos a hamiltoniana coletiva, em contraposição à abordagem de Flocard e Vautherin que, obtendo este núcleo de energia e a função de superposição, resolvem numericamente a equação de Griffin - Wheeler.

Por razões que serão elucidadas posteriormente faremos uma redefinição de nossa coordenada geradora, a qual, originalmente definida como $\alpha = \frac{1}{b}$, será substituída por $x = \ln \frac{b_0}{b} = \ln \frac{\alpha}{\alpha_0}$, que equivale a substituírmos α por $\alpha_0 e^x$. O parâmetro α_0 , introduzido por razões de dimensão, caracteriza a origem da nova coordenada geradora. O valor do parâmetro α_0 (ou b_0) será fixado no próximo capítulo de modo que a origem de x seja definida convenientemente.

Com esta nova coordenada geradora, a função de superposição e o núcleo de energia ficam reescritos como :

$$N(\alpha, \alpha') \longrightarrow N(x_1, x_2) = \text{sech}^T(x_1 - x_2) \quad \text{IV.7}$$

$$\begin{aligned} \langle \alpha' | H | \alpha \rangle \longrightarrow \langle x_1 | H | x_2 \rangle &= \text{sech}^T(x_1 - x_2) \left[A \text{sech}(x_1 - x_2) e^{\frac{x_1 + x_2}{b_0^2}} + \right. \\ &+ \frac{B}{b_0^3} \cosh^3(x_1 - x_2) e^{\frac{3}{2}(x_1 + x_2)} + \frac{C}{b_0^5} \cosh^5(x_1 - x_2) e^{\frac{5}{2}(x_1 + x_2)} + \\ &\left. + \frac{D}{b_0^6} \cosh^3(x_1 - x_2) e^{3(x_1 + x_2)} \right] \quad \text{IV.8} \end{aligned}$$

respectivamente, onde

$$A = \frac{\hbar^2}{2m} 2C_1$$

$$B = \frac{3}{2} t_0 \frac{d_0}{(2\pi)^{3/2}}$$

$$C = \frac{3t_1 + 5t_2}{8(2\pi)^{3/2}} h_0 + \frac{9t_1 - 5t_2}{16(2\pi)^{3/2}} g_0$$

$$D = \frac{4 f_0 t_3}{(\pi\sqrt{3})^3}$$

Vale ainda ressaltar que esta troca de coordenadas geradoras envolve apenas uma mudança de rotulação das funções de onda geradoras e não altera os resultados finais pretendidos, pode, porém, induzir modificações nas coordenadas coletivas definidas em um e outro esquema e na forma da hamiltoniana coletiva final. Estas modificações, no entanto, podem ser absorvidas por uma transformação unitária do espaço de fases coletivo.

Não tentamos, neste trabalho, analisar o relacionamento entre as coordenadas e hamiltonianas coletivas obtidas a partir das duas opções para as coordenadas geradoras, tendo nos restringido a trabalhar somente com a escolha $X = \ln \frac{b_0}{b}$. Conseguimos, contudo, estabelecer comparações significativas entre a solução numérica deste mesmo problema (Flo Vau -75,75), que utiliza $\alpha = \frac{1}{b^2}$ como coordenada geradora e aquela obtida pela hamiltoniana coletiva definida a partir da escolha $X = \ln \frac{b_0}{b}$. Estes resultados são discutidos no capítulo seguinte.

CAPÍTULO V

A hamiltoniana coletiva para vibrações monopolares

Com a nova função de superposição e núcleo de energia, obtidos no capítulo anterior, podemos obter a hamiltoniana coletiva. Como mencionado anteriormente devemos procurar inicialmente uma representação no subespaço coletivo $\mathcal{H}$, e para isso temos que, usando o Teorema Espectral, diagonalizar a função de superposição (IV.7).

Nesta nova formulação teremos o seguinte problema a resolver :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \text{sech}^T(x_1 - x_2) f_k(x_2) dx_2 = \Lambda(k) f_k(x_1) .$$

Vamo-nos valer da observação que

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(x_1 - x_2) e^{-ikx_2} dx_2 &= \frac{e^{-ikx_1}}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(y) e^{-iky} dy \\ &= \frac{e^{-ikx_1}}{\sqrt{2\pi}} h(k) \end{aligned}$$

para concluir que para se diagonalizar o núcleo de um operador que só depende da diferença de seus argumentos (e que satisfaça as condições de aplicabilidade do Teorema Espectral) usamos simplesmente uma transformada de Fourier, o que torna clara a razão de termos transformado nossa coordenada geradora inicial para e^{-x} . Assim o problema de diagonalizar a função de superposição, $\text{sech}^T(x_1 - x_2)$, fica reduzido a se

tomar sua transformada de Fourier:

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \text{sech}^T(x_1 - x_2) e^{-ikx_2} dx_2 = \frac{e^{-ikx_1}}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \text{sech}^T(y) e^{-iky} dy.$$

O espectro do operador $\text{sech}^T(y)$, que é a integral

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \text{sech}^T(y) e^{-iky} dy,$$

é calculado trivialmente. Para isto basta tomarmos

$$\Lambda(k) = \int_{-\infty}^{+\infty} \text{sech}^T(y) e^{-iky} dy = 2 \int_0^{\infty} \frac{\cos(ky)}{\cosh^T(y)} dy = 2^T \int_0^{\infty} \frac{e^{iky} + e^{-iky}}{e^{y^T} (1 + e^{-2y})^T} dy.$$

com a transformação $t = e^{-2y}$ a integral será rees-

crita como :

$$\Lambda(k) = 2^{T-1} \int_0^1 \frac{t^{\frac{T}{2} + i\frac{k}{2} - 1} + t^{\frac{T}{2} - i\frac{k}{2} - 1}}{(1+t)^T} dt,$$

que é reconhecida como uma função beta. Logo

$$\Lambda(k) = 2^{T-1} B\left(\frac{T}{2} + i\frac{k}{2}; \frac{T}{2} - i\frac{k}{2}\right)$$

Usando-se ainda a propriedade da função beta que a relaciona com funções gama, temos

$$\Lambda(k) = 2^{T-1} \frac{\Gamma\left(\frac{T}{2} + i\frac{k}{2}\right) \Gamma\left(\frac{T}{2} - i\frac{k}{2}\right)}{\Gamma(T)}$$

Sabemos adicionalmente que T é inteiro para os núcleos estudados ${}^4\text{He}$, ${}^{16}\text{O}$ e ${}^{40}\text{Ca}$, e isto nos permite escrever finalmente

$$\Lambda(k) = 2^{T-1} \frac{\pi k}{2} \prod_{s=1}^{\frac{T}{2}-1} \left(s^2 + \frac{k^2}{4} \right) \frac{1}{T(\tau) \sinh\left(\frac{k\pi}{2}\right)}$$

ou

$$\Lambda(k) = \frac{k\pi}{T(\tau) \sinh\left(\frac{k\pi}{2}\right)} \prod_{s=1}^{\frac{T}{2}-1} (4s^2 + k^2)$$

A diagonalização da função de superposição fica expressa explicitamente como :

$$\frac{1}{2\pi} \int \int e^{ik_1 x_1} \text{sech}^T(x_1 - x_2) e^{-ik_2 x_2} dx_1 dx_2 = \Lambda(k) \delta(k_1 - k_2)$$

A figura 1 nos mostra o gráfico da função de superposição exata e a comparação com sua aproximação gaussiana

$$\text{sech}^T(x_1 - x_2) \simeq e^{-\frac{T}{2} (x_1 - x_2)^2}$$

para os núcleos de ${}^4\text{He}$ e ${}^{16}\text{O}$. Esta figura mostra ainda a razão do espectro exato $\Lambda(k)$ e o espectro que se obtém quando a função de superposição é aproximada por uma gaussiana. Fica claro desta figura que a aproximação gaussiana é uma boa aproximação para valores grandes de T , ou correspondentemente para núcleos mais pesados, como admitido originalmente por Griffin e Wheeler.

Um dos resultados importantes que obtemos da diagonalização da função de superposição é a caracterização de k como uma variável coletiva adimensional. Este reconhecimento da variável coletiva é um passo importante na obtenção da hamiltoniana coletiva, a qual, como foi mostrado no capítulo III, é obtida de :

$$\langle k | H | k' \rangle = \iint \frac{U_k(x_1)}{\sqrt{\Lambda(k)}} \langle x_1 | H | x_2 \rangle \frac{U_{k'}(x_2)}{\sqrt{\Lambda(k')}} dx_1 dx_2$$

ou então, substituindo $U_k(x)$ por sua forma explícita

$$\langle k | H | k' \rangle = \frac{1}{2\pi} \iint \frac{e^{ikx_1}}{\sqrt{\Lambda(k)}} \langle x_1 | H | x_2 \rangle \frac{e^{-ik'x_2}}{\sqrt{\Lambda(k')}} dx_1 dx_2 \quad \text{V.1}$$

É interessante notar também que o espectro da função de superposição é o elemento importante no que concerne à transformação do núcleo de energia para uma representação ortonormal, e que consequentemente uma boa aproximação para ele se reflete numa boa aproximação para a função de onda coletiva. A aproximação gaussiana pode ser usada mesmo no caso do ^4He , embora apresente algum desvio em relação à solução exata, porque ainda assim ela nos possibilita a obtenção de hamiltonianas coletivas analíticas que aproximam muito bem os resultados numéricos (Flo Vau -75,75) obtidos com a função de superposição exata como veremos adiante.

V.A) Expansão bosônica para a hamiltoniana coletiva

Em lugar de procurarmos a equação de Schrödinger com a hamiltoniana coletiva escrita em termos da variável k e suas derivadas, que obteríamos com o procedimento mencionado anteriormente, vamos usar o formalismo proposto por Klein (Kle -71) que nos permite escrever a hamiltoniana coletiva $\mathcal{H}(p, q)$ em termos de um par canônico.

O que pretendemos achar é uma equação da forma :

$$\mathcal{H}(p, q) u_n(q) = E_n u_n(q) ,$$

que deve representar o problema de autovalores para a vibração monopolar. Na hipótese de vibrações de pequenas amplitudes podemos esperar que estas vibrações sejam aproximadamente harmônicas e como tal a função de onda $u_n(q)$ deve estar associada a estados de oscilador harmônico, representados no espaço de Fock por $|n\rangle$. Nestas condições o fato do conjunto infinito $\{|n\rangle\}$ se constituir numa base nesse subespaço coletivo nos permite escrever :

$$\begin{aligned} |q\rangle &= \sum_n |n\rangle \langle n|q\rangle \\ &= \sum_n |n\rangle u_n^*(q) \end{aligned}$$

e

$$|n\rangle = \int u_n(q) |q\rangle dq$$

V.2.

onde $|q\rangle$, que satisfaz as condições

$$\langle q|q'\rangle = \delta(q-q') \quad \text{e} \quad \int |q\rangle \langle q| dq = 1,$$

é um estado intrínseco de muitos corpos.

A variável q , a qual rotula os estados que servem de representação no subespaço coletivo, é a nossa variável dinâmica coletiva.

Assim podemos estabelecer uma correspondência entre os estados $|n\rangle$ e as autofunções unidimensionais, $u_n(q)$, da hamiltoniana coletiva $\mathcal{H}(p, q)$:

$$u_n(q) = \langle q|n\rangle.$$

A possibilidade de exprimirmos a hamiltoniana microscópica de muitos corpos, H , em termos de operadores de criação e aniquilação de bosons, $a^\dagger$ e a respectivamente ($[a, a^\dagger] = 1$), que têm neste caso caráter coletivo, nos permite escrever agora

$$\langle n|H|n'\rangle = (W_0 + E_n) \delta_{nn'} \quad \text{V.3}$$

ou usando (V.2)

$$\langle n | H | n' \rangle = \int u_n^*(q) \langle q | H | q' \rangle u_{n'}(q') dq dq' .$$

Por outro lado o isomorfismo existente entre o espaço $\{ |n\rangle \}$ e o das funções de onda $\{ u_n(q) \}$ nos permite ainda dizer que o elemento de matriz (V.3) é equivalente ao valor esperado da hamiltoniana coletiva nas funções de onda correspondentes, ou seja

$$\langle n | H | n' \rangle \equiv \int u_n^*(q) \left[\mathcal{H}(p, q) + W_0 \right] u_{n'}(q) dq .$$

Esta identificação nos permite obter uma expressão analítica para a hamiltoniana coletiva, uma vez que se conheça $\langle q | H | q' \rangle$.

Em nosso caso particular este elemento de matriz pode ser obtido a partir de uma transformação de Fourier de (V.1), i. é.;

$$\langle q | H | q' \rangle = \frac{1}{2\pi} \iint e^{-ikq} \langle k | H | k' \rangle e^{ik'q'} dk dk' .$$

Como, porém,

$$ikq - ik'q' = i(k-k')\left(\frac{q+q'}{2}\right) + i\left(\frac{k+k'}{2}\right)(q-q') ,$$

fazendo-se as transformações de variáveis (Jacobiano = 1)

$$k-k' = \bar{k} , \quad \frac{k+k'}{2} = \bar{k} , \quad \frac{q+q'}{2} = \gamma \quad e \quad q-q' = \xi$$

reescrevemos

$$\langle \gamma + \frac{\xi}{2} | H | \gamma - \frac{\xi}{2} \rangle = \frac{1}{2\pi} \int e^{-ik\gamma - i\bar{k}\xi} \langle \bar{k} + \frac{k}{2} | H | \bar{k} - \frac{k}{2} \rangle d\bar{k} dk \quad \text{v.4}$$

A idéia de coletividade é introduzida, neste estágio do desenvolvimento, através da consideração que

$$\left\langle \gamma + \frac{\xi}{2} \right| H \left| \gamma - \frac{\xi}{2} \right\rangle \equiv H(\gamma, \xi)$$

é uma função com um pico estreito em ξ (ou alternativamente em $q - q'$), o que quer dizer que a ação de H nestes estados bem localizados $|q\rangle$ não os dispersa. Assim (V.4) pode ser expandida convenientemente em termos da distribuição δ e suas derivadas e se obtém:

$$H(\gamma, \xi) = \sum_m H^{(m)}(\gamma) \delta^{(m)}(\xi)$$

onde

$$H^{(m)}(\gamma) = \frac{1}{2\pi} \int e^{-ik\gamma - i\bar{k}\xi'} \frac{(-i\xi')^m}{m!} H(\bar{k}, k) d\bar{k} dk d\xi' \text{ v.s.}$$

e $\delta^{(m)}(\xi)$ é a m -ésima derivada de δ .

A identificação da hamiltoniana coletiva é feita a partir da igualdade

$$\begin{aligned} \sum_m \int u_n^* \left(\gamma + \frac{\xi}{2} \right) H^{(m)}(\gamma) \delta^{(m)}(\xi) u_{n'} \left(\gamma - \frac{\xi}{2} \right) d\xi d\gamma = \\ = \int u_n^*(q) \left[\mathcal{H}(p, q) + W_0 \right] u_{n'}(q) dq, \end{aligned}$$

que pode ainda ser reescrita como :

$$\begin{aligned}
& \int u_n^* \left(\gamma + \frac{\xi}{2} \right) H^{(0)}(\gamma) \delta(\xi) u_n \left(\gamma - \frac{\xi}{2} \right) d\gamma d\xi + \\
& \int u_n^* \left(\gamma + \frac{\xi}{2} \right) H^{(1)}(\gamma) \delta'(\xi) u_n \left(\gamma - \frac{\xi}{2} \right) d\gamma d\xi + \\
& \int u_n^* \left(\gamma + \frac{\xi}{2} \right) H^{(2)}(\gamma) \delta''(\xi) u_n \left(\gamma - \frac{\xi}{2} \right) d\gamma d\xi + \dots = \\
& = \int u_n^*(q) \left[\mathcal{H}(p, q) + W_0 \right] u_n(q) dq .
\end{aligned}$$

Integrando-se por partes o primeiro membro da igualdade temos

$$\mathcal{H}(p, q) + W_0 = H^{(0)}(q) + \frac{1}{2} \left\{ \frac{p}{\hbar}, H^{(1)}(q) \right\} + \left(\frac{1}{2} \right)^2 \left\{ \frac{p}{\hbar}, \left\{ \frac{p}{\hbar}, H^{(2)}(q) \right\} \right\} + \dots \text{v.6}$$

onde chamou-se $i\hbar \frac{\partial}{\partial \xi} = p$, que não tem, contudo, dimensão de momento. Em nosso caso o termo $H^{(0)}(q)$ é escrito explicitamente como

$$H^{(0)}(q) = \frac{1}{2\pi} \int e^{-ikq - i\bar{k}\xi'} H(\bar{k}, k) d\bar{k} dk d\xi'$$

que integrado em ξ' e $\bar{k}$ dará

$$\begin{aligned}
H^{(0)}(q) &= \int e^{-ikq} H(0, k) dk \\
\text{Porém } H(\bar{k}, k) &\equiv \left\langle \bar{k} + \frac{k}{2} \middle| H \middle| \bar{k} - \frac{k}{2} \right\rangle \quad \text{e}
\end{aligned}$$

$$H(0, k) = \left\langle \frac{k}{2} \middle| H \middle| -\frac{k}{2} \right\rangle$$

que pode ser escrito em termos das coordenadas geradoras através de (V.1) :

$$H(o, k) = \frac{1}{2\pi} \iint \frac{e^{\frac{i k}{2} x_1}}{\sqrt{\Lambda(\frac{k}{2})}} \langle x_1 | H | x_2 \rangle \frac{e^{-i(-\frac{k}{2}) x_2}}{\sqrt{\Lambda(-\frac{k}{2})}} dx_1 dx_2$$

Logo

$$\begin{aligned} H^{(o)}(q) &= \int e^{-i k q} \langle \frac{k}{2} | H | -\frac{k}{2} \rangle dk \\ &= \frac{1}{2\pi} \int e^{-i k q} \frac{e^{\frac{i k}{2} x_1}}{\sqrt{\Lambda(\frac{k}{2})}} \langle x_1 | H | x_2 \rangle \frac{e^{\frac{i k}{2} x_2}}{\sqrt{\Lambda(-\frac{k}{2})}} dk dx_1 dx_2 \end{aligned}$$

ou seja

$$H^{(o)}(q) = \frac{1}{2\pi} \int e^{i k \left(\frac{x_1 + x_2}{2} - q \right)} \frac{\langle x_1 | H | x_2 \rangle}{\sqrt{\Lambda(\frac{k}{2}) \Lambda(-\frac{k}{2})}} dk dx_1 dx_2$$

Chamando agora

$$\frac{x_1 + x_2}{2} = \gamma \quad \text{e} \quad x_1 - x_2 = \eta$$

e substituindo $\langle x_1 | H | x_2 \rangle$ por sua expressão (IV.8) teremos

$$\begin{aligned} H^{(o)}(q) &= \frac{1}{2\pi} \int \frac{e^{i k (\gamma - q)}}{\sqrt{\Lambda(\frac{k}{2}) \Lambda(-\frac{k}{2})}} \text{sech}^T \eta \left(\frac{A}{b_o^2} \text{sech} \eta e^{2\gamma} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{B}{b_o^3} \cosh^{\frac{3}{2}} \eta e^{3\gamma} + \frac{C}{b_o^5} \cosh^{\frac{5}{2}} \eta e^{5\gamma} + \frac{D}{b_o^6} \cosh^3 \eta e^{6\gamma} \right) dk d\gamma d\eta \quad \text{V.7} \end{aligned}$$

Vamo-nos valer ainda da observação que $\Lambda(k)$ é uma função par de k , o que nos permite escrever

$$\sqrt{\Lambda\left(\frac{k}{2}\right)\Lambda\left(-\frac{k}{2}\right)} = \Lambda\left(\frac{k}{2}\right)$$

A tentativa de integração em γ da expressão (V.7) nos levaria a resultados que são ultra-distribuições, ou seja, teríamos uma série infinita em distribuições δ de Dirac e suas derivadas. Isto tornaria a solução do problema laboriosa, e teríamos obtido, no final, uma aproximação para $H^{(0)}(q)$. Desta forma, uma vez que mesmo a solução com as expressões exatas nos leva a uma série, e o tratamento prático dela nos levaria a aproximações, optamos por uma versão mais simplificada de aproximação do integrando de (V.7), que dará como resultado uma série de potências em q , de obtenção mais fácil e que mostra sua convergência em função dos parâmetros envolvidos de maneira explícita.

Nossas aproximações serão feitas em dois níveis a saber :

a) A expressão

$$F = \frac{A}{b_0^2} \operatorname{sech} \eta e^{2\gamma} + \frac{B}{b_0^3} \cosh^{\frac{3}{2}} \eta e^{3\gamma} + \frac{C}{b_0^5} \cosh^{\frac{5}{2}} \eta e^{5\gamma} + \frac{D}{b_0^6} \cosh^3 \eta e^{6\gamma}$$

será expandida em série de potências em η e $(\gamma - \gamma_0)$, onde γ_0 é o mínimo, calculado previamente, da parte diagonal ($\eta = 0$) daquela expressão. Como as funções sech e $\cosh$ são pares, aparecerão somente as potências pares de η . Nos cálculos desta tese consideraremos termos de até 4ª ordem em η e $(\gamma - \gamma_0)$.

É neste estágio da obtenção da hamiltoniana coletiva que fica aparente a necessidade de se escolher, de maneira conveniente, o valor do parâmetro b_0 que define a origem da coordenada geradora, como mencionamos no ca -

pítulo anterior. A sugestão natural é dar para aquele parâmetro o valor de b correspondente ao mínimo da parte diagonal do núcleo de energia; o que faz com que γ_0 se transforme na nova origem para os γ 's. Este valor de b_0 será tomado, no que se segue, como nossa unidade de medida de comprimento. Esta escolha faz com que certas características da hamiltoniana coletiva se manifestem explicitamente, como veremos a diante.

b) A função de superposição, $\text{sech}^T \eta$, é aproximada por uma gaussiana, $\exp(-\frac{T}{2} \eta^2)$, bem como seu espectro $\Lambda(\frac{k}{2})$. Vale ressaltar que esta aproximação é muito boa para o ^{16}O e ^{40}Ca e apresentará algum desvio para o ^4He , como visto na figura 1.

Com base nestas aproximações podemos calcular os coeficientes da expansão. Estes coeficientes serão calculados como derivadas de F em relação a η ou γ e são funções de A, B, C e D .

Adotaremos a seguinte notação

$$C(\eta^n \gamma^m) = \frac{1}{n! m!} \frac{\partial^n}{\partial \eta^n} \frac{\partial^m}{\partial \gamma^m} F(\eta, \gamma) \Big|_{\eta=0, \gamma=\gamma_0}$$

nos cálculos que seguem; por exemplo

$$C(\eta^0 \gamma^0) \equiv C_0 = A e^{2\gamma_0} + B e^{3\gamma_0} + C e^{5\gamma_0} + D e^{6\gamma_0}$$

Assim temos a versão aproximada

$$H^{(0)}(\frac{k}{2}) \approx \frac{1}{2\pi} \int \frac{e^{ik(r-\frac{r}{2})}}{\Lambda(\frac{k}{2})} e^{-\frac{T}{2} \eta^2} \left[C_0 + C(\eta^2 \gamma^0) \eta^2 + C(\eta^0 \gamma^2) (\gamma - \gamma_0)^2 + \right. \\ \left. + C(\eta^2 \gamma) \eta^2 (\gamma - \gamma_0) + C(\eta^0 \gamma^3) (\gamma - \gamma_0)^3 + C(\eta^4 \gamma^0) \eta^4 + C(\eta^2 \gamma^2) \eta^2 (\gamma - \gamma_0)^2 + \right. \\ \left. + C(\eta^0 \gamma^4) (\gamma - \gamma_0)^4 \right] dk d\eta d\gamma$$

Essa integral envolve uma soma de termos da forma

$$G = \frac{C(\eta^m \gamma^n)}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{T}{2} \eta^2} \eta^m d\eta \int \frac{e^{ik(\gamma-\gamma_0)}}{\Lambda(\frac{k}{2})} (\gamma-\gamma_0)^n d\gamma dk \quad \text{v.8}$$

Como

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{T}{2} \eta^2} \eta^m d\eta = \frac{\Gamma(\frac{m+1}{2})}{(\frac{T}{2})^{\frac{m+1}{2}}},$$

com

$$\Gamma\left(\frac{m}{2} + \frac{1}{2}\right) = \frac{1.3.5 \dots (m-1)}{2^{\frac{m}{2}}} \sqrt{\pi}$$

e

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{ik(\gamma-\gamma_0)}}{2\pi \Lambda(\frac{k}{2})} (\gamma-\gamma_0)^n d\gamma dk = i^n \sqrt{\frac{T}{2\pi}} \frac{d^n}{dk^n} \left[e^{\frac{k^2}{8T} + ik(\gamma_0-\gamma)} \right]_{k=0}$$

então

$$G = C(\eta^m \gamma^n) \frac{i^n}{T^{\frac{m}{2}}} \frac{1.3.5 \dots (m-1)}{2^{\frac{m}{2}}} \frac{d^n}{dk^n} \left[e^{\frac{k^2}{8T} + ik(\gamma_0-\gamma)} \right]_{k=0}.$$

A partir desta expressão nota-se que ocorrerão termos independentes de $(\gamma-\gamma_0)$ sempre que tenhamos contribuições do tipo $C(\eta^m \gamma^n) \eta^m$ ou $C(\eta^m \gamma^n) (\gamma-\gamma_0)^n$, com n par; e os termos proporcionais a $(\gamma-\gamma_0)^n$ contribuirão com polinômios onde as potências dos termos é sempre par (ímpar) se n é par (ímpar).

A forma explícita da expressão aproximada de H

fica então :

$$\begin{aligned}
H^{(0)}(\eta) \simeq & C_0 + \frac{C(\eta^2 \gamma^0)}{T} - \frac{C(\eta^0 \gamma^2)}{4T} + \frac{1}{T^2} \left[3C(\eta^0 \gamma^4) - \frac{C(\eta^2 \gamma^2)}{4} + \frac{3}{16} C(\eta^0 \gamma^4) \right] + \\
& + \frac{1}{T} \left[C(\eta^2 \gamma) - \frac{3}{4} C(\eta^0 \gamma^3) \right] (\eta - \gamma_0) + \left\{ C(\eta^0 \gamma^2) + \frac{1}{T} \left[C(\eta^2 \gamma^2) - \frac{3}{4} C(\eta^0 \gamma^4) \right] \right\} (\eta - \gamma_0)^2 + \\
& + C(\eta^0 \gamma^3) (\eta - \gamma_0)^3 + C(\eta^0 \gamma^4) (\eta - \gamma_0)^4,
\end{aligned}$$

que pode ser escrita na forma mais compacta :

$$H^{(0)}(r) \simeq E_0 + V_1 r + V_2 r^2 + V_3 r^3 + V_4 r^4 \quad \text{V.9}$$

onde $r = \eta - \gamma_0$.

Esta função, que aparece em (V.6) fora dos anti-comutadores, será a expressão analítica aproximada da energia potencial coletiva.

Deve-se observar que a aproximação quadrática na expansão de (V.7) nos levaria a potencial da forma :

$$H^{(0)}(\eta) \simeq \left[C_0 + \frac{C(\eta^2 \gamma^0)}{T} - \frac{C(\eta^0 \gamma^2)}{4T} \right] + C(\eta^0 \gamma^2) (\eta - \gamma_0)^2,$$

que é exatamente um potencial de oscilador harmônico com mínimo em γ_0 . Por outro lado a introdução do termo cúbico na expansão de (V.7), devido à assimetria daquela expressão com relação ao ponto de mínimo, provoca um deslocamento no ponto de mínimo do potencial coletivo (com relação a γ_0). Isto acarreta, obviamente, numa mudança do raio nuclear calculado num e noutro caso. Estes resultados serão analisados mais a diante.

O termo $H^{(1)}(\eta)$, que aparece no primeiro anticomutador de (V.6), pode ser calculado analogamente ao termo $H^{(0)}(\eta)$.

A partir de sua forma explícita

$$H^{(1)}(\eta) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{(-i\xi')}{4\pi^2} e^{-ik\eta - i\bar{k}\xi'} e^{i(\bar{k} + \frac{k}{2})x_1 - i(\bar{k} - \frac{k}{2})x_2} \frac{\langle x_1 | H | x_2 \rangle e}{\sqrt{\Lambda(\bar{k} + \frac{k}{2}) \Lambda(\bar{k} - \frac{k}{2})}} d\xi' d\bar{k} dk dx_1 dx_2$$

podemos reescrever

$$H^{(1)}(\eta) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{(-i\xi')}{4\pi^2} e^{-i\bar{k}\xi' + i\bar{k}\eta} e^{ik(\gamma - \eta)} \frac{\langle \gamma + \frac{\eta}{2} | H | \gamma - \frac{\eta}{2} \rangle}{\sqrt{\Lambda(\bar{k} + \frac{k}{2}) \Lambda(\bar{k} - \frac{k}{2})}} d\xi' d\bar{k} dk d\eta d\gamma$$

com a ajuda das transformações já conhecidas

$$\eta = x_1 - x_2 \quad e \quad \gamma = \frac{x_1 + x_2}{2}$$

Como

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{(-i\xi')}{2\pi} e^{-i\bar{k}\xi'} d\xi' = \delta'(\bar{k})$$

então

$$H^{(1)}(\eta) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{i\bar{k}\eta}}{2\pi} \delta'(\bar{k}) \sqrt{\frac{T}{2\pi}} e^{\frac{(\bar{k} + \frac{k}{2})^2}{4T} + \frac{(\bar{k} - \frac{k}{2})^2}{4T}} e^{ik(\gamma - \eta)} \langle \gamma + \frac{\eta}{2} | H | \gamma - \frac{\eta}{2} \rangle d\bar{k} dk d\eta d\gamma$$

que se anula, pois

$$H^{(1)}(\eta) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{i\bar{k}\eta}}{2\pi} \sqrt{\frac{T}{2\pi}} i\eta e^{\frac{k^2}{8T}} \langle \gamma + \frac{\eta}{2} | H | \gamma - \frac{\eta}{2} \rangle d\bar{k} dk d\eta d\gamma$$

tem uma função ímpar em η no integrando.

Por cálculo análogo obter-se-á contribuição nula para todo termo da forma $H^{(2n+1)}(\eta)$.

Finalmente vamos calcular o termo

$$H^{(2)}(\eta) = \int \frac{(-i\xi')^2}{2 \cdot 4\pi^2} e^{-ik\eta - i\bar{k}\xi'} e^{i\bar{k}(x_1 - x_2) + ik\left(\frac{x_1 + x_2}{2}\right)} \frac{\langle x_1 | H | x_2 \rangle}{\sqrt{\Lambda(\bar{k} + \frac{k}{2}) \Lambda(\bar{k} - \frac{k}{2})}} d\xi' d\bar{k} dk dx_1 dx_2.$$

Analogamente ao que foi feito anteriormente podemos escrever :

$$H^{(2)}(\eta) = \int \frac{(-i\xi')^2}{2 \cdot 4\pi^2} e^{ik(\gamma - \eta)} e^{i\bar{k}(\eta - \xi')} \frac{\langle \gamma + \frac{\eta}{2} | H | \gamma - \frac{\eta}{2} \rangle}{\sqrt{\Lambda(\bar{k} + \frac{k}{2}) \Lambda(\bar{k} - \frac{k}{2})}} d\xi' d\bar{k} dk d\eta d\gamma$$

Como

$$\int \frac{(-i\xi')^2}{2\pi} e^{-i\bar{k}\xi'} d\xi' = \delta''(\bar{k})$$

então

$$H^{(2)}(\eta) = \sqrt{\frac{T}{2\pi}} \int \frac{1}{2} \left(\frac{1}{T} - \eta^2 \right) \frac{e^{\frac{k^2}{8T} + ik(\gamma - \eta)}}{2\pi} e^{\langle \gamma + \frac{\eta}{2} | H | \gamma - \frac{\eta}{2} \rangle} dk d\eta d\gamma.$$

Usando-se a expansão até termos de 4ª ordem para $\langle \gamma + \frac{\eta}{2} | H | \gamma - \frac{\eta}{2} \rangle$, a função de superposição gaussiana e os resultados derivados de (V.8), obtemos, depois de um cálculo direto, a expansão para $H^{(2)}(\eta)$:

$$H^{(2)}(q) \simeq -\frac{C(\eta^2 \gamma^0)}{T^2} + \frac{1}{T^3} \left[\frac{C(\eta^2 \gamma^2)}{4} - 6C(\eta^4 \gamma^0) \right] - \frac{C(\eta^2 \gamma)}{T^2} (q - \gamma_0) - \frac{C(\eta^2 \gamma^2)}{T^2} (q - \gamma_0)^2,$$

ou usando a notação de (V.9)

$$H^{(2)}(q) \simeq B_0 + B_1 r + B_2 r^2 \quad \text{V.10}$$

De maneira correspondente ao que já fizemos anteriormente podemos aqui também procurar a expressão associada à aproximação quadrática. Esta expressão assume a forma simples :

$$H^{(2)}(q) \simeq -\frac{C(\eta^2 \gamma^0)}{T^2}$$

Introduzindo o resultado (V.10) no anticomutador da expressão (V.6) temos

$$\frac{1}{4\hbar^2} \left\{ P, \left\{ P, H^{(2)}(q) \right\} \right\} \simeq B_0 \frac{P^2}{\hbar^2} + \frac{B_1}{4\hbar^2} \left\{ P, \left\{ P, r \right\} \right\} + \frac{B_2}{4\hbar^2} \left\{ P, \left\{ P, r^2 \right\} \right\}$$

que junto com a expressão (V.9) nos dá finalmente a hamiltoniana coletiva até termos $H^{(2)}(q)$ inclusive

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(P, q) + W_0 &\simeq E_0 + V_1 r + V_2 r^2 + V_3 r^3 + V_4 r^4 + \frac{B_0}{\hbar^2} P^2 + \\ &+ \frac{B_1}{4\hbar^2} \left\{ P, \left\{ P, r \right\} \right\} + \frac{B_2}{4\hbar^2} \left\{ P, \left\{ P, r^2 \right\} \right\} \end{aligned} \quad \text{V.11}$$

A convergência desta expansão para a hamiltoniana coletiva é discutida a seguir.

V.B) Convergência da hamiltoniana coletiva

A hamiltoniana coletiva correspondente à aproximação quadrática no núcleo de energia tem a forma de uma hamiltoniana de

oscilador harmônico. Ajustando-se as dimensões temos :

$$\mathcal{H}(P, q) + W_0 = E_0 + V_2 r^2 + \frac{B_0}{\hbar^2} b_0^2 P^2$$

onde b_0 , que tem dimensão de comprimento, é escolhido, por consistência como sendo aquele definido anteriormente como nossa unidade de comprimento.

Podemos identificar agora,

$$W_0 = E_0 = C_0 + \frac{C(\eta^2 \gamma^0)}{T} - \frac{C(\eta^0 \gamma^2)}{4T}$$

$$\frac{B_0 b_0^2}{\hbar^2} = \frac{1}{2\mathcal{M}} = - \frac{C(\eta^2 \gamma^0)}{\hbar^2 T^2} b_0^2$$

$$V_2 = \frac{\mathcal{M}\Omega^2}{2} = C(\eta^0 \gamma^2)$$

Conseqüentemente

$$\frac{\hbar\Omega}{2} = \frac{1}{T} \sqrt{-C(\eta^2 \gamma^0) C(\eta^0 \gamma^2)}$$

$$\mathcal{M} = \frac{-\hbar^2 T^2}{2 C(\eta^2 \gamma^0) b_0^2}$$

$$E_0 = C_0 - \frac{\hbar^2 T}{2\mathcal{M} b_0^2} - \frac{\mathcal{M}\Omega^2}{8T}$$

O aparecimento de um momento coletivo sem a dimensão correspondente, o que faz com que tenhamos que restaurar as dimensões com potências apropriadas de b_0 , é uma consequência da escolha da coordenada geradora adimensional x . É importante notar que a massa, medida em Mev, é definida então em função dessa unidade de comprimento.

A tabela III mostra os resultados para $\frac{\hbar\Omega}{2}$, a energia do estado fundamental, $E_1 = E_0 + \frac{\hbar\Omega}{2}$, e do primeiro estado exci -

citado dos núcleos de ${}^4\text{He}$, ${}^{16}\text{O}$ e ${}^{40}\text{Ca}$ e compara estes resultados com aqueles obtidos do cálculo numérico sem aproximações de Flocard e Vautherin (Flo Vau -76) para as interações SIII e SIV. Estamos interessados aqui somente na parte baixa do espectro.

Os dados desta tabela mostram claramente a validade da aproximação harmônica para os núcleos mais pesados, ou seja, a aproximação é tanto melhor quanto maior o número de partículas no núcleo (ou de maneira correspondente quanto maior for o parâmetro T da função de superposição). Deve-se notar que as diferenças em E_1 e E_2 é da ordem de 0,5 % para o ${}^{40}\text{Ca}$, em contraposição aos 17 % na energia E_1 (e da ordem de 250 % em E_2) do ${}^4\text{He}$.

A discrepância dos resultados para o ${}^4\text{He}$ pode ser entendida em termos da assimetria da parte diagonal do núcleo de energia com relação ao ponto de mínimo γ_0 . Esta assimetria, que é mais pronunciada para o ${}^4\text{He}$, contribui com os termos adicionais da hamiltoniana coletiva, sendo que estas contribuições são menos relevantes para o ${}^{16}\text{O}$ e ${}^{40}\text{Ca}$, uma vez que, além de T ser maior, as assimetrias destes núcleos são menos pronunciadas. A figura 2 mostra o gráfico das partes diagonais dos núcleos de energia do ${}^4\text{He}$, ${}^{16}\text{O}$ e ${}^{40}\text{Ca}$. A verificação de que as discrepâncias dos resultados para o ${}^4\text{He}$ são devidos dominante - mente aos termos do potencial coletivo é facilmente realizada com a comprovação que o termo de energia cinética é dominado pelo termo $-\frac{C(\eta^2\gamma_0)}{T^2}$; ou seja, a aproximação quadrática dá praticamente toda a contribuição para o parâmetro de inércia.

A verificação explícita desta afirmação para o ${}^4\text{He}$ no caso da interação SIII (a título de exemplo) pode ser feita do seguinte modo : enquanto o termo $-\frac{C(\eta^2\gamma_0)}{T^2}$ contribui com 1,05 Mev a correção advinda do termo $\frac{1}{T^3}\left[\frac{C(\eta^3\gamma^2)}{4} - 6C(\eta^4\gamma_0)\right]$ só contribui com -3×10^{-3} Mev. Estas ordens de grandeza são mantidas em todas as interações de Skyrme usadas. Os resultados para os núcleos ${}^4\text{He}$, ${}^{16}\text{O}$ e ${}^{40}\text{Ca}$ estão condensados na tabela IV.

Desta forma, quando fazemos a aproximação de quarta ordem, o parâmetro de inércia é praticamente aquele da aproximação harmônica, enquanto que o potencial tem sua forma alterada substancialmente para os núcleos leves.

A diagonalização da hamiltoniana coletiva (V.11) no subespaço coletivo foi realizada numericamente para as seis interações de Skyrme. O procedimento é aquele de Flocard e Vautherin discutido no capítulo III e desprezamos autovalores da função de superposição menores que 10^{-5} para minimizar os erros de truncamento. A possibilidade de erros de truncamento no procedimento numérico foi discutido por D. Galetti e A. Toledo Piza (Ga Pi -78) no caso da aproximação quadrática.

Como já era esperado não há grande alteração nos resultados para o ^{16}O e ^{40}Ca em relação àqueles da aproximação harmônica. Porém, para o ^4He , esta nova hamiltoniana dá uma aproximação bem mais próxima daqueles valores de Flocard e Vautherin que constam da tabela III. A tabela V apresenta estes novos resultados para as energias e a figura 3 mostra a função de onda do estado fundamental do ^{16}O e ^{40}Ca nesta aproximação, para a interação SIII. A discrepância é da ordem de 0,5 % para o estado fundamental do ^4He , enquanto no primeiro estado excitado é da ordem de 50 %.

Com o intuito de localizar as origens dos desvios nos resultados para o ^4He , que ainda permanecem mesmo quando se considera uma hamiltoniana coletiva com termos de até 4º ordem, testamos a validade da aproximação gaussiana para a função de superposição. Isto foi realizado com a substituição da função de superposição gaussiana pela forma exata, $\text{sech}^6 \eta$, e mantendo ainda a expansão até 4º ordem da expressão para o núcleo de energia. Resolvemos então a equação de Griffin - Wheeler e os resultados obtidos mostraram uma discrepância da ordem de 3% no estado fundamental com relação àquele de Flocard e Vautherin.

rin, ao passo que no primeiro estado excitado a discrepância foi reduzida a 30 %.

A permanência de uma discrepância ainda grande no primeiro estado excitado nos mostra que a aproximação de até 4ª ordem para a hamiltoniana coletiva ainda é insuficiente para o ${}^4\text{He}$ (A título de observação devemos comentar que o cálculo para o coeficiente do termo p^4 foi calculado em primeira ordem para o ${}^4\text{He}$ e o resultado obtido foi de 25×10^{-4} Mev para SIII e 24×10^{-4} Mev para SIV. Conseqüentemente este termo e as potências seguintes de P podem ser desprezadas com relação a p^2 . Os resultados são da ordem de 6×10^{-5} Mev e 10^{-6} Mev para o ${}^{16}\text{O}$ e ${}^{40}\text{Ca}$ respectivamente para as duas interações usadas). Como, porém, nossos resultados já correspondem a uma boa descrição dos núcleos mais pesados não tentamos obter novas aproximações para a hamiltoniana.

Por outro lado, uma análise do potencial coletivo pode ainda resultar frutífera no que se refere à informações importantes acerca de propriedades dos núcleos estudados. A característica que mais ressalta do potencial coletivo,

$$V(q) = E_0 + V_1(q - q_0) + V_2(q - q_0)^2 + V_3(q - q_0)^3 + V_4(q - q_0)^4,$$

é a presença de um mínimo deslocado com relação a q_0 , que é o mínimo da parte diagonal do núcleo de energia. A causa deste deslocamento é o termo :

$$V_3(q - q_0)^3 + V_4(q - q_0)^4,$$

que é proveniente das contribuições cúbica e quártica da expansão do núcleo de energia. Porém estes termos estão associados, como já discutimos, à assimetria do núcleo de energia e conseqüentemente devem ser mais relevantes para o ${}^4\text{He}$ que para o ${}^{16}\text{O}$ e ${}^{40}\text{Ca}$. É óbvio que, quando

a aproximação quadrática for válida, e isto ocorre para o $^{16}_0\text{O}$ e $^{40}_0\text{Ca}$, o mínimo do potencial coletivo é muito próximo daquele da parte diagonal do núcleo de energia. Este fato nos permite assegurar que, a rigor, a parte diagonal do núcleo de energia não funciona como um potencial coletivo.

É sabido que o mínimo do potencial coletivo está associado ao raio quadrático médio nuclear e, conseqüentemente, um deslocamento nesse mínimo acarreta uma variação no valor daquele raio.

Um cálculo variacional efetuado com funções de onda de oscilador harmônico, utilizando o parâmetro do oscilador como parâmetro variacional, nos leva à expressão:

$$\langle r_o^2 \rangle = \frac{\int \rho(\vec{r}, b) r^2 d^3r}{n^\circ \text{ de partículas}} \Big|_{b_{\text{mínimo}}} = \frac{\text{constante}}{n^\circ \text{ de partículas}} \Big|_{b_o}^2$$

para o raio quadrático médio. A constante é $2C_1$, já obtida no apêndice C. Se a interação usada é a de Skyrme, então b_o é o mínimo da parte diagonal do núcleo de energia do método de coordenadas geradoras, escrito em termos de b (ou alternativamente em) e calculado com aquela interação.

Se usarmos agora os resultados das constantes do apêndice C e os mínimos da parte diagonal do núcleo de energia calculados, a título de exemplo, com a interação SIII, obteremos raios nucleares de 1,92 fm, 2,64 fm e 3,41 fm respectivamente para o ^4He , $^{16}_0\text{O}$ e $^{40}_0\text{Ca}$. Contudo estes resultados devem apresentar erros, que diminuem com a massa, em conseqüência do fato do mínimo da parte diagonal do núcleo de energia não ser o mínimo do potencial coletivo.

O procedimento de cálculo de raios nucleares com o método de coordenadas geradoras leva em conta os elementos de fora da

diagonal do núcleo de energia através do uso da função de onda obtida do próprio método. O raio é calculado a partir da expressão :

$$\langle r^2 \rangle \equiv \frac{\langle f | r^2 | f \rangle}{\langle f | f \rangle} = \frac{\int f^*(b) \langle b | r^2 | b \rangle f(b) db db'}{\int f^*(b) \langle b | b \rangle f(b) db db'} \quad \text{V.12}$$

onde

$$|f\rangle = \int f(b) |b\rangle db$$

e $|b\rangle$ é o estado gerador que usamos no capítulo IV (b é o parâmetro do oscilador). Como sabemos que, matricialmente ,

$$f = N^{-\frac{1}{2}} g ,$$

onde g é a auto função ortonormalizada da hamiltoniana coletiva, e que

$$U^+ f = \frac{U^+ g}{\sqrt{\Lambda}}$$

onde U é a transformação que diagonaliza a função de superposição, e Λ é o espectro desta função, podemos reescrever a expressão (V.12) na versão discretizada para fins de cálculo numérico

$$\langle r^2 \rangle = \sum_{ij} \left(\frac{U^+ g}{\sqrt{\Lambda}} \right)_i^+ \left(U^+ \langle r^2 \rangle_{bb'} U \right)_{ij} \left(\frac{U^+ g}{\sqrt{\Lambda}} \right)_j ,$$

onde $\langle r^2 \rangle_{bb'}$ é a matriz montada a partir da expressão para $\langle b | r^2 | b \rangle$ calculada nos pontos da malha do cálculo numérico, e que tem, para o ^4He , a forma analítica :

$$\langle b' | r^2 | b \rangle = \frac{3}{2} b b' \left(\frac{2 b b'}{b^2 + b'^2} \right)^{5/2}$$

Os valores para U , Λ , bem como para a função de onda orthonormalizada, g , são obtidos da resolução da equação de Griffin e Wheeler com o método de Flocard e Vautherin como descrito no capítulo III.

Com a interação SIII o novo raio para o ${}^4\text{He}$ é 1,82 fm. Este valor é maior que aquele de 1,72 fm de Flocard e Vautherin por causa da precisão numérica usada para a função de onda g , pois, enquanto aqueles autores usam da ordem de 150 pontos na malha, usamos apenas 20 (que se mostra, porém, suficiente para os cálculos das energias). Ressaltamos novamente que nosso interesse se concentra no estudo do ${}^4\text{He}$ em função do fato de que, tendo a hamiltoniana coletiva termos de até 4ª ordem no potencial, haverá nesse caso uma diferença sensível de valores para os pontos de mínimo daquele potencial e da parte diagonal do núcleo de energia; porém, para os núcleos de ${}^{16}\text{O}$ e ${}^{40}\text{Ca}$ apresentam os valores para os raios nucleares praticamente iguais nos dois procedimentos. A figura 4 mostra parte do potencial coletivo calculado com a interação SIII para o ${}^4\text{He}$. O ponto de mínimo desse potencial coletivo tem o valor correspondente de b igual a 1,39 fm. Quando se calcula o raio nuclear a partir de funções de onda de oscilador harmônico com aquele parâmetro do oscilador, usando-se a expressão já conhecida

$$r_0 = \sqrt{\frac{3}{2} b^2},$$

obtem-se um resultado de 1,70 fm, que é praticamente aquele de Flocard e Vautherin.

Os valores para o raio nuclear do ${}^4\text{He}$, calculado com as demais interações são praticamente os mesmos que aquele obtido com SIII, com exceção da interação SI que dá reconhecidamente um raio

menor, a saber 1,63 fm.

O módulo de incompressibilidade nuclear

$$K = \frac{1}{A} \left. \frac{d^2 V(q)}{dq^2} \right|_{q=q_0}$$

pode ser calculado a partir da expressão (V.9) para o potencial coletivo. Os resultados obtidos para o $^{16}_0$ e $^{40}_{Ca}$ com a interação SIII são 244 Mev e 246,7 Mev respectivamente. Estes valores são maiores que aqueles de 200,5 Mev e 231 Mev obtidos para os mesmos núcleos, porém calculados com a parte diagonal do núcleo de energia (IV.8) :

$$K = \frac{1}{A} \left. \frac{d^2 \tilde{h}(x)}{dx^2} \right|_{x=x_0}$$

como sugerido por Flocard e Vautherin (Flo Vau -76).

A implicação dessa diferença nos valores do módulo de incompressibilidade é dupla. Inicialmente verifica-se novamente que a parte diagonal do núcleo de energia não se identifica com o potencial coletivo, e em segundo lugar nota-se claramente que a incompressibilidade é maior do que Flocard e Vautherin sugerem; conseqüentemente este fato reforça a suposição de que as energias de excitação são grandes comparadas com outros cálculos teóricos (Kre Ga Fae -75, Kre Spe -74) devido ao alto valor de K decorrente da interação de Skyrme, e não ao método de coordenadas geradoras.

O cálculo do módulo de incompressibilidade com a interação SIII para o 4He dá um valor de 326 Mev, que é bem superior aos 144,5 Mev obtidos do cálculo variacional.

V.G) Efeitos espúrios do centro de massa nas funções de onda coletivas

A escolha da função de onda geradora é um dos pontos críticos para o bom desempenho do método de coordenadas geradoras, e pode ser responsável em parte pelas inadequações dos resultados finais. Podemos avaliar em que medida nossos cálculos para as energias e raios nucleares podem ser afetados pela escolha da função de onda geradora através de uma análise da adequação daquela função de onda para os nossos propósitos.

Em nossos cálculos anteriores a função de onda geradora para o ${}^4\text{He}$ era da forma :

$$|b\rangle = \mathcal{N} e^{-\sum_{i=1}^4 \vec{r}_i^2 / 2b^2}$$

Esta função de onda pode ser reescrita como :

$$|b\rangle = \mathcal{N} e^{-\frac{2\vec{R}^2}{b^2}} e^{-\sum_{i=1}^4 \vec{\rho}_i^2 / 2b^2} \quad \text{V.14}$$

quando se usa a transformação

$$\vec{\rho}_i = \vec{r}_i - \vec{R}$$

sendo $\vec{R}$ a posição do centro de massa definida como :

$$\vec{R} = \frac{1}{4} \sum_{i=1}^4 \vec{r}_i$$

As novas coordenadas intrínsecas $\vec{\rho}_i$ não são independentes; elas são vinculadas pela condição adicional :

$$\sum_{i=1}^4 \vec{\rho}_i = 0$$

Nesta forma a função de onda geradora se separa numa contribuição do centro de massa e numa intrínseca, sendo ambas dependentes da coordenada geradora b .

Embora a hamiltoniana de muitos corpos tivesse sido corrigida exatamente dos efeitos devidos às correlações do centro de massa para o ${}^4\text{He}$ (devemos lembrar que o valor esperado dos termos cruzados $\bar{\phi}_i \cdot \bar{\phi}_j$ nas funções de onda determinantis do ${}^4\text{He}$ se anulam como mencionado anteriormente), a nossa função de onda traz dentro de si aqueles efeitos e, conseqüentemente, não está adaptada à invariância de Galileo da hamiltoniana.

A eliminação dos erros devidos aos efeitos das correlações do centro de massa, introduzidos face à escolha da função de onda geradora, pode, porém, ser efetivada se considerarmos funções de onda geradoras da forma

$$|\tilde{b}\rangle = \mathcal{N} e^{-\sum_{i=1}^4 \bar{r}_i^2 / 2b^2} e^{-2\bar{R}^2 \left(\frac{b^2 - b_0^2}{b^2 b_0^2} \right)}$$

que pode ser expressa como :

$$|\tilde{b}\rangle = \mathcal{N} e^{-\frac{2\bar{R}^2}{b^2}} e^{-\sum_{i=1}^4 \bar{p}_i^2 / 2b^2} e^{-2\bar{R}^2 \left(\frac{b^2 - b_0^2}{b^2 b_0^2} \right)}$$

quando se usa (V.14).

A grande vantagem desta função de onda é que, escrita na forma

$$|\tilde{b}\rangle = \mathcal{N} e^{-\frac{2\bar{R}^2}{b_0^2}} e^{-\sum_{i=1}^4 \bar{p}_i^2 / 2b^2}$$

$$= |\xi(b_0) \varphi(b)\rangle ,$$

V.15

ela já se apresenta separada numa contribuição para o centro de massa com um parâmetro b_0 fixo e uma parte intrínseca que depende da coordenada geradora.

Desta forma podemos dizer que usamos uma coordenada geradora somente para a parte intrínseca, sendo a contribuição do centro de massa tornada independente daquela intrínseca através da fixação do valor de seu parâmetro. Sempre que esta separação for possível teremos controle sobre a contribuição do movimento do centro de massa, sem a necessidade de se usar outras técnicas de projeção.

O núcleo de energia intrínseco com esta nova função de onda geradora (V.15) pode ser obtido a partir dos resultados do cálculo com aquela função de onda anterior (V.14).

Como

$$\langle \tilde{b} | H | \tilde{b} \rangle = \langle \tilde{b} | H_{int} | \tilde{b} \rangle + \langle \tilde{b} | H_{cm} | \tilde{b} \rangle$$

então, usando (V.15)

$$\langle \varphi(b) | H_{int} | \varphi(b) \rangle \langle \xi(b_0) | \xi(b_0) \rangle = \langle \varphi(b) \xi(b_0) | H | \varphi(b) \xi(b_0) \rangle + \\ - E_{cm}(b_0) \langle \varphi(b) | \varphi(b) \rangle .$$

Por outro lado a função de onda (V.14)

$$\langle \varphi(b) | H_{int} | \varphi(b) \rangle \langle \xi(b) | \xi(b) \rangle = \langle \varphi(b) \xi(b) | H | \varphi(b) \xi(b) \rangle + \\ - \langle \xi(b) | H_{cm} | \xi(b) \rangle \langle \varphi(b) | \varphi(b) \rangle .$$

Dessas duas expressões para os elementos da matriz de H_{int} podemos escrever:

$$\langle \varphi(b) | H_{int} | \varphi(b') \rangle = \frac{\left[\langle \varphi(b) \zeta(b) | H | \varphi(b') \zeta(b') \rangle - \langle \zeta(b) | H_{cm} | \zeta(b') \rangle \langle \varphi(b) | \varphi(b') \rangle \right] \langle \zeta(b_0) | \zeta(b_0) \rangle}{\langle \zeta(b) | \zeta(b') \rangle},$$

que só depende do núcleo de energia da formulação anterior.

Vimos anteriormente que:

$$\begin{aligned} \langle \varphi(b) \zeta(b) | H | \varphi(b') \zeta(b') \rangle &= \langle \varphi(b) \zeta(b) | \varphi(b') \zeta(b') \rangle h(b, b') \\ &= \langle \varphi(b) | \varphi(b') \rangle \langle \zeta(b) | \zeta(b') \rangle h(b, b'), \end{aligned}$$

o que nos possibilita reescrever

$$\frac{\langle \varphi(b) | H_{int} | \varphi(b') \rangle}{\langle \varphi(b) | \varphi(b') \rangle} = h(b, b') \frac{\langle \zeta(b_0) | \zeta(b_0) \rangle}{\langle \zeta(b) | \zeta(b') \rangle} - \langle \zeta(b) | H_{cm} | \zeta(b') \rangle \frac{\langle \zeta(b_0) | \zeta(b_0) \rangle}{\langle \zeta(b) | \zeta(b') \rangle}.$$

O elemento de matriz do operador de energia cinética, $-\frac{\hbar^2}{2mA} \nabla_{cm}^2$, bem como a função de superposição para o centro de massa são calculados usando-se a expressão analítica de $\zeta(b)$

$$\zeta(b) = \left(\frac{2}{\sqrt{\pi} b} \right)^{3/2} e^{-\frac{2R^2}{b^2}}$$

e o que se obtém é

$$\langle \zeta(b) | H_{cm} | \zeta(b') \rangle = \frac{3\hbar^2}{2mA} \frac{4}{b^2 + b'^2} \left(\frac{2bb'}{b^2 + b'^2} \right)$$

e

$$\langle \psi(b) | \psi(b) \rangle = \left(\frac{2bb'}{b^2 + b'^2} \right)^{3/2}$$

respectivamente. Por outro lado o produto escalar

$$\langle \psi(b_0) | \psi(b_0) \rangle = 1,$$

e conseqüentemente

$$\frac{\langle \varphi(b) | H_{int} | \varphi(b') \rangle}{\langle \varphi(b) | \varphi(b') \rangle} = h(b, b') - \frac{3\hbar^2}{2mA} \cdot \frac{4}{b^2 + b'^2}.$$

Assim o núcleo de energia intrínseco é escrito como

$$\langle \varphi(b) | H_{int} | \varphi(b') \rangle = \langle \varphi(b) | \varphi(b') \rangle \left[h(b, b') - \frac{3\hbar^2}{2mA} \cdot \frac{4}{b^2 + b'^2} \right],$$

e a função de superposição intrínseca

$$\langle \varphi(b) | \varphi(b') \rangle = \left(\frac{2bb'}{b^2 + b'^2} \right)^{3/2}.$$

Transformando-se como anteriormente $b = b_0 e^{-x}$, e substituindo-se a expressão para $h(x, x')$, obtida diretamente de (IV. 6) temos finalmente :

$$\langle \varphi(x) | H_{int} | \varphi(x') \rangle = \text{sech}^{9/2}(x-x') \tilde{h}(x, x') \quad \text{V.16}$$

onde $\tilde{h}(x, x')$ é exatamente aquele obtido na capítulo anterior (equação IV.8), e que contém as correções devidas ao centro de massa.

É interessante notar que a estrutura de (V.16) é exatamente aquela de (IV.8). O que diferencia estas equações é que (V.16) é escrita agora em termos da função de onda intrínseca.

A tabela VI nos mostra os resultados para as energias para as seis interações de Skyrme.

As alterações nos parâmetros coletivos, devidos à nova escolha da função de onda geradora, têm também características provenientes daquela função de onda. A função de superposição

$$\langle \varphi(x) | \varphi(x') \rangle = \text{sech}^{9/2}(x-x')$$

é agora mais " larga " que aquela calculada anteriormente. Nota-se de (V.16) que o núcleo de energia é alterado unicamente devido à mudança do expoente da função de superposição; conseqüentemente esta modificação é responsável pelas redefinições nos parâmetros coletivos em relação àqueles anteriores.

Desta argumentação segue a conclusão que, descontados os efeitos das correlações do centro de massa através de uma nova função de onda geradora, o movimento é agora descrito com parâmetros coletivos que têm seus valores alterados com relação aos calculados, ^{anteriormente} alteração esta que é proveniente da redefinição do expoente da função de superposição. A tabela VII exhibe os valores para os parâmetros de massa provenientes das duas formulações, calculados com as interações de Skyrme. Nota-se dessa tabela que o parâmetro de massa é reduzido por um fator $(9/2)^2 / 6^2$, como era esperado, uma vez que os coeficientes de expansão em série de $\tilde{\varphi}(x, x')$ são os mesmos em ambos os casos, e conseqüentemente na aproximação quadrática (que dá a contribuição dominante para a massa) a razão daqueles parâmetros é a razão dos expoentes da função de superposição.

O cálculo do raio nuclear é também alterado em fun-

ção desta nova escolha para a função de onda geradora, pois agora usa-se somente a função de onda intrínseca:

$$\begin{aligned} \langle r^2 \rangle &\equiv \frac{\langle f | r^2 | f \rangle}{\langle f | f \rangle} = \frac{\int f^*(b') \langle \varphi(b') | r^2 | \varphi(b) \rangle f(b) \langle \xi(b_0) | \xi(b_0) \rangle db db'}{\int f^*(b') \langle \varphi(b') | \varphi(b) \rangle f(b) \langle \xi(b_0) | \xi(b_0) \rangle db db'} \\ &= \frac{\int f^*(b') \langle \varphi(b') | r^2 | \varphi(b) \rangle f(b) db db'}{\int f^*(b') \langle \varphi(b') | \varphi(b) \rangle f(b) db db'} \end{aligned}$$

Como discutido anteriormente pode-se então calcular o raio nuclear a partir desta expressão quando se substitui

$$\langle \varphi(b') | r^2 | \varphi(b) \rangle = \frac{9}{8} b b' \left(\frac{2 b b'}{b^2 + b'^2} \right)^{1/2}$$

para o ${}^4\text{He}$. Os valores para os raios nucleares obtidos para as seis interações de Skyrme estão na tabela VIII, e mostram um bom acordo com o valor de $r = 1,44$ fm de (Af Ah Al -69). A figura 5 nos mostra o gráfico do novo potencial coletivo. A partir deste potencial coletivo para o ${}^4\text{He}$ podemos também calcular o seu módulo de incompressibilidade. Para compararmos com aquele calculado anteriormente usamos a interação SIII e obtivemos o valor $K = 336$ Mev. Este valor de K é 18,4 % maior que aquele calculado sem se eliminar os efeitos espúrios do centro de massa. Contudo a discrepância maior aparece quando se compara este resultado com $K = 144,5$ Mev, obtido do cálculo variacional. Esses resultados para o ${}^4\text{He}$ devem ser olhados com uma certa reserva, pois são obtidos de uma hamiltoniana coletiva calculada com uma aproximação não muito boa para a função de superposição.

CAPÍTULO VI

Conclusões

É nossa intenção nesse capítulo somente ressaltar aqueles pontos que, embora já tenham surgido no desenvolvimento deste trabalho, se mostram importantes na medida em que se constituem em uma descrição melhor do movimento coletivo em relação a tratamentos teóricos anteriores.

Em primeiro lugar ressaltaremos o procedimento de A. Toledo Piza e E. Passos (Pi Pa -77) como fundamental no sentido de se obter hamiltonianas coletivas, a partir daquelas microscópicas de muitos corpos, usando para isto o Teorema Espectral da Análise Funcional e o ansatz do método de coordenadas geradoras. A vantagem deste procedimento em relação ao método de coordenadas geradoras é a ausência de problemas de caráter cinemático comuns naquele método; paralelamente a análise de soluções exatas por aquele procedimento permite localizar as origens de possíveis erros em cálculos numéricos com método de coordenadas geradoras (Ga Pi -78) decorrentes do truncamento indevido do subespaço coletivo.

Quando se estuda a vibração monopolar de núcleos esféricos como o ${}^4\text{He}$, ${}^{16}\text{O}$ e ${}^{40}\text{Ca}$ várias propriedades nucleares são melhor compreendidas como consequência do uso explícito de uma hamiltoniana coletiva.

No sentido da obtenção das hamiltonianas coletivas manifestou-se como válida a aproximação gaussiana para a função de superposição como consequência dos valores grandes do expoente da função de superposição exata, que correspondem a valores grandes dos números de partículas no núcleo, e a expansão quadrática para o núcleo de energia, quando se pretende estudar os núcleos mais pesados ${}^{16}\text{O}$ e ${}^{40}\text{Ca}$, embora para o ${}^4\text{He}$ estas aproximações não sejam tão boas; o que faz com

que tenhamos que expandir o núcleo de energia até termos de 4ª ordem. Estes termos de ordem superior ao quadrático, e que são indispensáveis para o ${}^4\text{He}$ face à forma do núcleo de energia deste núclídeo, são responsáveis por grandes alterações nos resultados obtidos através da hamiltoniana coletiva quando comparados com aqueles obtidos por um cálculo variacional puro (que usa somente a parte diagonal do núcleo de energia).

Estudamos em particular as energias de transição, o raio e o módulo de incompressibilidade nuclear daqueles três núclídeos, e os efeitos das correlações do centro de massa na função de onda geradora do ${}^4\text{He}$, onde tais efeitos não são desprezíveis.

Com a eliminação dos efeitos das correlações do centro de massa, através de uma nova função de onda geradora que fixa o valor do parâmetro do oscilador da função de onda que descreve o centro de massa, conseguimos obter para o ${}^4\text{He}$ uma energia de transição de 38,54 Mev, que junto com aquelas de 31,3 Mev e 28,0 Mev para o ${}^{16}\text{O}$ e ${}^{40}\text{Ca}$ respectivamente, satisfazem bem a previsão $\hbar\Omega \propto A^{-\frac{1}{3}}$ para o modo monopolar. Vale ressaltar que se os efeitos do centro de massa não fossem eliminados esta sistemática não seria seguida no caso do ${}^4\text{He}$.

Os cálculos para os raios quadráticos médios nucleares se mostraram em bom acordo com aqueles experimentais, tendo sido importante também neste caso a correção dos efeitos do centro de massa, a qual contribui com uma redução da ordem de 20 % no valor do raio do ${}^4\text{He}$, obtido através de cálculos que não eliminam aqueles efeitos espúrios. Obviamente os efeitos do centro de massa são menos importantes para os núcleos mais pesados, e conseqüentemente suas correções são menores que aquela para o ${}^4\text{He}$. Não tentamos, porém, avaliar mais precisamente o valor destas correções.

Das propriedades nucleares estudadas o módulo de incompressibilidade, K, foi a que apresentou maior discrepância quando comparados os resultados obtidos do método variacional e do potencial coletivo respectivamente. A variação mais dramática dos resultados

ocorre para o ${}^4\text{He}$, que apresenta o valor de 144,5 Mev para o módulo de incompressibilidade calculado com aparte diagonal do núcleo de energia e a interação SIII, e 386,0 Mev quando se usa o potencial coletivo obtido da mesma interação. É extremamente importante enfatizar que esta discrepância não é devida à escolha particular da interação utilizada; estes valores são praticamente mantidos com todas as interações, exceto a SV, que apresenta um módulo de incompressibilidade menor em função de se ter o coeficiente $t_3 = 0$, o que transforma aquela interação numa de dois corpos. Estes resultados para o ${}^4\text{He}$, contudo, não podem ser considerados como o melhor valor para o seu módulo de incompressibilidade, porque o potencial coletivo do qual se calcula aquela propriedade nuclear é obtido da aproximação gaussiana para a função de superposição. Como já discutimos anteriormente esta aproximação não é boa para o ${}^4\text{He}$. Podemos, porém, estimar o valor de K a partir das energias de transição obtidas do cálculo numérico com a função de superposição exata e com sua aproximação gaussiana respectivamente

$$K_{ex} \simeq \frac{\Omega_{ex}^2}{\Omega_{gws}^2} K_{gws}$$

O valor estimado agora é da ordem de 300 Mev para o ${}^4\text{He}$, que ainda apresenta uma grande discrepância com relação aos 144,5 Mev obtidos pelo método variacional.

A origem desta discrepância está na diferença fundamental que existe entre a parte diagonal do núcleo de energia e o potencial coletivo. Variacionalmente o módulo de incompressibilidade é calculado da curvatura da parte diagonal do núcleo de energia. Por outro lado a curvatura do potencial coletivo contém contribuições provenientes dos termos anarmônicos da parte diagonal do núcleo de energia $(\eta - \eta_0)^3$ e $(\eta - \eta_0)^4$. Como o mínimo do potencial é deslocado com relação a η_0 , aqueles termos dão uma contribuição adicional

àquele advindo de $(\eta - \gamma_0)^2$. Sabemos, contudo, que a contribuição para a curvatura do potencial coletivo, que vem de $(\eta - \gamma_0)^2$, está relacionada com a curvatura da parte diagonal do núcleo de energia. Desta maneira as contribuições adicionais que aparecem no módulo de incompressibilidade nuclear, quando se usa o potencial coletivo, fazem com que ele se torne maior que aquele calculado variacionalmente. Face a essa análise esperamos que para os núcleos mais pesados, ^{16}O e ^{40}Ca , as discrepâncias sejam menores. De fato esta suposição é verificada. Para o ^{16}O a diferença entre os dois tratamentos é de 44 Mev, enquanto para o ^{40}Ca aquela diferença é de 15 Mev para a interação que tomamos como exemplo.

É interessante notar que as energias de excitação obtidas satisfazem agora a previsão $\hbar\Omega \propto K^{1/2}$ do modelo hidrodinâmico (Wa -62). Porém, no caso do ^4He é preciso notar que K, calculado a partir da curvatura do potencial coletivo, é uma caracterização não muito apropriada da "dureza" do modo devido à grande importância de anarmonicidades já para o primeiro estado excitado.

Finalmente observamos que as energias de excitação são altas quando comparadas com outros resultados teóricos que usam outras interações que não a de Skyrme. Este fato, aliado à verificação que cálculos tipo RPA (Be Tsa -75) e TDHF (En et al -75) que usam interações de Skyrme dão resultados próximos aos nossos, nos permite concluir, como já observado por Flocard e Vautherin (Flo Vau -76), que a interação de Skyrme é a responsável por aquelas energias de excitação altas e não o método utilizado.

APÊNDICE A

Os elementos de matriz da interação de Skyrme para cálculos com o método de coordenadas geradoras já foram exhaustivamente estudados por Brink (Bri -66) e Flocard e Vautherin (Flo Vau -75,78). O artigo de Brink e Vautherin (Bri Vau -72) traz também, em apêndice, cálculos detalhados de elementos de matriz da interação de Skyrme para cálculos tipo Hartree - Fock que são bastante instrutivos.

É nossa intenção neste apêndice calcular simplesmente alguns elementos de matriz dos operadores de um e dois corpos com o intuito de exemplificação da técnica. Os elementos restantes podem ser obtidos (não são expostos porque se tornariam repetitivos) nas referências citadas.

A1) Operador de um corpo

$$t = - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$$

Usando a expressão do apêndice de (Bri -66)

$$\langle \alpha' | T | \alpha \rangle = \langle \alpha' | \alpha \rangle \sum_{\lambda \mu} \langle \varphi_\lambda | t_\mu | \varphi_\mu \rangle (I^{-1})_{\mu\lambda}$$

Explicitando spins e isospins em nossas funções de onda

$$\langle \alpha' | T | \alpha \rangle = \langle \alpha' | \alpha \rangle \sum_{\substack{i,j \\ \sigma_1, \sigma_2 \\ \tau_1, \tau_2}} \langle \varphi_i \sigma_1 \tau_1 | t_j | \varphi_j \sigma_2 \tau_2 \rangle (I^{-1})_{ij}$$

Somando-se agora nos spins e isospins e substituindo

$$t_j = - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$$

teremos

$$\begin{aligned}\langle \alpha' | T | \alpha \rangle &= -\frac{4\hbar^2}{2m} \langle \alpha' | \alpha \rangle \sum_{ij} \langle \varphi_i | \nabla^2 | \varphi_j \rangle (I^{-1})_{ij} \\ &= -\frac{4\hbar^2}{2m} \langle \alpha' | \alpha \rangle \sum_{ij} \left[\int \varphi_i^*(\bar{r}; \alpha') \nabla^2 \varphi_j(\bar{r}; \alpha) d^3r \right] (I^{-1})_{ij}\end{aligned}$$

Usando agora o teorema de Green e a definição de densidade de energia cinética temos

$$\begin{aligned}\langle \alpha' | T | \alpha \rangle &= \frac{4\hbar^2}{2m} \langle \alpha' | \alpha \rangle \sum_{ij} \left[\int \bar{\nabla} \varphi_i^*(\bar{r}; \alpha') \cdot \bar{\nabla} \varphi_j(\bar{r}; \alpha) d^3r \right] (I^{-1})_{ij} \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \langle \alpha' | \alpha \rangle \int T(\bar{r}, \bar{r}; \alpha, \alpha') d^3r\end{aligned}$$

ou

$$\langle \alpha' | T | \alpha \rangle = \langle \alpha' | \alpha \rangle \int \frac{\hbar^2}{2m} T(\bar{r}, \bar{r}; \alpha, \alpha') d^3r$$

A2) Operador de dois corpos

Calcularemos somente o elemento

$$v_{12} = t_0 (1 + \chi_0 P_\sigma) \delta(\bar{r}_1 - \bar{r}_2)$$

Tomamos a expressão

$$\begin{aligned}\langle \alpha' | v_{12} | \alpha \rangle &= \frac{\langle \alpha' | \alpha \rangle}{2} \sum_{\substack{ijkl \\ a\alpha' b\beta'}} \langle \varphi_i a \varphi_j b | v_{12} | \varphi_k \alpha' \varphi_l \beta' \rangle \left[(I^{-1})_{ki} (I^{-1})_{lj} \delta_{a\alpha'} \delta_{b\beta'} + \right. \\ &\quad \left. - (I^{-1})_{kj} (I^{-1})_{li} \delta_{a\beta'} \delta_{b\alpha'} \right],\end{aligned}$$

onde a e b indicam spin e isospin ~~respectiva~~ -
mente, do apêndice de (Bri -66) e somamos nos
spins e explicitamos os isospins

$$\begin{aligned}
 \langle \alpha' | v_{12} | \alpha \rangle &= \frac{t_0}{2} \langle \alpha' | \alpha \rangle \sum_{ijkl} \left\{ 4 \left[\langle \psi_{in} \psi_{jn} | \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) | \psi_{kn} \psi_{ln} \rangle + \right. \right. \\
 &+ \langle \psi_{ip} \psi_{jp} | \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) | \psi_{kp} \psi_{lp} \rangle + \langle \psi_{in} \psi_{jp} | \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) | \psi_{kn} \psi_{lp} \rangle + \\
 &+ \left. \langle \psi_{ip} \psi_{jn} | \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) | \psi_{kp} \psi_{ln} \rangle \right] (I^{-1})_{ki} (I^{-1})_{lj} + \\
 &- 2 \left[\langle \psi_{in} \psi_{jn} | \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) | \psi_{kn} \psi_{ln} \rangle + \langle \psi_{ip} \psi_{jp} | \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) | \psi_{kp} \psi_{lp} \rangle \right] (I^{-1})_{kj} (I^{-1})_{li} \Big\} + \\
 &+ \frac{t_0 \times_0}{2} \langle \alpha' | \alpha \rangle \sum_{ijkl} \left\{ 2 \left[\langle \psi_{in} \psi_{jn} | \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) | \psi_{kn} \psi_{ln} \rangle + \right. \right. \\
 &+ \langle \psi_{ip} \psi_{jp} | \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) | \psi_{kp} \psi_{lp} \rangle + \langle \psi_{ip} \psi_{jn} | \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) | \psi_{kp} \psi_{ln} \rangle + \\
 &+ \left. \langle \psi_{in} \psi_{jp} | \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) | \psi_{kn} \psi_{lp} \rangle \right] (I^{-1})_{ki} (I^{-1})_{lj} + \\
 &- 4 \left[\langle \psi_{in} \psi_{jn} | \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) | \psi_{kn} \psi_{ln} \rangle + \langle \psi_{ip} \psi_{jp} | \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) | \psi_{kp} \psi_{lp} \rangle \right] (I^{-1})_{kj} (I^{-1})_{li} \Big\}
 \end{aligned}$$

Usando-se a definição para a densidade de neutrons

$$\rho_n(\bar{r}) = 2 \sum_{\lambda\mu} \varphi_{\lambda}^*(\bar{r}; \alpha') \varphi_{\mu}(\bar{r}; \alpha) (\mathbf{I}^{-1})_{\lambda\mu}$$

e analogamente para protons, e lembrando que

$$\rho_n = \rho_p = \frac{1}{2} \rho \quad \text{para o modo isoescalar teremos}$$

$$\begin{aligned} \langle \alpha' | v_{12} | \alpha \rangle &= \langle \alpha' | \alpha \rangle \int \left[\frac{t_0}{2} (\rho_n^2 + \rho_p^2 + 2\rho_n \rho_p) - \frac{t_0}{4} (\rho_n^2 + \rho_p^2) \right. \\ &\quad \left. + \frac{t_0 x_0}{4} (\rho_n^2 + \rho_p^2 + 2\rho_n \rho_p) - \frac{t_0 x_0}{2} (\rho_n^2 + \rho_p^2) \right] d^3 r \end{aligned}$$

que dá finalmente

$$\langle \alpha' | v_{12} | \alpha \rangle = \langle \alpha' | \alpha \rangle \int \left[\frac{t_0}{2} \rho^2 - \frac{t_0}{8} \rho^2 + \frac{t_0 x_0}{4} \rho^2 - \frac{t_0 x_0}{2} \rho^2 \right] d^3 r$$

$$\langle \alpha' | v_{12} | \alpha \rangle = \langle \alpha' | \alpha \rangle \int \frac{3}{8} t_0 \rho^2(\bar{r}) d^3 r .$$

APÊNDICE B

Partindo da definição original da densidade de energia cinética

$$T(\bar{r}; \alpha, \alpha') = 4 \sum_{\lambda \mu} (I^{-1})_{\mu\lambda} \nabla \phi_{\lambda}^*(\bar{r}; \alpha') \cdot \nabla \phi_{\mu}(\bar{r}; \alpha)$$

e substituindo novamente as funções de onda que dependem da coordenada geradora α por uma função de onda que depende de $\bar{\alpha}$ teremos

$$\begin{aligned} T(\bar{r}; \bar{\alpha}) &= 4 \sum_{\lambda \mu} (I^{-1})_{\mu\lambda} \left[\nabla e^{\chi(\bar{r})} \sum_{\nu} L_{\lambda\nu} \phi_{\nu}^*(\bar{r}; \bar{\alpha}) \right] \left[\nabla e^{-\chi(\bar{r})} \sum_{\kappa} M_{\kappa\mu} \phi_{\kappa}(\bar{r}; \bar{\alpha}) \right] \\ &= 4 \sum_{\lambda \mu} (I^{-1})_{\mu\lambda} \left\{ \left[\nabla \chi(\bar{r}) e^{\chi(\bar{r})} \sum_{\nu} L_{\lambda\nu} \phi_{\nu}^*(\bar{r}; \bar{\alpha}) + e^{\chi(\bar{r})} \sum_{\nu} L_{\lambda\nu} \nabla \phi_{\nu}^*(\bar{r}; \bar{\alpha}) \right] \cdot \right. \\ &\quad \left. \left[-\nabla \chi(\bar{r}) e^{-\chi(\bar{r})} \sum_{\kappa} M_{\kappa\mu} \phi_{\kappa}(\bar{r}; \bar{\alpha}) + e^{-\chi(\bar{r})} \sum_{\kappa} M_{\kappa\mu} \nabla \phi_{\kappa}(\bar{r}; \bar{\alpha}) \right] \right\} \end{aligned}$$

Fazendo o produto escalar teremos:

$$\begin{aligned} T(\bar{r}; \bar{\alpha}) &= 4 \sum_{\lambda \mu} (I^{-1})_{\mu\lambda} \left\{ -[\nabla \chi(\bar{r})]^2 \sum_{\nu \kappa} L_{\lambda\nu} \phi_{\nu}^*(\bar{r}; \bar{\alpha}) M_{\kappa\mu} \phi_{\kappa}(\bar{r}; \bar{\alpha}) + \right. \\ &\quad + \nabla \chi(\bar{r}) \cdot \sum_{\nu \kappa} L_{\lambda\nu} M_{\kappa\mu} \phi_{\nu}^*(\bar{r}; \bar{\alpha}) \nabla \phi_{\kappa}(\bar{r}; \bar{\alpha}) + \\ &\quad - \nabla \chi(\bar{r}) \cdot \sum_{\nu \kappa} L_{\lambda\nu} M_{\kappa\mu} \nabla \phi_{\nu}^*(\bar{r}; \bar{\alpha}) \phi_{\kappa}(\bar{r}; \bar{\alpha}) + \\ &\quad \left. \sum_{\nu \kappa} L_{\lambda\nu} M_{\kappa\mu} \nabla \phi_{\nu}^*(\bar{r}; \bar{\alpha}) \cdot \nabla \phi_{\kappa}(\bar{r}; \bar{\alpha}) \right\} \end{aligned}$$

Lembrando-se que

$$\sum_{\substack{\lambda, \mu \\ \nu \neq k}} (I^{-1})_{\mu\lambda} L_{\lambda\nu} M_{\nu\mu} \varphi_{\nu}^*(\bar{r}; \bar{\alpha}) \varphi_{\mu}(\bar{r}; \bar{\alpha}) = \sum_{\nu} \varphi_{\nu}^*(\bar{r}; \bar{\alpha}) \varphi_{\nu}(\bar{r}; \bar{\alpha}) = \rho_0(\bar{r}, \bar{r}) \quad B.1$$

teremos

$$T(\bar{r}; \bar{\alpha}) = - \left[\bar{\nabla} \chi(\bar{r}) \right]^2 \rho_0(\bar{r}, \bar{r}) + 4 \sum_{\substack{\lambda, \mu \\ \nu \neq k}} (I^{-1})_{\mu\lambda} L_{\lambda\nu} M_{\nu\mu} \bar{\nabla} \varphi_{\nu}^*(\bar{r}; \bar{\alpha}) \cdot \bar{\nabla} \varphi_{\mu}(\bar{r}; \bar{\alpha}) .$$

Como

$$I_{\lambda\mu} = (\tilde{L} \tilde{M})_{\lambda\mu}$$

então

$$\begin{aligned} T(\bar{r}; \bar{\alpha}) &= - \left[\bar{\nabla} \chi(\bar{r}) \right]^2 \rho_0(\bar{r}, \bar{r}) + 4 \sum_{\nu} \bar{\nabla} \varphi_{\nu}^*(\bar{r}; \bar{\alpha}) \cdot \bar{\nabla} \varphi_{\nu}(\bar{r}; \bar{\alpha}) \\ &= - \left[\bar{\nabla} \chi(\bar{r}) \right]^2 \rho_0(\bar{r}, \bar{r}) + T_0(\bar{r}, \bar{r}) \end{aligned}$$

Assim

$$T(\bar{r}; \bar{\alpha}) = T_0(\bar{r}, \bar{r}) - \left[\bar{\nabla} \chi(\bar{r}) \right]^2 \rho_0(\bar{r}, \bar{r}) .$$

Analogamente para a densidade de corrente

$$\bar{J}(\bar{r}) = 2 \sum_{\lambda, \mu} (I^{-1})_{\mu\lambda} \left[\varphi_{\lambda}^*(\bar{r}; \alpha') \bar{\nabla} \varphi_{\mu}(\bar{r}; \alpha) - (\bar{\nabla} \varphi_{\lambda}^*(\bar{r}; \alpha')) \varphi_{\mu}(\bar{r}; \alpha) \right]$$

$$\begin{aligned} J(\bar{r}) &= 2 \sum_{\lambda, \mu} (I^{-1})_{\mu\lambda} \left\{ e^{\chi(\bar{r})} \sum_{\nu} L_{\lambda\nu} \varphi_{\nu}^*(\bar{r}; \bar{\alpha}) \bar{\nabla} \left[e^{-\chi(\bar{r})} \sum_{\kappa} M_{\mu\kappa} \varphi_{\kappa}(\bar{r}; \bar{\alpha}) \right] + \right. \\ &\quad \left. - \left[\bar{\nabla} e^{\chi(\bar{r})} \sum_{\nu} L_{\lambda\nu} \varphi_{\nu}^*(\bar{r}; \bar{\alpha}) \right] \cdot e^{-\chi(\bar{r})} \sum_{\kappa} M_{\mu\kappa} \varphi_{\kappa}(\bar{r}; \bar{\alpha}) \right\} . \end{aligned}$$

Aplicando o gradiente e usando novamente B.1

$$\vec{j}(\vec{r}) = -\vec{\nabla} \chi(\vec{r}) \rho_0(\vec{r}, \vec{r}) + 2 \sum_{\nu} \left[\phi_{\nu}^*(\vec{r}; \vec{\alpha}) \vec{\nabla} \phi_{\nu}(\vec{r}; \vec{\alpha}) - (\vec{\nabla} \phi_{\nu}^*(\vec{r}; \vec{\alpha})) \phi_{\nu}(\vec{r}; \vec{\alpha}) \right]$$

que dá finalmente

$$\vec{j}(\vec{r}) = -\rho_0(\vec{r}, \vec{r}) \vec{\nabla} \chi(\vec{r}) .$$

APÊNDICE C

Calcularemos, no mesmo espírito do apêndice A, somente os coeficientes do núcleo de energia do ${}^4\text{He}$, a título de exemplificação deste tipo de cálculo. De maneira idêntica são feitos os cálculos para o ${}^{16}\text{O}$ e ${}^{40}\text{Ca}$.

$$a) \bar{\alpha}^2 \int \rho_0(\bar{r}; \bar{\alpha}) r^2 d^3r = \frac{1}{\bar{\alpha}^2} \int T_0(\bar{r}; \bar{\alpha}) d^3r = 2C_1$$

Para o ${}^4\text{He}$

$$\rho_0(\bar{r}; \bar{\alpha}) = \frac{4\bar{\alpha}^3}{\Gamma(3/2)} \frac{2}{4\pi} e^{-\bar{\alpha}^2 r^2} \left[L_0^{\frac{1}{2}}(r^2 \bar{\alpha}^2) \right]^2 Y_{00}^*(\theta, \phi) Y_{00}(\theta, \phi)$$

com

$$L_0^{\frac{1}{2}}(r^2 \bar{\alpha}^2) = 1$$

Como

$$2C_1 = \bar{\alpha}^2 \int \rho_0(\bar{r}; \bar{\alpha}) r^2 d^3r$$

$$2C_1 = \frac{\bar{\alpha}^2 \times 4\bar{\alpha}^3 \times 2 \times 4\pi}{\Gamma(3/2) \times 4\pi} \int_0^\infty e^{-\bar{\alpha}^2 r^2} r^4 dr$$

$$2C_1 = \frac{8\bar{\alpha}^5}{\Gamma(3/2)} \int_0^\infty e^{-\bar{\alpha}^2 r^2} r^4 dr$$

É conveniente lembrar que

$$\int_0^{\infty} r^m e^{-ar^2} dr = \frac{\Gamma\left(\frac{m+1}{2}\right)}{2 a^{\frac{m+1}{2}}}$$

Assim

$$2C_1 = \frac{8\bar{\alpha}^5 \Gamma(5/2)}{\Gamma(3/2) 2(\bar{\alpha}^2)^{5/2}} = 6 \Rightarrow C_1 = 3$$

b)

$$\frac{1}{\bar{\alpha}^3} \int \rho_o^2(\bar{r}; \bar{\alpha}) d^3r = C_2$$

Logo, usando a expressão para a densidade do ^4He

$$C_2 = \frac{16 \times 4 \times \bar{\alpha}^6 \times 4\pi}{[\Gamma(3/2)]^2 (4\pi)^2 \bar{\alpha}^3} \int_0^{\infty} e^{-2\bar{\alpha}^2 r^2} r^2 dr$$

Analogamente ao cálculo anterior

$$C_2 = \frac{16 \times 4 \times \bar{\alpha}^3 \times \Gamma(3/2)}{[\Gamma(3/2)]^2 \times 4\pi \times 2 \times 2^{3/2} \times \bar{\alpha}^3} = \frac{16}{(2\pi)^{3/2}}$$

Como

$$C_2 = \frac{4d_o}{(2\pi)^{3/2}} \Rightarrow d_o = 4$$

c)

$$\frac{1}{\bar{\alpha}^6} \int \rho_o^3(\bar{r}; \bar{\alpha}) d^3r = C_3$$

$$C_3 = \frac{64 \times \bar{\alpha}^9 \times 8 \times 4\pi}{\left[\Gamma(3/2)\right]^3 (4\pi)^3 \bar{\alpha}^6} \int_0^\infty e^{-3\bar{\alpha}^2 r^2} r^2 dr$$

$$C_3 = \frac{64}{(\sqrt{3}\pi)^3}$$

Como

$$C_3 = \frac{64 f_0}{(\pi\sqrt{3})^3} \Rightarrow f_0 = 1$$

d)

$$\frac{1}{\bar{\alpha}^5} \int \left[\bar{\nabla} \rho_0(\vec{r}; \vec{\alpha}) \right]^2 d^3r = C_4$$

Para o ^4He podemos escrever

$$\bar{\nabla} \rho_0(\vec{r}; \vec{\alpha}) = - \frac{4 \times 4 \times \bar{\alpha}^5 \times r}{\Gamma(3/2) \times 4\pi} e^{-\bar{\alpha}^2 r^2} \hat{e}_r$$

Logo

$$C_4 = \frac{1}{\bar{\alpha}^5} \frac{256 \times \bar{\alpha}^{10} \times 4\pi}{\left[\Gamma(3/2)\right]^2 (4\pi)^2} \int_0^\infty e^{-2\bar{\alpha}^2 r^2} r^4 dr$$

$$C_4 = \frac{48}{(2\pi)^{3/2}}$$

Porém

$$C_4 = \frac{4g_0}{(2\pi)^{3/2}} \Rightarrow g_0 = 12$$

Finalmente

e)

$$\frac{1}{\bar{\alpha}^5} \int \rho_0(\bar{r}; \bar{\alpha}) T_0(\bar{r}; \bar{\alpha}) d^3r = C_5$$

Uma vez que para o ^4He

$$T_0(\bar{r}; \bar{\alpha}) = \frac{8\bar{\alpha}^3}{4\pi \Gamma(3/2)} \left(\nabla e^{-\bar{\alpha}^2 \frac{r^2}{2}} \right) \cdot \left(\nabla e^{-\bar{\alpha}^2 \frac{r^2}{2}} \right)$$

então

$$C_5 = \frac{64 \times \bar{\alpha}^6 \times \bar{\alpha}^4 \times 4\pi}{[\Gamma(3/2)]^2 \times (4\pi)^2 \bar{\alpha}^5} \int_0^\infty e^{-2\bar{\alpha}^2 r^2} r^4 dr$$

$$C_5 = \frac{12}{(2\pi)^{3/2}}$$

Como identificamos

$$C_5 = \frac{2 h_0}{(2\pi)^{3/2}} \quad \text{então } h_0 = 6.$$

TABELA I

Parâmetros da interação de Skyrme

	t_0 MeV.fm ³	t_1 MeV.fm ⁵	t_2 MeV.fm ⁵	t_3 MeV.fm ⁶	x_0	W MeV.fm ⁵
SI	-1057,3	235,9	-100,0	14463,5	0,56	120,0
SII	-1169,9	586,6	-27,1	9331,1	0,34	105,0
SIII	-1128,75	395,0	-95,0	14000,0	0,45	120,0
SIV	-1205,6	765,0	35,0	5000,0	0,05	150,0
SV	-1248,29	970,56	107,22	0,0	-0,17	150,0
SVI	-1111,81	271,67	-138,33	17000,0	0,583	115,0

TABELA II

Valores numéricos dos coeficientes C_1 , d_0 , g_0 , h_0 e f_0

	C_1	d_0	g_0	h_0	f_0
${}^4\text{He}$	3	4	12	6	1
${}^{16}_0$	18	31	57	$\frac{249}{2}$	$\frac{116}{9}$
${}^{40}_{\text{Ca}}$	60	$\frac{1945}{16}$	$\frac{2595}{16}$	$\frac{23715}{32}$	$\frac{2060}{27}$

TABELA III

Energias do estado fundamental, do 1º estado excitado e de transição obtidas por Flocard e Vautherin (FV) e da aproximação quadrática.

	${}^4\text{He}$		${}^{16}_0$		${}^{40}\text{Ca}$	
	SIII	SIV	SIII	SIV	SIII	SIV
E_1 (FV) (Mev)	-32,93	-32,04	-140,32	-139,66	-403,26	-404,42
E_2 (FV) (Mev)	-5,35	-5,69	-108,65	-109,42	-374,86	-377,2
$\hbar\Omega$ (FV) (Mev)	27,58	26,35	31,67	30,24	28,4	27,22
E_1 (Mev)	-27,24	-27,32	-139,27	-138,7	-401,56	-402,7
E_2 (Mev)	7,66	6,47	-105,9	-106,62	-373,12	-375,31
$\hbar\Omega$ (Mev)	34,9	33,79	33,47	32,08	28,44	27,39

TABELA IV

Coefficientes do termo de energia cinética (SIII)

	$-C(\eta^2\gamma^0)/T^2(\text{MeV})$	$\frac{1}{T^3} \left[\frac{C(\gamma^2\gamma^2)}{4} - 6C(\eta^4\gamma^0) \right] (\text{MeV})$
${}^4\text{He}$	1,05	-3×10^{-3}
${}^{16}_0$	0,34	-3×10^{-4}
${}^{40}\text{Ca}$	0,09	-7×10^{-7}

TABELA V

Energias do estado fundamental, do 1º estado excitado e de transição da hamiltoniana de quarta ordem em q .

(Não se eliminam os efeitos de centro de massa)

	${}^4\text{He}$		${}^{16}\text{O}$		${}^{40}\text{Ca}$	
	SIII	SIV	SIII	SIV	SIII	SIV
E_1 (Mev)	-32,74	-31,93	-139,87	-139,17	-401,68	-402,8
E_2 (Mev)	-2,76	-2,69	-108,56	-109,09	-373,68	-375,85
$\hbar\Omega$ (Mev)	29,98	29,24	31,31	30,08	28,0	26,95

TABELA VI

Energias do estado fundamental, do 1º estado excitado e de transição do ${}^4\text{He}$, obtidas da solução numérica da equação de Griffin - Wheeler sem aproximações, eliminando-se os efeitos de C.M.

	SI	SII	SIII	SIV	SV	SVI
E_1 (Mev)	-45,43	-39,99	-41,21	-38,51	-37,16	-41,98
E_2 (Mev)	-2,74	-2,80	-2,67	-2,82	-2,89	-2,57
$\hbar\Omega$ (Mev)	42,69	37,19	38,54	35,69	34,27	39,41

TABELA VII

Parâmetros de inércia (em Mev) .

	SI	SII	SIII	SIV	SV	SVI
${}^4\text{He}$ T = 6	56,5	58,8	58,9	58,8	58,7	59,0
${}^4\text{He}$ T = 4,5	31,8	33,1	33,2	33,1	33,0	33,3
${}^{16}_0$ T = 36	307,1	316,2	317,1	315,8	314,9	317,6
${}^{40}\text{Ca}$ T = 120	1104,9	1130,7	1135,8	1126,7	1120,4	1139,1

TABELA VIII

Raios quadráticos médios nucleares do ${}^4\text{He}$, quando se eliminam os efeitos de centro de massa.

	SI	SII	SIII	SIV	SV	SVI
rms (fm)	1,33	1,40	1,39	1,42	1,44	1,38

Coeficientes da expansão do núcleo de energia (Mev)

	SI	SII	SIII	SIV	SV	SVI
${}^4\text{H}_2$	-29,51	-26,62	-26,30	-26,63	-26,61	-26,07
$C(\eta^0\gamma^0) {}^{16}\text{O}$	-144,69	-139,10	-139,58	-138,25	-138,09	-137,99
${}^{40}\text{Ca}$	-411,48	-403,36	-400,89	-402,26	-403,30	-398,54
	-41,19	-38,09	-37,93	-38,13	-38,25	-37,82
$C(\eta^2\gamma^0)$	-241,18	-227,51	-226,29	-228,15	-229,40	-225,46
	-663,71	-633,83	-628,14	-638,34	-645,42	-624,49
	321,62	280,25	288,95	269,49	258,42	294,10
$C(\eta^0\gamma^2)$	1729,23	1537,36	1604,46	1461,69	1379,74	1644,13
	4917,49	4445,58	4634,62	4231,48	3992,90	4744,11
	78,44	53,94	68,62	58,50	52,71	71,41
$C(\eta^2\gamma^2)$	382,26	313,57	349,66	274,55	231,08	371,15
	1131,32	955,13	1061,04	839,07	705,62	1123,07
	990,85	832,39	878,01	782,00	727,35	905,82
$C(\eta^0\gamma^3)$	5416,99	4632,84	4956,15	4291,18	3908,70	5151,82
	15448,61	13427,93	14358,68	12436,38	11293,13	14912,08
	26,97	23,86	24,38	23,20	22,53	24,68
$C(\eta^4\gamma^0)$	148,27	134,00	137,99	129,38	124,47	140,33
	417,96	383,49	394,35	370,86	357,13	400,59
	660,77	548,11	582,65	510,25	469,01	603,72
$C(\eta^2\gamma^2)$	3580,38	3019,62	3264,55	2762,10	2472,74	3412,96
	10259,04	8603,29	9512,74	8050,61	7179,01	9935,08
	1738,30	1403,96	1518,12	1284,04	1150,81	1588,52
$C(\eta^0\gamma^4)$	9639,83	7916,28	8696,84	7117,12	6207,43	9174,26
	27589,63	23024,65	25295,47	20573,71	17917,86	26661,21

Legenda para as figuras

FIG. 1

r_0 - função de superposição exata

$$r_1 = \frac{\text{função de superposição gaussiana}}{\text{função de superposição exata}}$$

$$r_2 = \frac{\text{espectro gaussiano}}{\text{espectro exato}}$$

FIG. 2A

Parte diagonal do núcleo de energia do ^4He e ^{16}O ;
interação SIII

FIG. 2B

Parte diagonal do núcleo de energia do ^{40}Ca ;
interação SIII

FIG. 3

Funções de onda do estado fundamental do ^{16}O e ^{40}Ca ;
interação SIII

FIG. 4

Potencial coletivo do ^4He com a interação SIII, sem
eliminar efeitos do movimento do centro de massa

FIG. 5

Potencial coletivo do ^4He com a interação SIII,
eliminando-se os efeitos do movimento do centro de massa

fig.1

fig.2A

fig.2B

fig.3

fig.5

Referências

- Bo -52 A. Bohr - Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 26 nº14(1952)
- Bo Mo -53 A. Bohr e B. Mottelson - Mat. Fys. Medd. Dan Vid. Selsk 27 nº16(1953)
- Vil -57 F. Villars - Ann. Rev. Nucl. Sci. 7 (1957) 185
- Le Ba -63 C. A. Levinson e M. Banerjee, em The many body problem (Interscience Publishers, 1963)
- Ta -58 T. Tamura - Fortschr. Phys. 6 (1958) 109
- Gri Whe -57 J. Griffin e J. Wheeler - Phys. Rev. 108 (1957) 311
- Hi Whe -53 D. Hill e J. Wheeler - Phys. Rev. 89 (1953) 1102
- Pi Pa et al -77 A. Toledo Piza, E. Passos, D. Galetti, M. C. Nemes e M.M. Watanabe - Phys. Rev. C15 (1977) 1477
- Pi Pa -77 A. Toledo Piza e E. Passos - Preprint IFUSP P/120 a ser publicado em Il Nuovo Cimento
- Flo Vau -75 H. Flocard e D. Vautherin - Phys. Lett. 55B (1975) 259
- Flo Vau -76 H. Flocard e D. Vautherin - Nucl. Phys. A264 (1976) 197
- Ga Pi -78 D. Galetti e A. Toledo Piza - Phys. Rev. C17 (1978) 774
- Sky -59 T. H. Skyrme - Nucl. Phys. 9 (1959) 616
- Pe Yo -57 R. Peierls e J. Yoccoz - Proc. Phys. Soc. A70 (1957) 381
- Pe Tho -62 R. Peierls e D. Thouless - Nucl. Phys. 38 (1962) 154
- Wo -70 C. W. Wong - Nucl. Phys. A147 (1970) 546
- Bri We -68 D. Brink e A. Weiguny - Nucl. Phys. A120 (1968) 59
- Ba -61 V. Bargmann - Comm. on Pure and Appl. Math.XIV(1961) 187
- Re Si M. Reed e B. Simon - Methods of Modern Mathematical Physics, Academic Press, 1972
- Ba Pro Bateman Project - Higher Transcendental Functions Erdelyi, Tricomi, Oberhetinger e Magnus Mc Graw Hill, 1983, vol.3
- Be et al -75 M. Beiner, H. Flocard, N. Giai e P. Quentin Nucl. Phys. A238 (1975) 29

- Bri -66 D. Brink - Proc. School of Phys. " Enrico Fermi ",
curso 36, ed. C. Bloch (Academic Press, New York, 1966)
- Kle -71 A. Klein - Proc. Mont Tremblant International Summer
School, 1971
- Kre Ga Fae -75 S. Krewald, J. Galonska e A. Faessler - Phys. Lett. 55B
(1975) 267
- Kre Spe -74 S. Krewald e J. Speth - Phys. Lett. 52B (1974) 295
- Af Ah Al -69 S. A. Afzal, A. Ahmad e S. Ali - Rev. Mod. Phys. 41
(1969) 247
- Wa -62 J. Walecka - Phys. Rev. 126 (1962) 653
- Be Tsa -75 G. Bertsch e S. Tsai - Phys. Rep. 18 (1975) 125
- En et al -75 Y. Engel, D. Brink, K. Goeke e S. Krieger - Nucl. Phys.
A249 (1975) 215